

Numerička matematika

6. predavanje

Saša Singer

`singer@math.hr`

`web.math.pmf.unizg.hr/~singer`

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Interpolacija splajnovima:
 - 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.
- Usporedba raznih vrsta interpolacije — primjer.

Informacije

Konzultacije (službeno):

- samo za NM: utorak u 15 sati (iza predavanja),
- petak, 12–14 sati, ili — po dogovoru.

Ne zaboravite, “žive” su i **domaće zadaće** na adresi

<http://web.math.hr/nastava/unm/zadace.php>

ili, izravno

<http://degiorgi.math.hr/nm/>

Dodatni bodovi “čekaju na vas”.

Informacije

Moja web stranica za **Numeričku matematiku** je

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

Tamo su kompletna **predavanja** iz prošlih godina, a stizat će i **nova** (kako nastaju).

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

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

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 6 tjedana):

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

Informacije — demonstratori

Kolegij “Numerička matematika” ima **dvije demonstratorice**:

- Gayatri Čaklović

- termin: **petak, 12–14.**

- e-mail: caklovicka@gmail.com

- Iva Manojlović

- termin: **ponedjeljak, 10–12.**

- e-mail: iva.manojlovic@student.math.hr

Demosice lijepo **mole** da im se **najavite** mailom bar **dan ranije!**

- Sastanak za demonstrature je pred **oglasnom pločom** (bar zasad).

Po dijelovima kubična interpolacija

Po dijelovima kubična interpolacija

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

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

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

$$p_k(x) = c_{0,k} + c_{1,k}(x - x_{k-1}) + c_{2,k}(x - x_{k-1})^2 + c_{3,k}(x - x_{k-1})^3,$$

za $x \in [x_{k-1}, x_k]$, i za $k = 1, \dots, n$. Razlog za ovaj zapis je značenje koeficijenata (Taylor u x_{k-1}) i stabilno računanje.

Broj nepoznatih parametara i broj uvjeta

Ukupno imamo n kubičnih polinoma.

- Za **svakog** od njih treba odrediti po 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

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

Ovi uvjeti automatski osiguravaju **neprekidnost** funkcije φ u svim **unutrašnjim** čvorovima mreže x_1, \dots, x_{n-1} .

Dodatni uvjeti interpolacije na derivaciju

Obično želimo da interpolacijska funkcija φ bude **glada**:

- barem klase $C^1[a, b]$, odakle slijedi zahtjev da
- **derivacija** funkcije φ mora biti **neprekidna** i u čvorovima.

Najlakši način da to dobijemo = **dodamo** točno još $2n$ uvjeta “**interpolacije**”, kao da interpoliramo i **derivaciju**, tj.

- za **svaki kubični** polinom p_k dodajemo još po **dva** uvjeta

$$\begin{aligned} p'_k(x_{k-1}) &= s_{k-1}, \\ p'_k(x_k) &= s_k, \end{aligned} \quad k = 1, \dots, n,$$

pri čemu su s_k **neki** brojevi. Njihovo stvarno značenje može biti **različito**, pa ćemo ga **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

$$p'_k(x_k) = p'_{k+1}(x_k) = s_k, \quad k = 1, \dots, n - 1.$$

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 kao i prije

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

Ponovimo što, zapravo, znači da je x_k dvostruki čvor za Hermiteovu interpolaciju u Newtonovom obliku.

Dvostruki čvorovi u podijeljenim razlikama

Ako se u podijeljenoj razlici $f[x_k, x_k + h]$, drugi čvor približava prvom, onda na limesu kad $h \rightarrow 0$ dobivamo

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

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

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

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

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}, t_{k+3}]$
x_{k-1}	f_{k-1}			
		s_{k-1}		
x_{k-1}	f_{k-1}		$\frac{f[x_{k-1}, x_k] - s_{k-1}}{h_k}$	
		$f[x_{k-1}, x_k]$		$\frac{s_k + s_{k-1} - 2f[x_{k-1}, x_k]}{h_k^2}$
x_k	f_k		$\frac{s_k - f[x_{k-1}, x_k]}{h_k}$	
		s_k		
x_k	f_k			

Newtonov oblik polinoma p_k

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

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

s tim da je

$$f[x_{k-1}, x_{k-1}] = s_{k-1},$$

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

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

Newtonov oblik polinoma p_k

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

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

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

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 onda glasi

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

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, vidimo 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 iz zadanih podataka:

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

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

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

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

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

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, ako ih znamo, tj. $s_k = f'(x_k)$.
- s_k su neke aproksimacije za $f'(x_k)$. Takve aproksimacije možemo lako naći numeričkim deriviranjem iz zadanih vrijednosti f_k .

Zato nema smisla proizvoljno zadati s_k , ili tražiti samo neprekidnost φ' u čvorovima, jer daju lošu aproksimaciju za f .

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, svaki **kubični** polinom p_k je

- određen **lokalno** — iz podataka na **svom** podintervalu, tj. ne ovisi o drugim kubičnim polinomima.
- **Razlog** = na rubovima su zadane **2** funkcijske vrijednosti i **2** vrijednosti derivacija.

Takva se interpolacija zove **po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija**.

Naziv “**Hermiteova**” znači: $s_k = f'_k$ su zadani **ulazni** podaci.

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

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

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

pri čemu je

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

Uočite da je ovdje ω_k jednak kvadratu polinoma čvorova ω_k^{lin} za po dijelovima linearnu interpolaciju na istoj mreži.

Za svaki x vrijedi $\omega_k(x) \geq 0$, pa je $|\omega_k| = \omega_k$. Ostaje samo još pronaći maksimum funkcije ω_k na intervalu $[x_{k-1}, x_k]$.

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Dovoljno je naći sve **lokalne** ekstreme funkcije ω_k u otvorenom intervalu, jer je na rubovima vrijednost jednaka 0.

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

Vrijednost ω_k u točki x_e je **kvadrat** vrijednosti $\omega_k^{\text{lin}}(x_e)$ za **po dijelovima linearnu** interpolaciju na istoj mreži čvorova

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

Iz $|\omega_k| = \omega_k$ slijedi da je x_e točka **lokalnog maksimuma** za $|\omega_k|$ i

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

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Kao i prije, neka je h **maksimalni razmak** susjednih čvorova

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

Onda, na čitavom intervalu $[a, b]$, možemo pisati

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

pri čemu je

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

Drugim riječima, ako **ravnomjerno** povećavamo broj čvorova, tako da $h \rightarrow 0$, onda i maksimalna greška teži u 0, tj. dobivamo **uniformnu** konvergenciju. To vrijedi i za **derivacije**!

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

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

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

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

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

Primjer — po dijelovima Hermiteova interp.

Primjer. Nađite po dijelovima kubičnu Hermiteovu interpolaciju za sljedeće podatke

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

Očito, treba naći dva kubična polinoma

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

Oba polinoma pišemo u standardnom obliku — oko početne točke odgovarajućeg intervala.

Primjer — po dijelovima Hermiteova interp.

Za polinom p_1 imamo sljedeću tablicu podijeljenih razlika

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

Iz nje dobivamo

$$\begin{aligned} p_1(x) &= 1 + 0(x - 0) + (x - 0)^2 - (x - 0)^2(x - 1) \\ &= 1 + (1 + 1)(x - 0)^2 - 1(x - 0)^3 \\ &= 1 + 2x^2 - x^3. \end{aligned}$$

Primjer — po dijelovima Hermiteova interp.

Na sličan način, za p_2 dobivamo tablicu podijeljenih razlika

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

pa je

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

Demo — po dijelovima kub. Hermiteova interp.

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

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

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

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

Numeričko deriviranje

Numeričko deriviranje — problem i nestabilnost

U praksi, često derivacije funkcije nisu dostupne, već treba

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

Sasvim općenito, na temelju istih podataka — funkcijskih vrijednosti, možemo tražiti i

- aproksimacije vrijednosti viših derivacija f'' , f''' , itd.

Oprez! Numeričko deriviranje je nestabilan problem.

- Ako podaci o funkcijskim vrijednostima imaju neku grešku, ta greška se, u principu, povećava u svakoj sljedećoj derivaciji. Ilustracija — malo kasnije.

Numeričko deriviranje — primjena i ideja

Formule za **numeričko deriviranje** imaju dvostruku **primjenu**.

- 🕒 U **praksi**, kad podaci dolaze iz mjerenja, koriste se **samo** za derivacije **niskog** reda — vrlo rijetko preko **četvrte**.
- 🕒 U **teoriji**, služe za izvod **numeričkih** metoda za rješavanje **običnih** i **parcijalnih diferencijalnih** jednažbi.

Osnovna **ideja** za nalaženje takvih **formula** je **ista** kao i za niz drugih **problema** u numeričkoj matematici. U ovom slučaju,

$$\text{aproksimacija derivacije} = \text{derivacija aproksimacije} \\ \text{(interpolacije)}.$$

Naime, jedina **aproksimacija** koju (zasad) znamo je

- 🕒 **interpolacijski polinom** za funkciju f u zadanim točkama.

Usput, baš te formule se najčešće koriste.

Derivacija funkcije \approx derivacija interp. polinoma

Poznate su vrijednosti funkcije f u točkama x_0, \dots, x_n .

Neka je p_n interpolacijski polinom, stupnja najviše n , za f u tim točkama (znamo da p_n postoji i jedinstven je).

Za aproksimaciju derivacije $f'(x)$ u nekoj točki x uzimamo

- derivaciju interpolacijskog polinoma p_n u toj točki x , tj.

$$f'(x) \approx p'_n(x).$$

Općenito, za aproksimaciju k -te derivacije $f^{(k)}(x)$ uzimamo

- k -tu derivaciju interpolacijskog polinoma p_n u točki x , tj.

$$f^{(k)}(x) \approx p_n^{(k)}(x).$$

Ovo ima smisla samo za $k \leq n$. U protivnom je $p_n^{(k)} \equiv 0$.

Greška numeričkog deriviranja iz interpolacije

Naravno, zanima nas **greška** ove aproksimacije

$$e_n^{(k)}(x) := f^{(k)}(x) - p_n^{(k)}(x), \quad \text{za } k \leq n.$$

Ako je f dovoljno **glatka** funkcija, ovu grešku dobivamo **deriviranjem greške** e_n interpolacijskog polinoma p_n .

Pretpostavke su **iste** kao i za grešku interpolacije, do na $n > 0$.

Teorem. Neka je $n \in \mathbb{N}$ i pretpostavimo da $f^{(n+1)}$ **postoji** na segmentu $[a, b]$.

- Neka su $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ međusobno različiti **čvorovi interpolacije**, i
- neka je p_n **interpolacijski polinom** za funkciju f u tim čvorovima.

Greška numeričkog deriviranja iz interpolacije

Dodatno, samo za jednostavniji zapis tvrdnje, neka su čvorovi poredani **uzlazno**, tako da je $x_0 < x_1 < \dots < x_n$.

Za bilo koji red **derivacije** $k \in \{1, \dots, n\}$ onda vrijede sljedeće dvije tvrdnje.

- Postoji $n + 1 - k$ međusobno **različitih** točaka $\xi_{k,0}, \dots, \xi_{k,n-k}$, koje se nalaze u intervalima

$$x_j < \xi_{k,j} < x_{j+k}, \quad j = 0, \dots, n - k,$$

i tim točkama vrijedi da je

$$e_n^{(k)}(\xi_{k,j}) = 0, \quad j = 0, \dots, n - k,$$

tj. te točke su **nultočke** greške $e_n^{(k)}$.

Greška numeričkog deriviranja iz interpolacije

- Za **svaku** točku $x \in [a, b]$, postoji točka η_k iz intervala $(x_{k,\min}, x_{k,\max}) \subseteq (a, b)$, gdje je

$$x_{k,\min} := \min\{\xi_{k,0}, \dots, \xi_{k,n-k}, x\},$$

$$x_{k,\max} := \max\{\xi_{k,0}, \dots, \xi_{k,n-k}, x\},$$

takva da za **grešku** aproksimacije k -te derivacije vrijedi

$$\begin{aligned} e_n^{(k)}(x) &:= f^{(k)}(x) - p_n^{(k)}(x) \\ &= \frac{(x - \xi_{k,0}) \cdots (x - \xi_{k,n-k})}{(n + 1 - k)!} f^{(n+1)}(\eta_k). \end{aligned}$$

Dokaz. Obje tvrdnje izlaze primjenom **Rolleovog** teorema.

Dokaz **druge** ide **isto** kao za grešku interpolacije (v. skripta). ■

Greška numeričkog deriviranja — komentari

U prvoj tvrdnji, nultočke $\xi_{k,0}, \dots, \xi_{k,n-k}$ greške $e_n^{(k)}$

ovise samo o funkciji f , a ne ovise o točki x .

Samo točka η_k iz druge tvrdnje ovisi o x .

Za dani $k \in \{1, \dots, n\}$, polinom

$$(x - \xi_{k,0}) \cdots (x - \xi_{k,n-k})$$

stupnja $n + 1 - k$, ovdje ima raniju ulogu polinoma čvorova ω .

On reprezentira ili osigurava poništavanje greške.

Kad bismo dozvolili da je $k = 0$, dobili bismo da je $\xi_{0,j} = x_j$, za $j = 0, \dots, n$ (nultočka $\xi_{0,j}$ se “stisne” u čvor x_j).

Greška numeričkog deriviranja — sažetak

Uzmimo da je n fiksno i da su čvorovi interpolacije relativno “bliski”, a točka x “nije daleko” od čvorova.

Neka je H maksimalna udaljenost do nekog čvora

$$H := \max_{i=0, \dots, n} |x - x_i|.$$

Za “male” H , odnosno, za $H \rightarrow 0$, greška aproksimacije k -te derivacije je reda veličine

$$e_n^{(k)}(x) = O(H^{n+1-k}), \quad \text{za } k = 0, \dots, n.$$

Ovo vrijedi i za aproksimaciju funkcije, tj. za $k = 0$.

- U svakoj sljedećoj derivaciji, gubimo po jedan tzv. “red” aproksimacije — eksponent pada za jedan.

Greška numeričkog deriviranja — sažetak

Ako su čvorovi **uzlazno** poredani, kao kod splajnova,

$$x_0 < x_1 < \cdots < x_n$$

i ako se točka x nalazi **unutar** intervala čvorova, tj. $x \in [x_0, x_n]$,

onda, umjesto konstante H , možemo pisati i h ,

gdje je h **maksimalni razmak čvorova** ili **dijametar mreže**

$$h := \max_{i=1, \dots, n} \{h_i := x_i - x_{i-1}\}.$$

Zaključak. Za bilo koji red derivacije k , možemo dobiti **aproksimacijsku formulu proizvoljno visokog reda** točnosti, tako da uzmemo dovoljno **veliki** n .

Oprez. Takve formule za numeričko deriviranje s **velikim** n imaju **ograničenu praktičnu vrijednost**.

Numeričko deriviranje — praksa

Primjena numeričkog deriviranja u praksi:

- red k je malen — rijetko preko 4,
- pripadne formule se izvode za male stupnjeve n (opet, rijetko preko 4), zbog sigurnog kraćenja u formulama.

Dodatno, vrlo rijetko se koristi u proizvoljnoj točki x .

- Najčešće je x upravo neki od čvorova interpolacije x_i ,
- ili neka posebna točka u kojoj dobivamo bolju ocjenu greške, uz malo jače pretpostavke na glatkoću funkcije f .

Te posebne točke su vrlo važne za praksu, a “ne vide” se iz prethodnog rezultata. Razlog: “preblage” pretpostavke na f ,

- jer tražimo samo da $f^{(n+1)}$ postoji na $[a, b]$.

Numeričko deriviranje — u posebnim točkama

U tom svjetlu, završni komentari na prethodni teorem. **Mane:**

- nultočke greške **ne znamo** unaprijed, jer ovise o f ,
- **preopćenit** je, pa ne daje “**finiju**” informaciju o grešci.

Jedina “**prednost**” — da vrijedi za **sve** redove derivacije $k \leq n$, i **nije** neka prednost za praksu (mali k , mali n).

Kako se dobivaju **posebne** točke s **boljom** greškom?

Prvo, krećemo od **jačih** pretpostavki na **glatkoću** funkcije f .

U formulama za k -tu derivaciju, **standardna** pretpostavka je:

- funkcija f ima još k derivacija **više** na $[a, b]$ i zadnja derivacija je **neprekidna**, tj.
- f je klase $C^{n+1+k}[a, b]$.

Numeričko deriviranje — tehnike izvoda

Tehnike za nalaženje formula, posebnih točaka i greške:

- eksplicitno deriviramo interpolacijski polinom i izraz za grešku interpolacijskog polinoma, ili
- grešku poznate formule dobivamo iz Taylorovog reda za f u odgovarajućim točkama.

Formule, također, možemo dobiti direktno iz Taylorovog reda za f , tzv. metodom neodređenih koeficijenata.

Nastavak: Formule za numeričko deriviranje i pripadnu grešku

- izvest ćemo samo za prvu derivaciju, tj. za $k = 1$,
- a navest ćemo rezultate za drugu derivaciju ($k = 2$), bez dokaza (to su zadaci).

Numeričko deriviranje — polinom prvog stupnja

Krenimo od najnižeg dozvoljenog stupnja, a to je $n = 1$.

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma p_1 za funkciju f , s čvorovima x_0 i x_1 , je

$$p_1(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1] (x - x_0).$$

Uočimo da je p'_1 konstantni polinom. Prema tome,

📍 aproksimacija prve derivacije f' u bilo kojoj točki x je podijeljena razlika

$$f'(x) \approx p'_1(x) = f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \frac{f_1 - f_0}{h},$$

gdje je $h := x_1 - x_0$ razmak čvorova.

Podijeljene razlike “unaprijed” i “unatrag”

Ako je točka x jedan od čvorova interpolacije, ove razlike imaju standardna imena, iako je to isti broj.

- Imena odgovaraju uzlaznom poretku čvorova $x_0 < x_1$.

Za $x = x_0$, aproksimaciju prve derivacije

$$f'(x_0) \approx \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}$$

zovemo podijeljena razlika unaprijed.

Za $x = x_1$, aproksimaciju prve derivacije

$$f'(x_1) \approx \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}$$

zovemo podijeljena razlika unatrag.

Greška podijeljene razlike

Prema ranijem teoremu, uz dogovor $x_0 < x_1$, ako f'' postoji na segmentu koji sadrži čvorove x_0, x_1 i točku x , aproksimacija prve derivacije $f'(x)$ podijeljenom razlikom ima grešku

$$e'_1(x) = (x - \xi_{1,0}) f''(\eta_1),$$

gdje je

- $\xi_{1,0} \in (x_0, x_1)$ i tu točku ne znamo (ovisi o f),
- $\eta_1 \in (\min\{x_0, x\}, \max\{x_1, x\})$ neka točka koja ovisi o x .

Ako se ograničimo na slučaj $x \in [x_0, x_1]$, onda su obje ove točke iz (x_0, x_1) i vrijedi ocjena

$$|e'_1(x)| \leq h f''(\eta_1).$$

Dakle, greška u svakoj točki x je reda veličine $O(h)$, za $h \rightarrow 0$.

Greška polinomne interpolacije — ponavljanje

Put do **boljeg** izraza za grešku ide preko **greške** interpolacije.

Teorem. Pretpostavimo da $f^{(n+1)}$ **postoji** na segmentu $[a, b]$. Neka je p_n **interpolacijski** polinom za funkciju f s međusobno različitim **čvorovima** interpolacije $x_k \in [a, b]$, za $k = 0, \dots, n$.

Za **svaku** točku $x \in [a, b]$, **postoji** točka ξ u intervalu

$$x_{\min} = \min\{x_0, \dots, x_n, x\} < \xi < \max\{x_0, \dots, x_n, x\} = x_{\max},$$

takva da za **grešku** interpolacijskog polinoma vrijedi

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

Pitanje. Uz koje uvjete na f , **smijemo derivirati** (po x) ovaj izraz za grešku, tj. njegovu **desnu** stranu?

Derivacija greške interpolacijskog polinoma

Probajmo! Derivacijom po x (derivacija produkta) dobivamo

$$e'_n(x) = \frac{\omega'(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) + \frac{\omega(x)}{(n+1)!} \cdot \frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi).$$

Jedini problematični član je **zadnji**. Naime, točka ξ **ovisi** o x .

Sasvim općenito, $\xi(x)$ uopće **ne mora** biti **funkcija**, a kamo li još i **diferencijabilna**!

Međutim, ako **sljedeća** derivacija $f^{(n+2)}$ **postoji** i **neprekidna** je na $[a, b]$, onda je

🔴 $\xi(x)$ **diferencijabilna** funkcija od x (probajte dokazati!), pa taj član smijemo **derivirati** — na pr. kao “složenu” funkciju.

Derivacija greške interpolacijskog polinoma

Osim toga, onda za **svaki** x , postoji točka $\xi_1 \in (x_{\min}, x_{\max})$ takva da je

$$\frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi(x)) = \frac{1}{n+2} f^{(n+2)}(\xi_1).$$

Ovo se najlakše dokazuje preko podijeljenih razlika s **višestrukim** čvorovima. Skica dokaza:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} &= \frac{d}{dx} f[x_0, \dots, x_n, x] \\ &= f[x_0, \dots, x_n, x, x] = \frac{f^{(n+2)}(\xi_1)}{(n+2)!}. \end{aligned}$$

To odgovara “**Newtonovom**” obliku **greške** interpolacijskog polinoma, $e_n(x) = \omega(x) f[x_0, \dots, x_n, x]$.

Derivacija greške interpolacijskog polinoma

Zaključak. Ako je $f \in C^{(n+2)}[a, b]$, onda za **svaku** točku $x \in [a, b]$, **postoje** točke ξ i ξ_1 u intervalu (x_{\min}, x_{\max}) , gdje je

$$x_{\min} = \min\{x_0, \dots, x_n, x\}, \quad x_{\max} = \max\{x_0, \dots, x_n, x\},$$

takve da za **derivaciju greške** interpolacijskog polinoma vrijedi

$$\begin{aligned} e'_n(x) &= f'(x) - p'_n(x) \\ &= \frac{\omega'(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) + \frac{\omega(x)}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\xi_1). \end{aligned}$$

Polinom čvorova ω ima stupanj $n+1$, a njegova derivacija ω' ima stupanj n . Osim toga, **nultočke** derivacije ω' leže **između** čvorova x_{i-1} i x_i — i baš **one** su tražene **posebne** točke. ■

Greška derivacije interpolacijskog polinoma

Evo **zašto**. Neka je, kao i ranije, H **maksimalna** udaljenost od točke x do nekog čvora

$$H := \max_{i=0,\dots,n} |x - x_i|.$$

Uz malo truda oko ocjene $\omega'(x)$, dobivamo da za **red veličine greške** aproksimacije **prve** derivacije vrijedi

$$e'_n(x) = \begin{cases} O(H^n), & \text{ako je } \omega'(x) \neq 0, \\ O(H^{n+1}), & \text{ako je } \omega'(x) = 0, \end{cases}$$

za “**male**” H , odnosno, za $H \rightarrow 0$.

Dakle, u **nultočkama** derivacije ω' dobivamo **manju grešku**, tj. **bolju** aproksimaciju derivacije $f'(x)$ — za **jedan red više!**

Greška derivacije — posebni slučajevi

U općem izrazu za grešku aproksimacije prve derivacije

$$e'_n(x) = \frac{\omega'(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) + \frac{\omega(x)}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\xi_1),$$

posebno su interesantna dva slučaja — kad ostaje samo jedan od članova u ovoj formuli.

Ako je točka x baš jedan od čvorova interpolacije, tj. $x = x_i$, za neki i , onda je $\omega(x_i) = 0$. Za grešku u čvoru x_i onda vrijedi

$$e'_n(x_i) = \frac{\omega'(x_i)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi).$$

Napomena. Iako tada nema člana koji sadrži $f^{(n+2)}$, još uvijek $f^{(n+2)}$ mora postojati, da ne dobijemo neodređeni oblik $0 \cdot \infty$.

Numeričko deriviranje u čvorovima interpolacije

Numeričko deriviranje u čvoru interpolacije

Neka je p_n interpolacijski polinom za funkciju f s čvorovima x_0, \dots, x_n , napisan u Newtonovom obliku

$$p_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}),$$

Ako $f^{(n+1)}$ postoji na cijelom intervalu $[a, b]$ koji sadrži sve čvorove i točku x , onda grešku možemo napisati u obliku

$$e_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{\omega(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_0),$$

gdje je $\xi_0 \in (x_{\min}, x_{\max})$.

Polinom p_n ne ovisi o numeraciji čvorova, pa je najlakše gledati njegovu derivaciju baš u “prvom” čvoru x_0 — on se javlja u svim faktorima i u polinomu čvorova!

Numeričko deriviranje u čvoru interpolacije

Za derivaciju produkta linearnih faktora u točki x_0 vrijedi

$$[(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_k)]' \Big|_{x=x_0} = (x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_k).$$

Deriviranjem p_n , a zatim uvrštavanjem $x = x_0$, dobivamo

$$p'_n(x_0) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2] (x_0 - x_1) \\ + \cdots + f[x_0, x_1, \dots, x_n] (x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_{n-1}).$$

Ako f ima još jednu derivaciju, tj. ako $f^{(n+2)}$ postoji na $[a, b]$, onda je greška ove aproksimacije za prvu derivaciju $f'(x_0)$

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

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 $h \rightarrow 0$.

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

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

Sugestivnija oznaka je

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

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

$$p'_2(x_0) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_{-1}] (x_0 - x_1).$$

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}	$\frac{f_0 - f_{-1}}{h}$	
x_0	f_0	$\frac{f_1 - f_0}{h}$	$\frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2}$
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 ,

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

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

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$
x_0	f_0	$\frac{f_1 - f_0}{h}$	
x_1	f_1		$\frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}$
x_2	f_2	$\frac{f_2 - f_1}{h}$	

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka

Konačno, aproksimacija derivacije u x_0 je

$$\begin{aligned} p'_2(x_0) &= f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2] (x_0 - x_1) \\ &= \frac{f_1 - f_0}{h} - h \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2} \\ &= \frac{-f_2 + 4f_1 - 3f_0}{2h}, \end{aligned}$$

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.

Međutim, 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,

$$f'(x_0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + e'_2(x_0), \quad e'_2(x_0) = -h^2 \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}.$$

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

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

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

$$f'(x_0) = \frac{\hat{f}_1 - \hat{f}_{-1}}{2h} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{-1}}{2h} + e'_2(x_0).$$

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**

$$err_2 = f'(x_0) - \frac{\hat{f}_1 - \hat{f}_{-1}}{2h} = -\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{-1}}{2h} + e'_2(x_0).$$

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

Koliko malen smije biti h ?

Za drugi član koristimo **ocjenu** za $e'_2(x_0)$, uz pretpostavku da je $f^{(3)}$ neprekidna na $[a, b]$, pa zajedno dobivamo

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

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

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

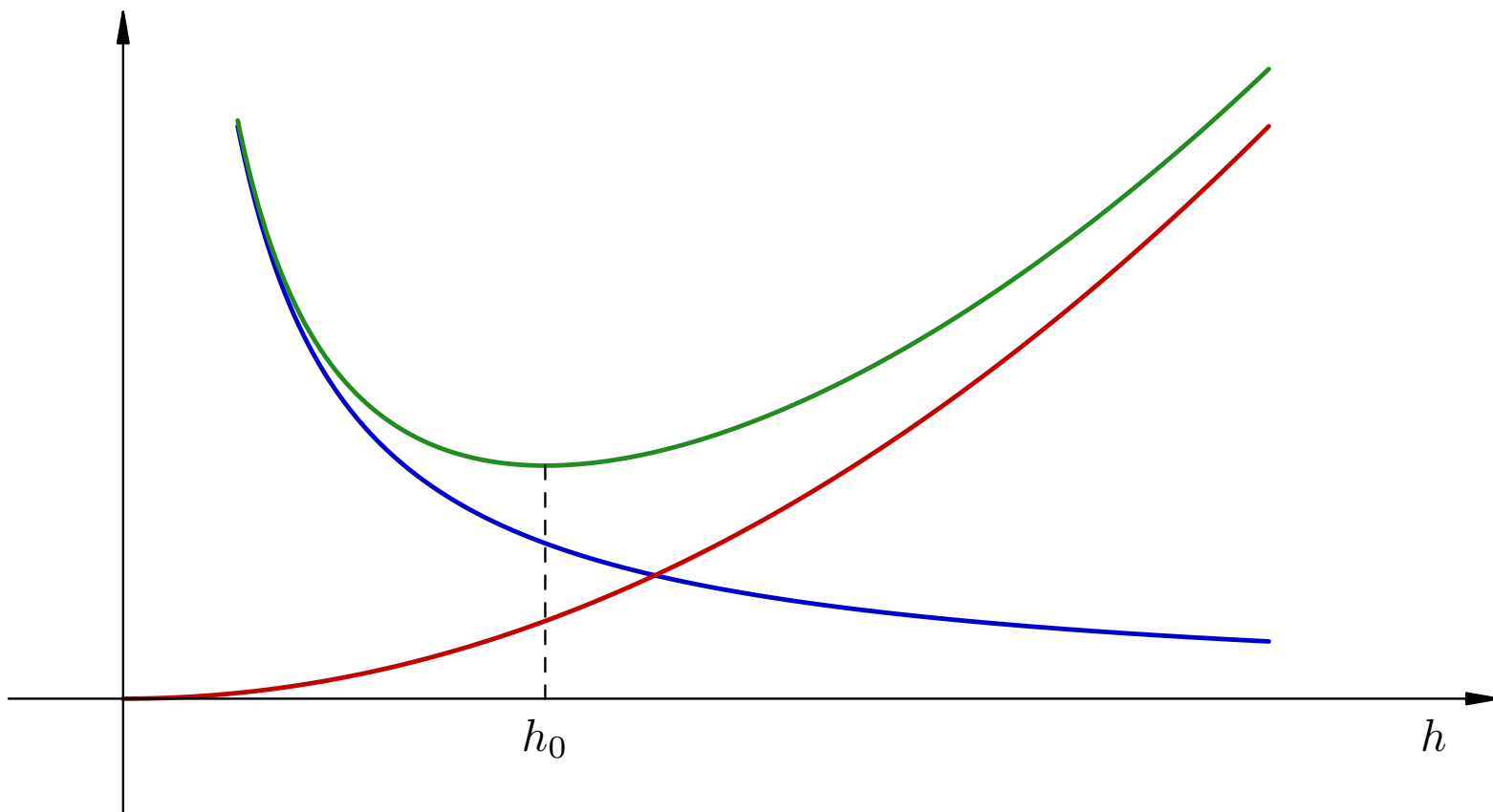
Ponašanje ove **ocjene** i njezina dva **člana** u ovisnosti od h možemo prikazati sljedećim grafom.

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 aproksimacije derivacije simetričnom podijeljenom razlikom,
- zelena boja — označava zbroj grešaka $e(h)$.

Optimalni h_0



Optimalni h_0 i minimum greške

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 **ukupne greške** 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, u još **ozbiljnijem** obliku, kod formula za aproksimaciju derivacija **višeg** reda.

Zadatak. Napravite sličnu analizu za “običnu” podijeljenu razliku **unaprijed**, kad je greška aproksimacije derivacije

$$e'_1(x_0) = -\frac{f^{(2)}(\xi)}{2} h.$$

Pokažite da tad **najmanja ukupna** greška reda veličine $O(\varepsilon^{1/2})$.

Po dijelovima kubična kvazihermiteova interpolacija

Po dijelovima kubična kvazihermiteova interp.

Sad se možemo vratiti problemu kako napraviti **po dijelovima kubičnu** interpolaciju, ako

- **nemamo** zadane **prve** derivacije ($s_k = f'_k$),

tj. zadane su **samo** funkcijske vrijednosti f_k , za $k = 0, \dots, n$.

U tom slučaju,

- derivacije možemo **aproksimirati** na različite **načine**,

- a samu interpolaciju zvat ćemo **kvazihermiteova** po dijelovima kubična interpolacija.

Napomena. Kod bilo koje **aproksimacije** derivacije, **greška** po dijelovima kubične interpolacije **bitno ovisi** o tome

- koliko je “**dobra**” aproksimacija derivacije.

Podijeljene razlike unaprijed

Za aproksimacije prvih derivacija u čvorovima interpolacije x_k , najjednostavnije je uzeti **podijeljene razlike**. One mogu biti

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

ovisno o tome **koji linearni** interpolacijski polinom koristimo za numeričko deriviranje.

Ako koristimo podijeljene razlike **unaprijed**, onda je

$$s_k = \begin{cases} \frac{f_{k+1} - f_k}{x_{k+1} - x_k}, & \text{za } k = 0, \dots, n-1, \\ \frac{f_n - f_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}, & \text{za } k = n. \end{cases}$$

Podijeljene razlike unazad

Ako koristimo podijeljene razlike **unazad**, onda je

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

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** — **istog reda** veličine kao kod po dijelovima **linearne** interpolacije.

Simetrične razlike kao aproksimacije derivacije

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

$$s_k = \begin{cases} \frac{f_1 - f_0}{h}, & \text{za } k = 0, \\ \frac{f_{k+1} - f_{k-1}}{2h}, & \text{za } k = 1, \dots, n-1, \\ \frac{f_n - f_{n-1}}{h}, & \text{za } k = n. \end{cases}$$

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 pripadne po dijelovima kubične kvazihermiteove interpolacije obično dobivaju **ime** po **načinu aproksimacije** derivacija.

Na pr., derivaciju u točki x_k **aproksimiramo** tako da povučemo

- **kvadratni** interpolacijski polinom u x_{k-1} , x_k i x_{k+1} ,
- a zatim ga **deriviramo** u srednjem čvoru x_k .

Pripadna kvazihermiteova interpolacija zove se

- **Besselova** po dijelovima kubična interpolacija.

U **prvoj** i **posljednjoj** točki **ne možemo** postupiti tako,

- jer **nema** lijeve točke x_{-1} , odnosno, desne točke x_{n+1} .

Besselova aproksimacija derivacija — sredina

Derivaciju u x_0 aproksimiramo tako da povučemo

- kvadratni interpolacijski polinom u x_0, x_1 i x_2 ,
- a zatim ga deriviramo u lijevom čvoru x_0 .

Slično, derivaciju u x_n aproksimiramo tako da povučemo

- kvadratni interpolacijski polinom u x_{n-2}, x_{n-1} i x_n ,
- a zatim ga deriviramo u desnom čvoru x_n .

U unutrašnjim čvorovima x_k , za $k = 1, \dots, n - 1$, pripadni kvadratni interpolacijski polinom je

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

Besselova aproksimacija derivacija — sredina

Deriviranjem i uvrštavanjem x_k dobivamo

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

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

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

tj. s_k je **težinska srednja vrijednost** podijeljene razlike unaprijed i unatrag, s **pozitivnim** težinama h_{k+1} i h_k .

Za $h_k = h_{k+1}$ dobivamo **simetričnu** razliku $s_k = f[x_{k-1}, x_{k+1}]$.

Besselova aproksimacija derivacija — početak

Za $k = 0$, pripadni **kvadratni** interpolacijski polinom je

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

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_0 dobivamo

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

Ovdje, **težine** uz podijeljene razlike imaju **suprotne** predznake.

Besselova aproksimacija derivacija — kraj

Za $k = n$, pripadni **kvadratni** interpolacijski 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

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

Besselova aproksimacija derivacija — greška

Dakle, za Besselovu po dijelovima kubičnu interpolaciju stavljamo

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

Greška je reda veličine

- $O(h^2)$ u aproksimaciji derivacije, odnosno,
- $O(h^3)$ u aproksimaciji funkcije.

Akimina aproksimacija derivacija — sredina

Još jedna varijanta aproksimacije derivacija “s imenom”.

Akima je 1970. godine dao sljedeću aproksimaciju, koja

- **usrednjava** podijeljene razlike preko 5 susjednih čvorova,
- s ciljem da se spriječe **oscilacije** interpolacijske funkcije φ :

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

uz

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

i

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

Ideja. Neka su $T_k = (x_k, f_k)$ točke podataka gledane u **ravnini**. Ako su **tri susjedne** točke na **istom** pravcu i T_k je neka od njih, za s_k uzmi **koeficijent smjera** tog pravca. T_k srednja $\Leftrightarrow w_k = 0$.

Akimina aproksimacija derivacija — rubovi

U slučaju $w_{k-1} = w_{k+1} = 0$, uzima se **aritmetička sredina**

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

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

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

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

Ovdje nam **fali** $f[x_{-1}, x_0]$. Zato podijeljenu razliku $f[x_0, x_1]$ interpretiramo kao **sredinu** susjednih **podijeljenih razlika**, tj.

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

Akimina aproksimacija derivacija — rubovi

Odatle slijedi da je

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

odnosno

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

Za $h_1 = h_2$ dobivamo **isto** kao i kod **Besselove** aproksimacije.
Inače — **ne!**

Slično dobivamo i relaciju za s_n na desnom rubu

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

Akimina aproksimacija derivacija — greška

Akimin algoritam (CACM ili TOMS Algorithm 433)

- je vrlo 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 izgladivanja podataka je klasični problem numeričke analize.
- Najjednostavniji pristup je zamjena podatka srednjom vrijednošću podataka preko nekoliko susjednih točaka.

Druge aproksimacije derivacija

Aproksimacija derivacije može se napraviti još i **bolje**, tako da

- povučemo interpolacijski polinom **stupnja 3**, s čvorovima x_k, x_{k-1}, x_{k+1} i **jednim** od čvorova x_{k-2} ili x_{k+2} (**nesimetričnost**, odnosno, dvije varijante algoritma!)
- i njega **deriviramo** u x_k .

Na **rubovima** postupamo kao kod **Besselove** aproksimacije.

Takvim postupkom možemo dobiti **grešku**

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

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

Zaključak

Kvazihermiteova po dijelovima kubična interpolacija je, također, **lokalna** — slično kao i **Hermiteova**,

- tj. promjenom **jedne** točke (x_k, f_k) ili podatka f_k ,
- 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, \dots, s_n možemo odrediti i iz zahtjeva da funkcija φ

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

Takva se interpolacija zove kubična splajn interpolacija.

Iz tih uvjeta ne možemo jednoznačno izračunati splajn φ , jer

- treba odrediti $4n$ koeficijenata kubičnih polinoma,
- a imamo $2n$ uvjeta interpolacije (svaki polinom mora interpolirati funkciju u rubnim točkama svog intervala),
- uvjeta ljepljenja prve derivacije u unutarnjim čvorovima ima $n - 1$ (toliko je unutarnjih čvorova),
- i još imamo $n - 1$ uvjeta ljepljenja druge derivacije.

Broj nepoznatih parametara i broj uvjeta

Zaključak. Ukupno imamo

- $4n - 2$ uvjeta interpolacije i neprekidnosti derivacija,
- a moramo odrediti $4n$ koeficijenata kubnih polinoma,
- pa vidimo da **nedostaju 2 uvjeta** da bismo te koeficijente mogli **jednoznačno** odrediti.

Nastavak. Pogledajmo što možemo izvesti **bez** ta **2** uvjeta, a onda ćemo diskutirati kako **njih** možemo zadati.

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

$$\varphi'(x_k) = s_k, \quad k = 1, \dots, n - 1,$$

bez obzira na to što su brojevi s_k .

Ljepljenje druge derivacije

Ostaje još postaviti uvjete ljepljenja druge derivacije od φ u unutarnjim čvorovima. Zahtjev na pripadne polinome p_k je

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

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

$$p_k(x) = c_{0,k} + c_{1,k}(x - x_{k-1}) + c_{2,k}(x - x_{k-1})^2 + c_{3,k}(x - x_{k-1})^3,$$

onda je

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

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 napisati koeficijente $c_{i,k}$ u terminima f_k i s_k .

Ponovimo, za kubični polinom s 2 dvostruka čvora, imali smo

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

Ove dvije relacije uvrstimo u uvjet ljepljenja druge derivacije.

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 $k = 1, \dots, n - 1$, 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 jednažbom.

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** za “nagibe” s_1, \dots, s_{n-1} .

Za rješavanje sustava možemo koristiti Gaussove eliminacije ili LR faktorizaciju **bez** pivotiranja — **stabilno** i vrlo **brzo**.

Algoritam. Za “opću” trodijagonalnu matricu A , reda n ,

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

pretpostavimo da **postoji LR faktorizacija** bez pivotiranja.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Tada nije teško pokazati da su matrice L i R oblika

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ l_2 & 1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & l_{n-1} & 1 & & \\ & & & l_n & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix},$$
$$R = \begin{bmatrix} r_1 & e_1 & & & & \\ & r_2 & e_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & r_{n-1} & e_{n-1} & \\ & & & & r_n & \end{bmatrix}.$$

Matrice A i R imaju **jednake** dijagonale **iznad** glavne.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Ostale elemente matrica L i R računamo sljedećim algoritmom

$$r_1 = d_1,$$

za $i = 2, \dots, n$:

$$l_i = c_i / r_{i-1},$$

$$r_i = d_i - l_i e_{i-1}.$$

Složenost LR faktorizacije je **samo** $O(n)$. Isto vrijedi i za supstitucije unaprijed i unatrag kod rješavanja sustava $Ax = b$.

Primijetite, sada s_k

- **nisu nezavisni**, nego ovisе 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, najčešće, 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, jednačbi koje nedostaju.

Potpuni (kompletni) splajn

(a) Potpuni (kompletni) splajn

Poznato:

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

Zadaje se:

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

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

- rubni uvjeti su egzaktni — iz funkcije f , pa nemaju nikakvu grešku,
- a greška dolazi samo od po dijelovima kubične interpolacije.

Zadana druga derivacija u rubovima

(b) Zadana druga derivacija u rubovima

Poznato:

• druga derivacija funkcije f u rubovima.

Zadaje se:

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

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 jednađbu dodajemo kao **zadnju** u linearni sustav.

Dobiveni linearni sustav

- ima $(n + 1)$ -u jednađbu i **isto** toliko nepoznanica,
- a 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 jednađbe: kao u (b), samo se stavi $f''(x_0) = f''(x_n) = 0$, pa dobijemo

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

Greška aproksimacije:

- ⦿ Ako f **nema** druge derivacije na rubu jednake 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, \dots, x_3 , odnosno, x_{n-3}, \dots, x_n .

Greška za bilo koju od ovih varijanti 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

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

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

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

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,

$$c_{2,1} + 3c_{3,1}h_1 = c_{2,2},$$

dobivamo ...

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

... prvu jednadžbu

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

Sređivanjem, izlazi

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

Not-a-knot (nije čvor) splajn — kraj

Na sličan način dobivamo i **zadnju** jednačbu

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

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

Porijeklo naziva “not-a-knot”:

- kubični splajn uobičajeno ima neprekidne **druge** derivacije u unutarnjim čvorovima x_1, \dots, 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 linearnog sustava za nepoznate parametre s_k .

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

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

što vodi na jednadžbe

$$p'_1(x_0) = p'_n(x_n), \quad p''_1(x_0) = p''_n(x_n).$$

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

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

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

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

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

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

Greška kubičnog splajna i rubni uvjeti

Ove ocjene greške, naravno, vrijede **samo** uz pretpostavku

- da su i **rubni uvjeti** dovoljno **točni**,
- tj. i oni **zadovoljavaju** odgovarajuću **ocjenu** greške.

U protivnom, **gubimo točnost** pri **rubovima**.

Napomena.

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

Demo — Not-a-knot kubična splajn interp.

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

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

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

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

Primjer — prirodni splajn

Primjer. Neka je

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

Nađite prirodni splajn koji aproksimira funkciju f na $[0, 1]$ s čvorovima interpolacije $x_k = 0.2 \cdot k$, za $k = 0, \dots, 5$.

Izračunajte vrijednost tog splajna u točki 0.55.

Čvorovi su ekvidistantni s razmakom $h = 0.2$, pa “srednje” jednadžbe linearnog sustava za splajn glase

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

za $k = 1, \dots, 4$.

Za račun “na ruke” možemo skratiti h . Međutim, u programu koji računa rješenje ostaju polazne jednadžbe. Zato ne kratim.

Primjer — prirodni splajn

Dodatne jednadžbe (**prva** i **zadnja**) za **prirodni** splajn su

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

Za desnu stranu sustava trebamo **prve** podijeljene razlike

x_k	$f[x_k]$	$f[x_k, x_{k+1}]$
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 za “nagibe” s_k

$$\begin{bmatrix} 2.0 & 1.0 & & & & \\ 0.2 & 0.8 & 0.2 & & & \\ & 0.2 & 0.8 & 0.2 & & \\ & & 0.2 & 0.8 & 0.2 & \\ & & & 0.2 & 0.8 & 0.2 \\ & & & & 1.0 & 2.0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ s_4 \\ s_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.8167787844 \\ 2.8531695489 \\ 1.0898137920 \\ -1.0898137920 \\ -2.8531695489 \\ -8.8167787844 \end{bmatrix}$$

Rješenje tog linearnog sustava (GE bez pivotiranja) je

$$s_0 = -s_5 = 3.1387417029,$$

$$s_1 = -s_4 = 2.5392953786,$$

$$s_2 = -s_3 = 0.9699245271.$$

Primjer — prirodni splajn

Zadana točka $x = 0.55$ nalazi se u intervalu $[x_2, x_3] = [0.4, 0.6]$.
Restrikcija splajna φ na taj interval je kubični polinom p_3 ,
kojeg nalazimo iz tablice podijeljenih razlika

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$	$f[t_k, \dots, t_{k+3}]$
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			

Oдавде odmah slijedi da je p_3 , zapravo, kvadratni polinom

$$p_3(x) = 0.9510565163 + 0.9699245271(x - 0.4) - 4.8496226357(x - 0.4)^2.$$

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 u 0 i 1.

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

Po dijelovima parabolička interpolacija

Po dijelovima parabolička interpolacija

Ako stavimo $m = 2$, tj. na svakom podintervalu postavimo kvadratni polinom,

- moramo naći $3n$ koeficijenata,
- a imamo $2n$ uvjeta interpolacije za funkcijske vrijednosti.

Zahtijevamo da aproksimacijska funkcija φ u unutarnjim čvorovima interpolacije x_1, \dots, x_{n-1} ima

- neprekidnu prvu derivaciju, pa smo dodali još $n - 1$ uvjet.
- dakle, treba nam još jedan uvjet!

Taj uvjet ne može se postaviti simetrično, ali se aproksimacija može naći.

Ovaj pristup se uobičajeno ne koristi, jer kontrolu derivacije možemo napraviti samo na jednom rubu.

Parabolički splajn — natuknice

Simetričnost, nalik na kubični splajn, dobivamo tako da

- čvorovi interpolacije x_k nisu rubne točke podintervala za parabolički splajn, tj. imamo dvije mreže i razlikujemo
- čvorove splajna (t_k) od čvorova interpolacije (x_k).

Čvorove za splajn stavljamo između točaka podataka

$$x_0 < t_0 < x_1 < t_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < t_{n-1} < x_n,$$

a na rubovima možemo staviti $t_{-1} \leq x_0$ i $x_n \leq t_n$.

Tako dobivamo $n + 1$ kvadratnih polinoma p_k , na intervalima $[t_{k-1}, t_k]$, za $k = 0, \dots, n$. Uvjeti interpolacije i ljepljenja funkcije i derivacije u unutarnjim čvorovima splajn mreže, ostavljaju točno dva rubna uvjeta u t_{-1} i t_n .

Dodatna literatura o splajnovima

Standardni izbor čvorova za splajn mrežu je u polovištima intervala između podataka,

$$t_k = \frac{x_k + x_{k+1}}{2}, \quad k = 0, \dots, n - 1.$$

Na rubovima se uzima $t_{-1} = x_0$ i $t_n = x_n$, pa se zadaju rubni uvjeti na prvu derivaciju u x_0 i x_n .

Postoji cijela teorija splajn funkcija — ne samo polinomnih.

- Vektorski prostor, “lokalna” baza — B-splajnovi, itd.

Dodatna literatura:

- Carl de Boor,
A Practical Guide to Splines (Revised Edition),
Springer, New York, 2001.

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!

Razlog: podaci naliče na **arctg** = integral **funkcije Runge**.

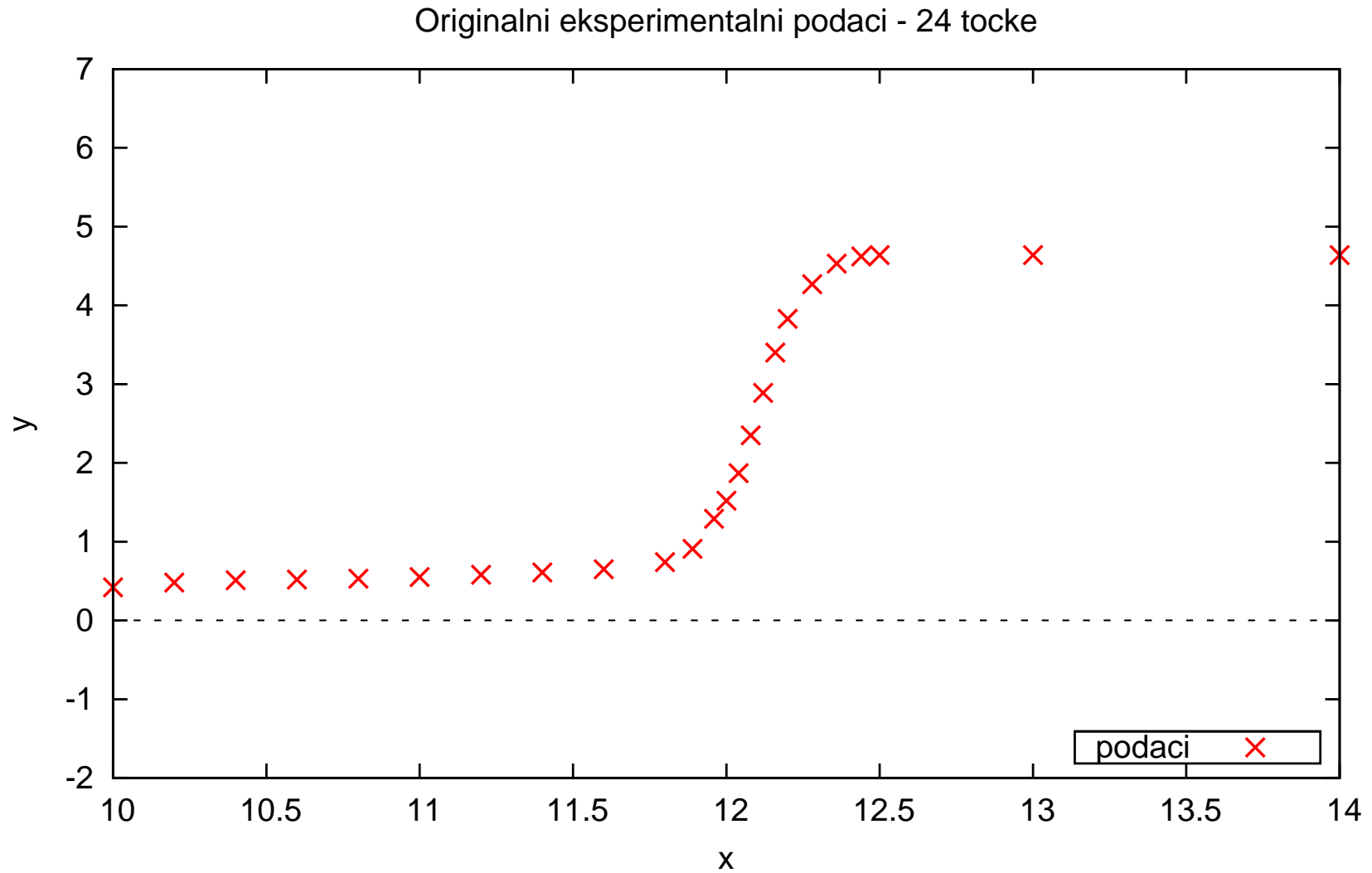
- `Num_Pas\Interp\C_Akim_1\GnuPlot\C_Akim_1.plt`

Eksperimentalno izmjereni podaci — tablica

Originalni eksperimentalno izmjereni podaci su 24 točke:

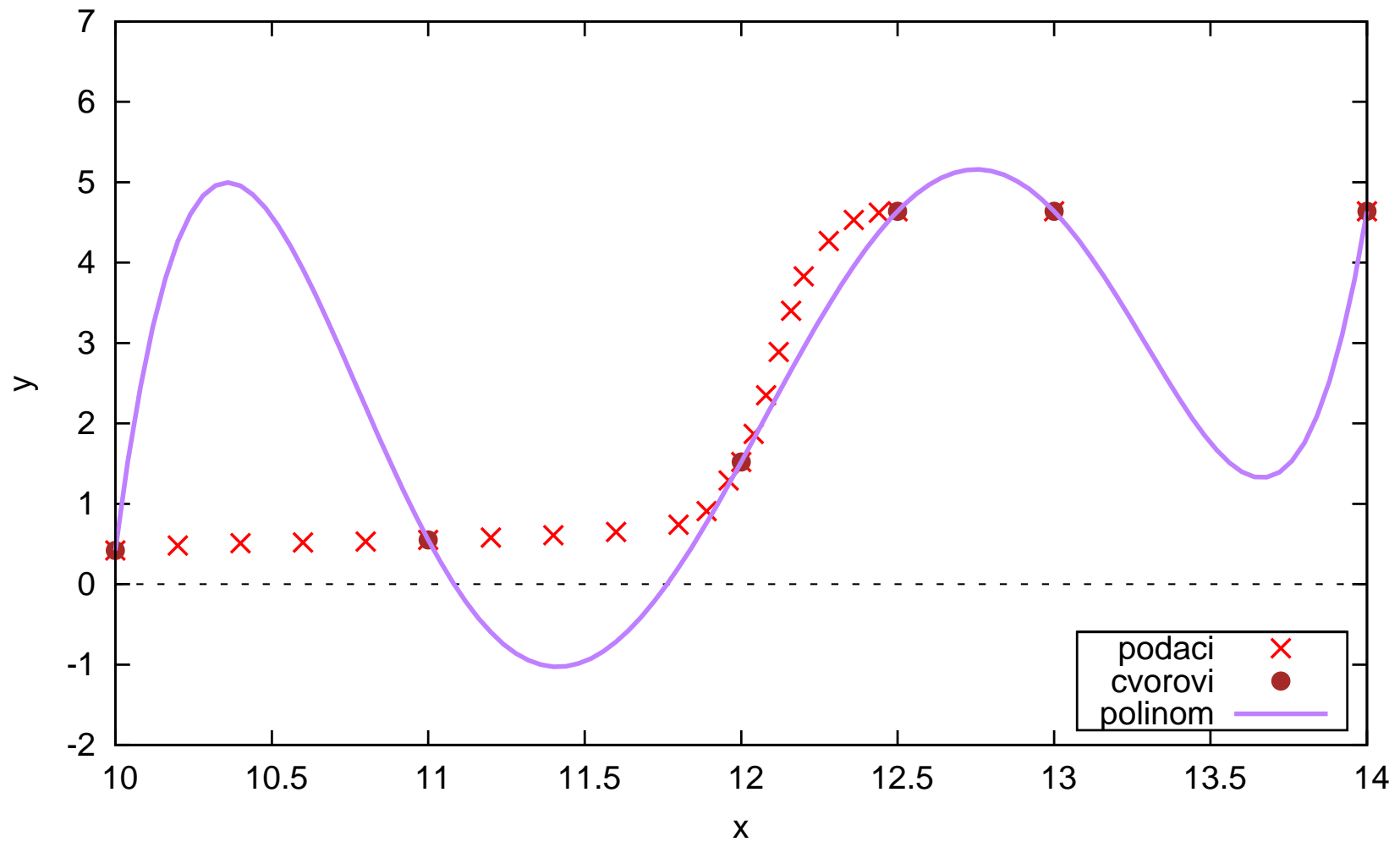
k	x_k	y_k	k	x_k	y_k	k	x_k	y_k
1	10.00	0.42	9	11.60	0.65	17	12.16	3.40
2	10.20	0.48	10	11.80	0.74	18	12.20	3.83
3	10.40	0.51	11	11.89	0.91	19	12.28	4.27
4	10.60	0.52	12	11.96	1.29	20	12.36	4.53
5	10.80	0.53	13	12.00	1.52	21	12.44	4.62
6	11.00	0.55	14	12.04	1.87	22	12.50	4.64
7	11.20	0.58	15	12.08	2.35	23	13.00	4.64
8	11.40	0.61	16	12.12	2.89	24	14.00	4.64

Eksperimentalno izmjereni podaci



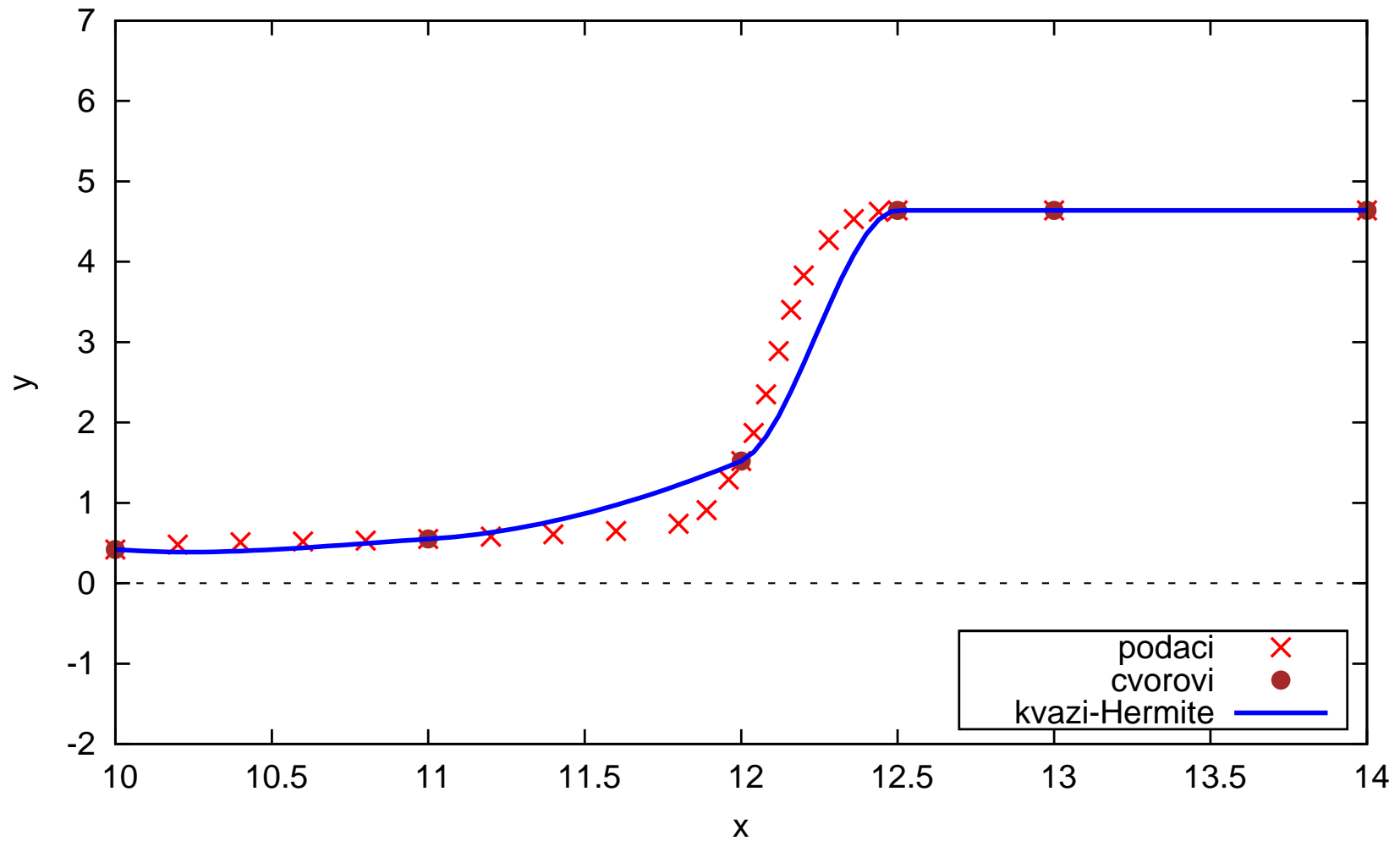
Polinom — 6 čvorova

Interpolacijski polinom kroz 6 tocaka



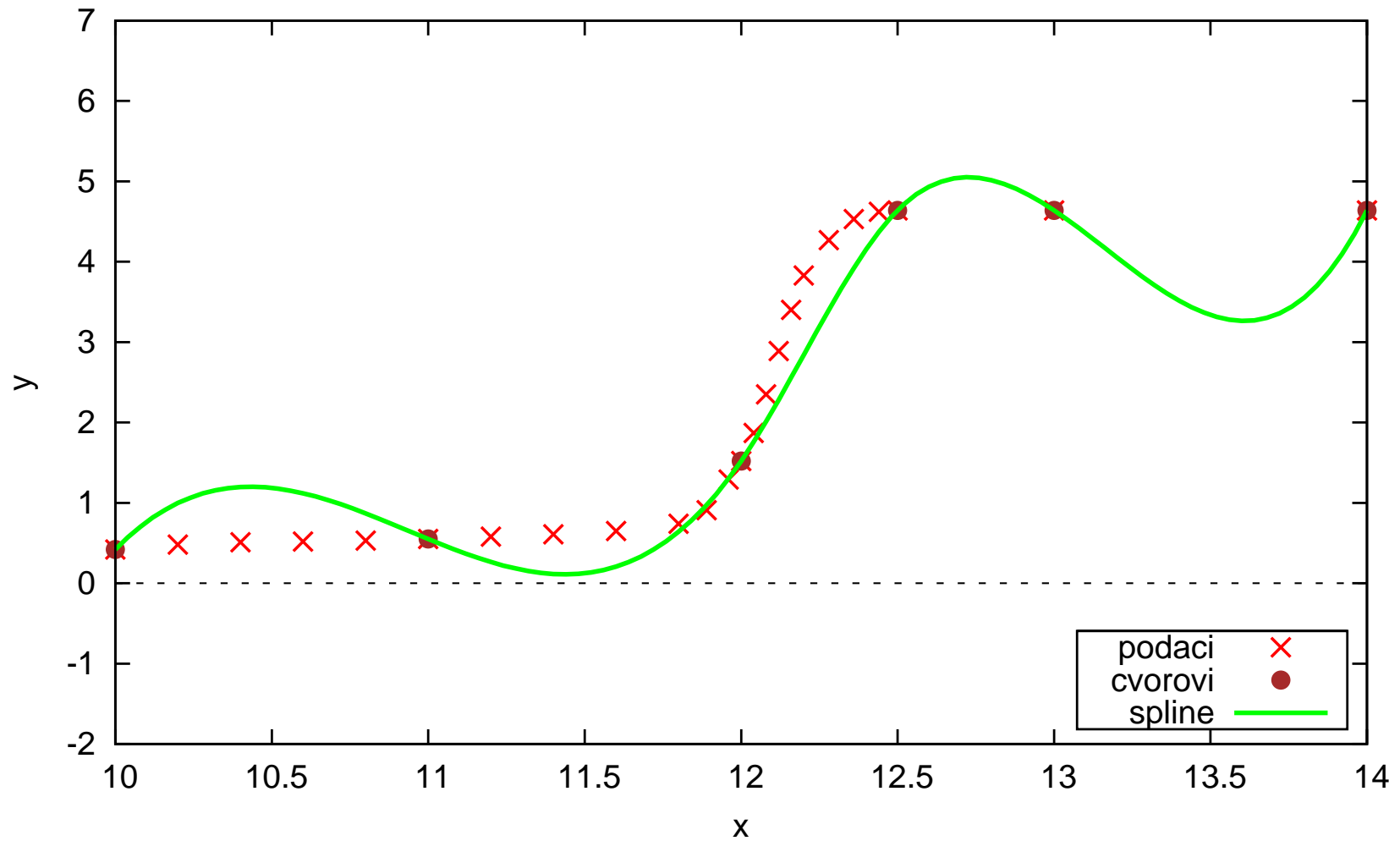
Akima — 6 čvorova

Kvazi-Hermiteova kubicna interpolacija (Akima) kroz 6 tocaka

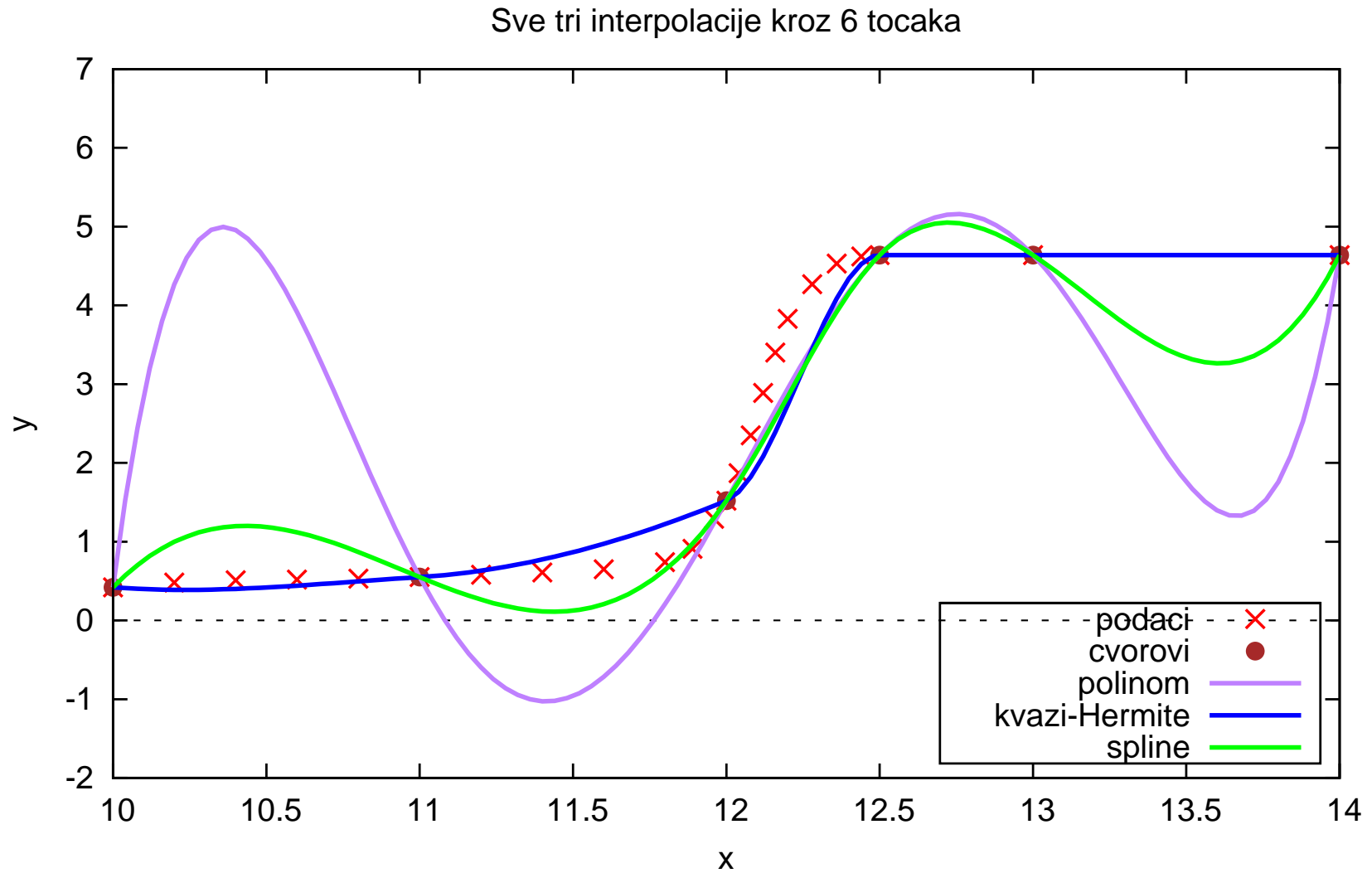


Kubični splajn — 6 čvorova

Kubčna spline interpolacija (Not-a-Knot) kroz 6 tocaka

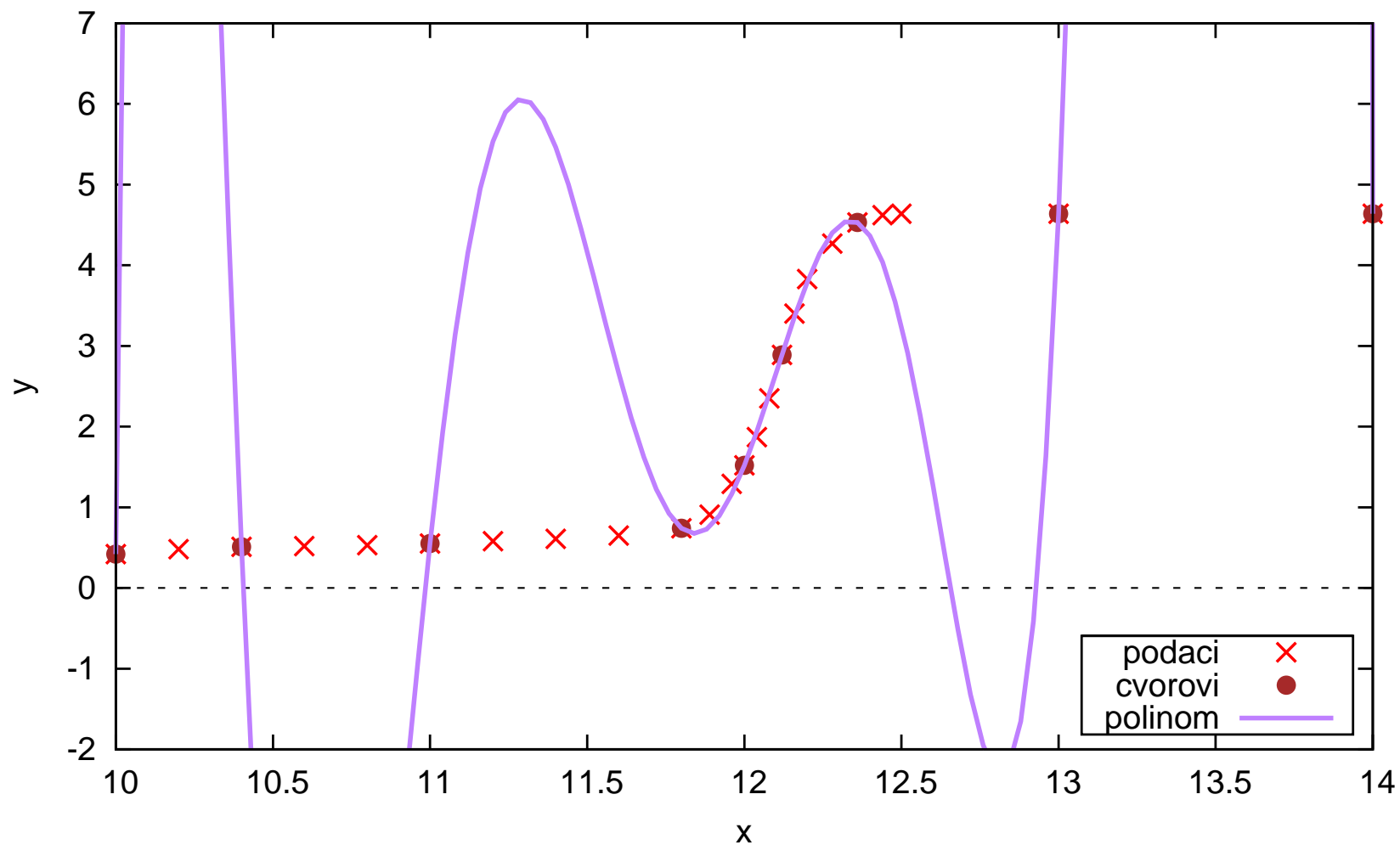


Sve tri interpolacije zajedno — 6 čvorova



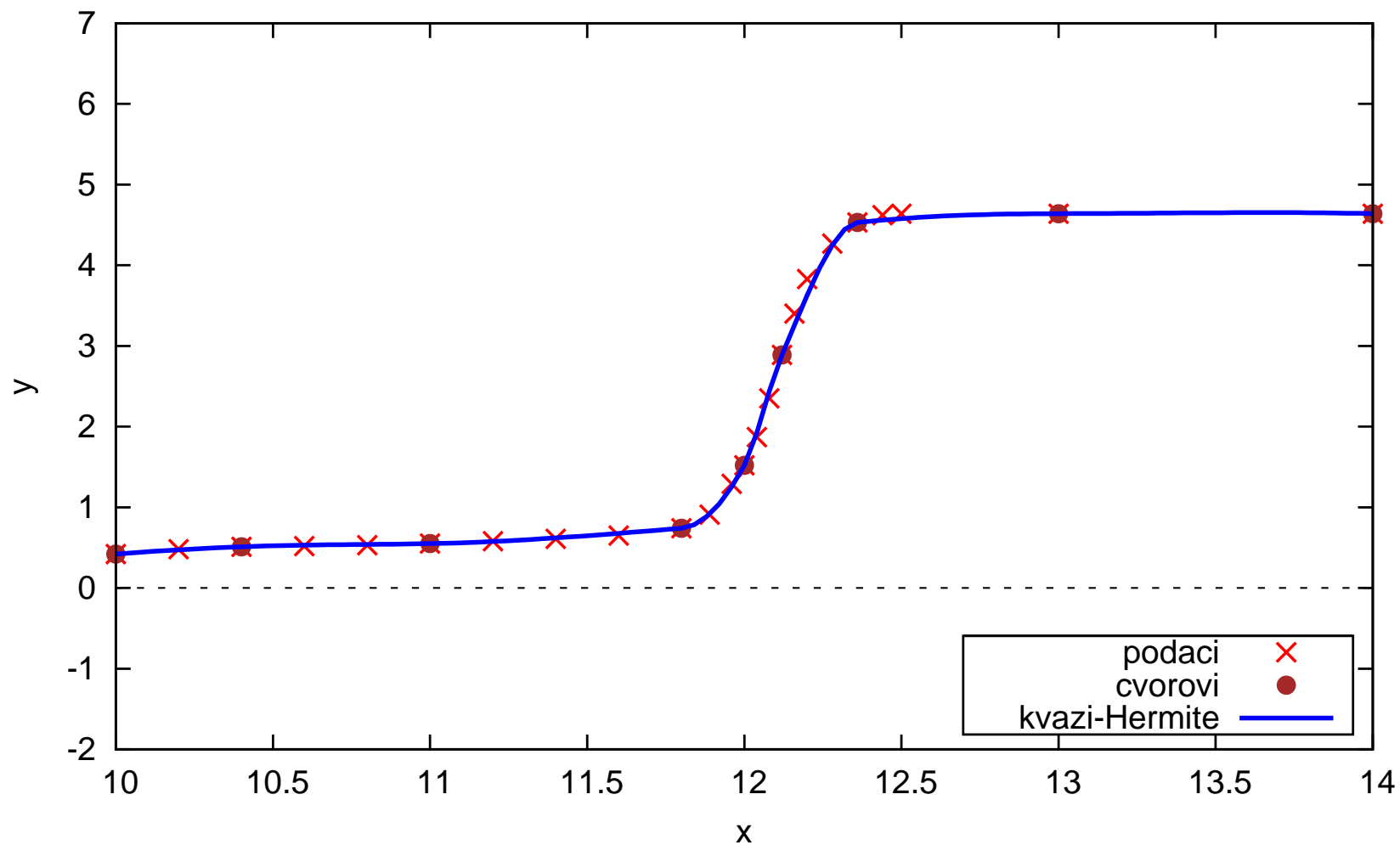
Polinom — 9 čvorova (lošije!)

Interpolacijski polinom kroz 9 tocaka (Max = 257)



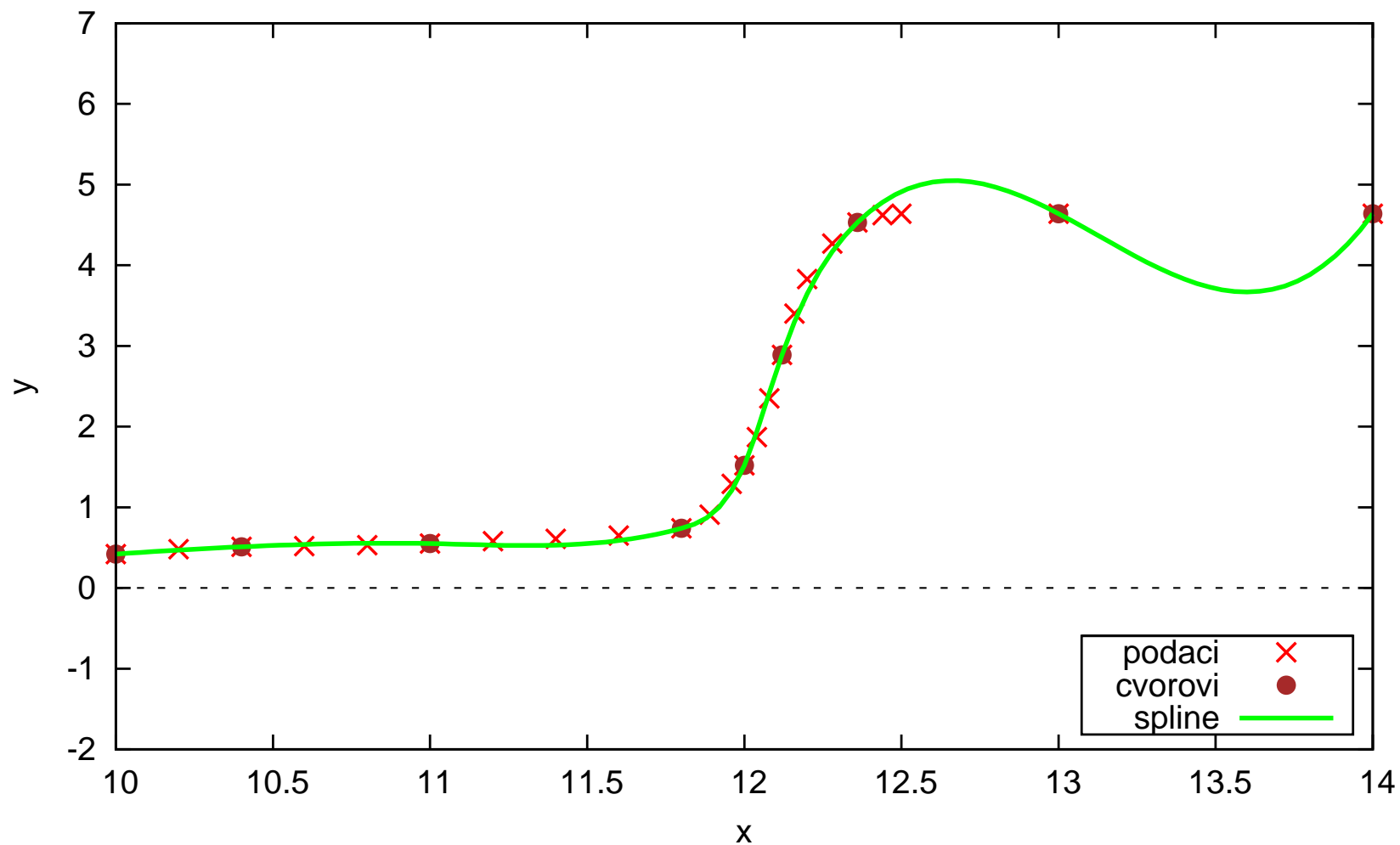
Akima — 9 čvorova

Kvazi-Hermiteova kubicna interpolacija (Akima) kroz 9 tocaka

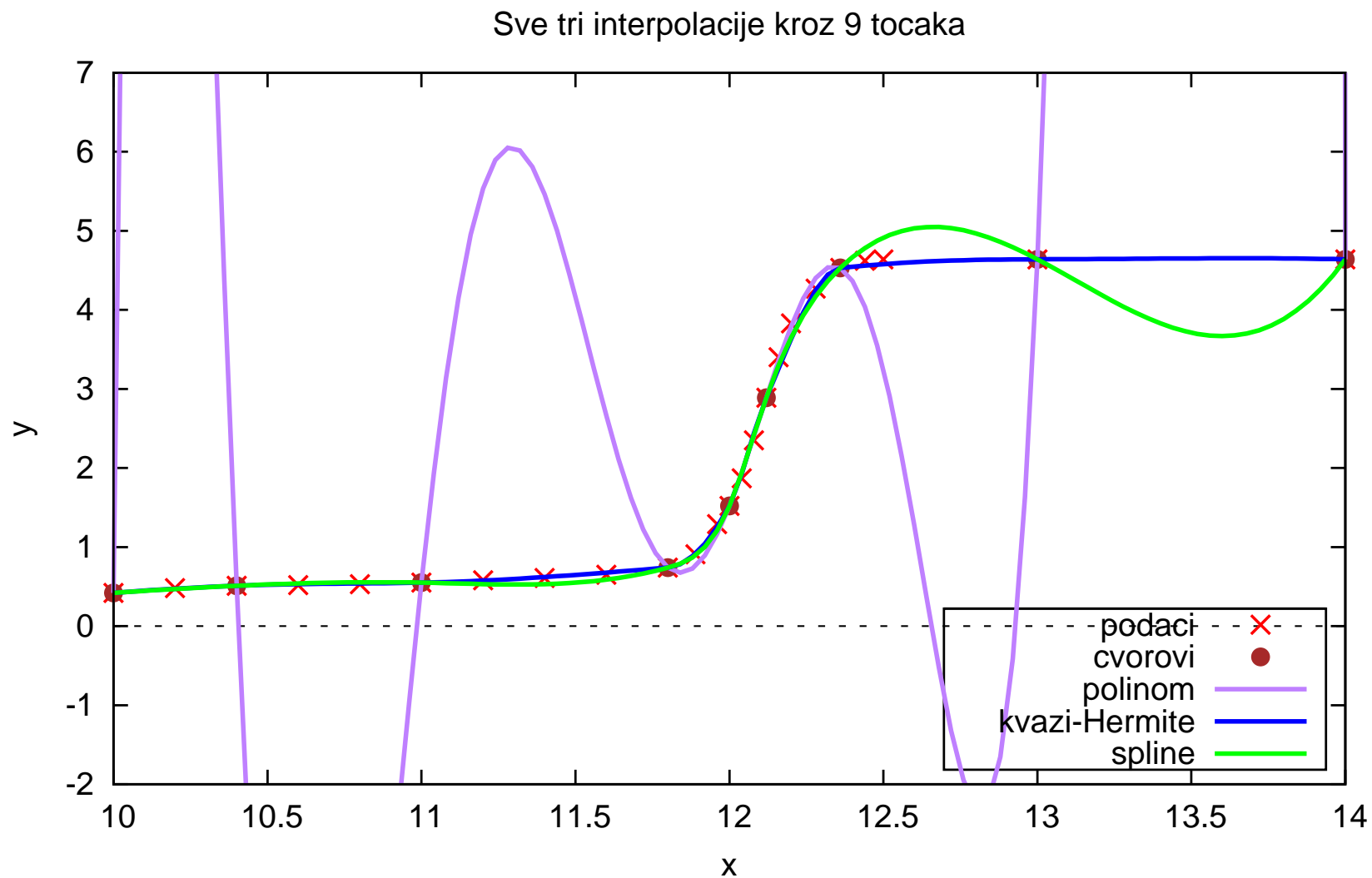


Kubični splajn — 9 čvorova

Kubicna spline interpolacija (Not-a-Knot) kroz 9 tocaka

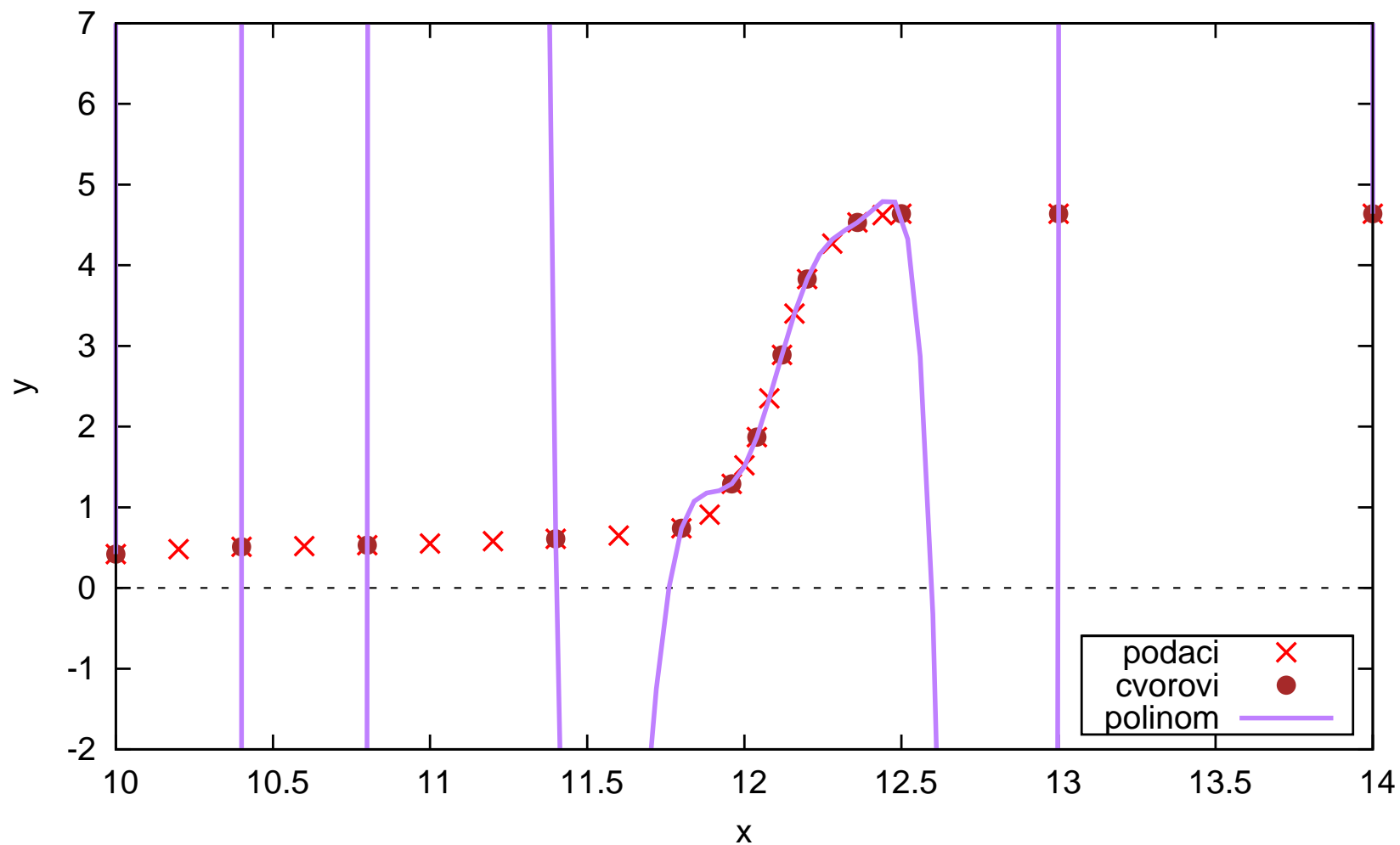


Sve tri interpolacije zajedno — 9 čvorova



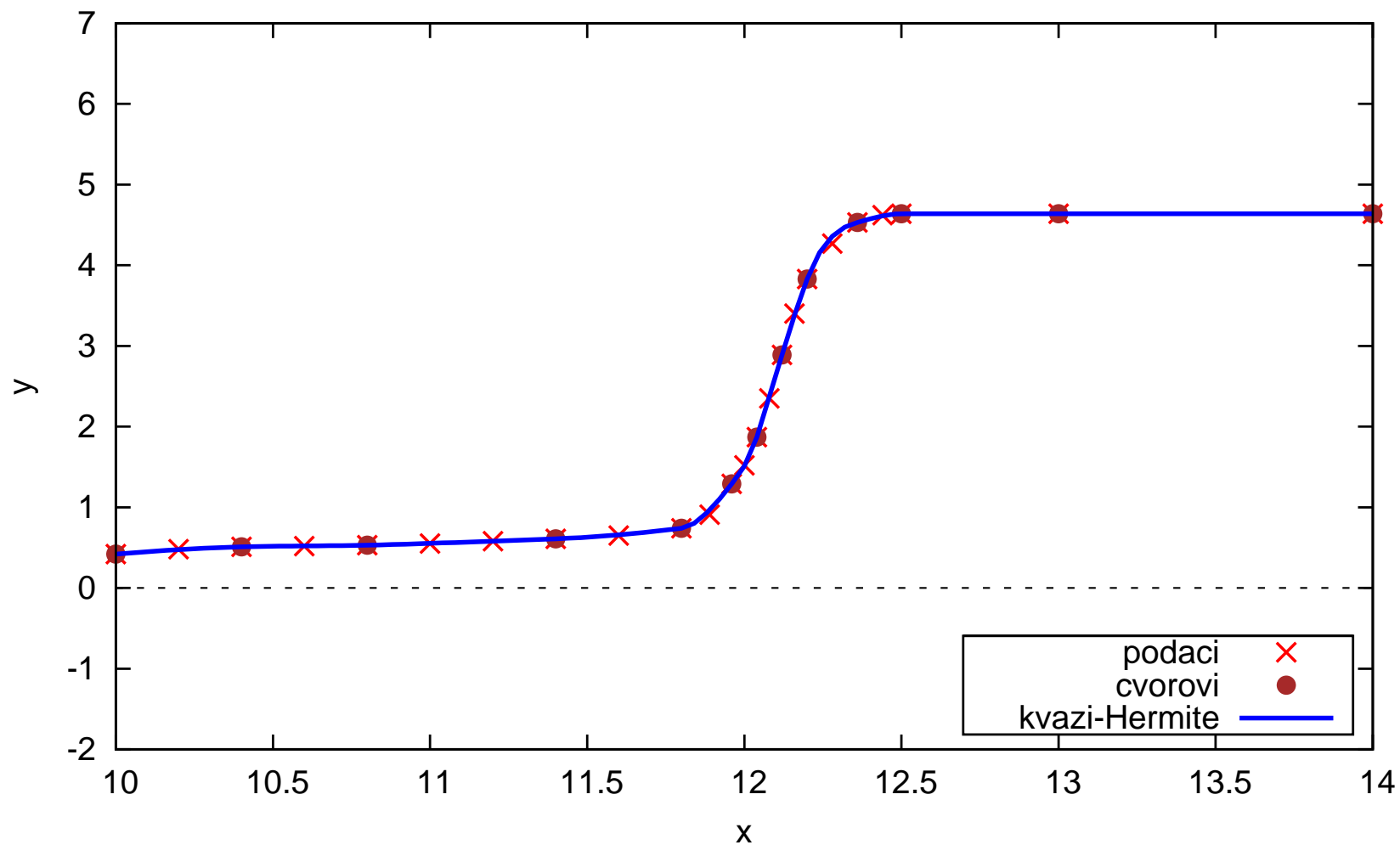
Polinom — 13 čvorova (još lošije!)

Interpolacijski polinom kroz 13 tocaka (Max = 125146)



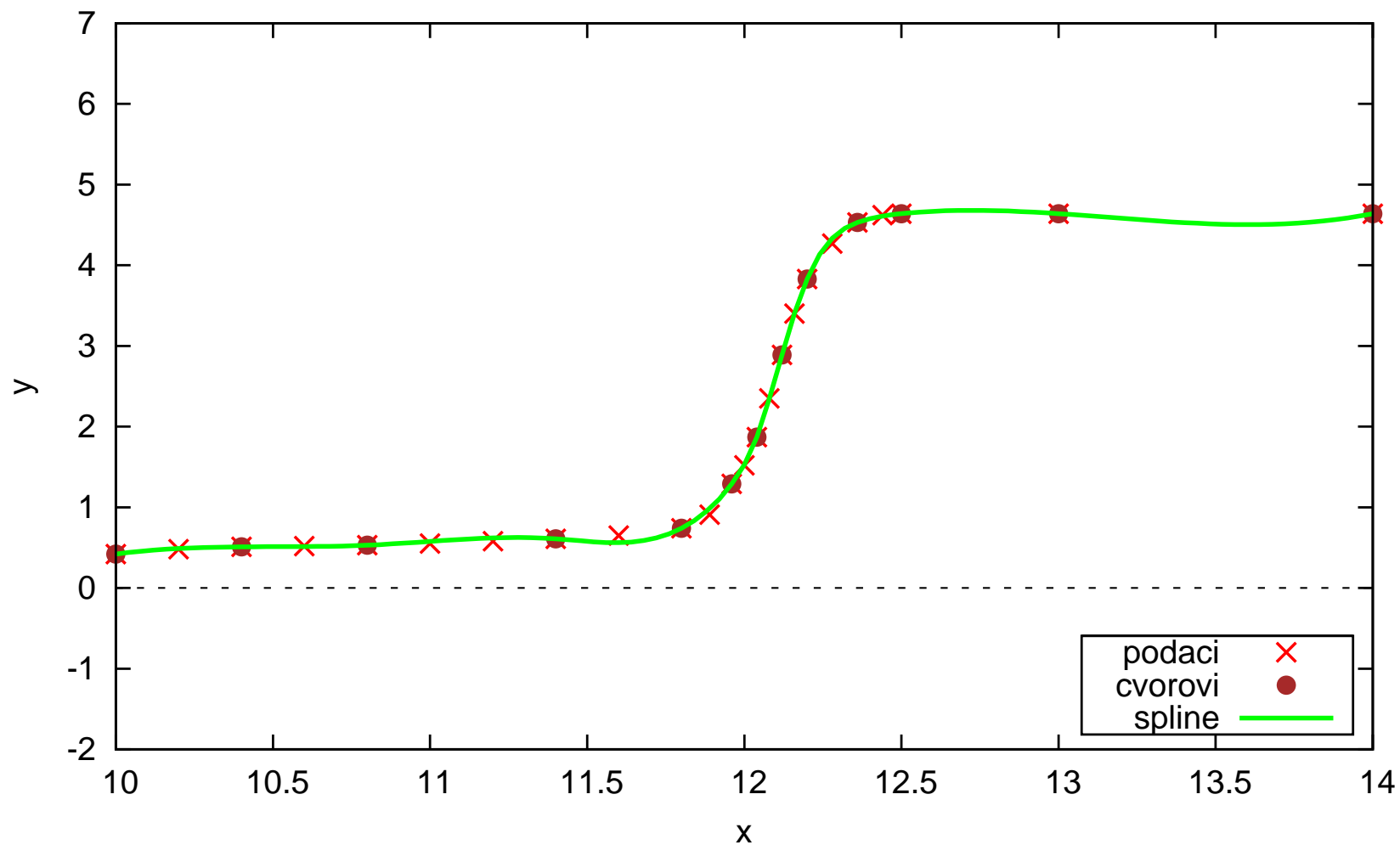
Akima — 13 čvorova

Kvazi-Hermiteova kubicna interpolacija (Akima) kroz 13 tocaka

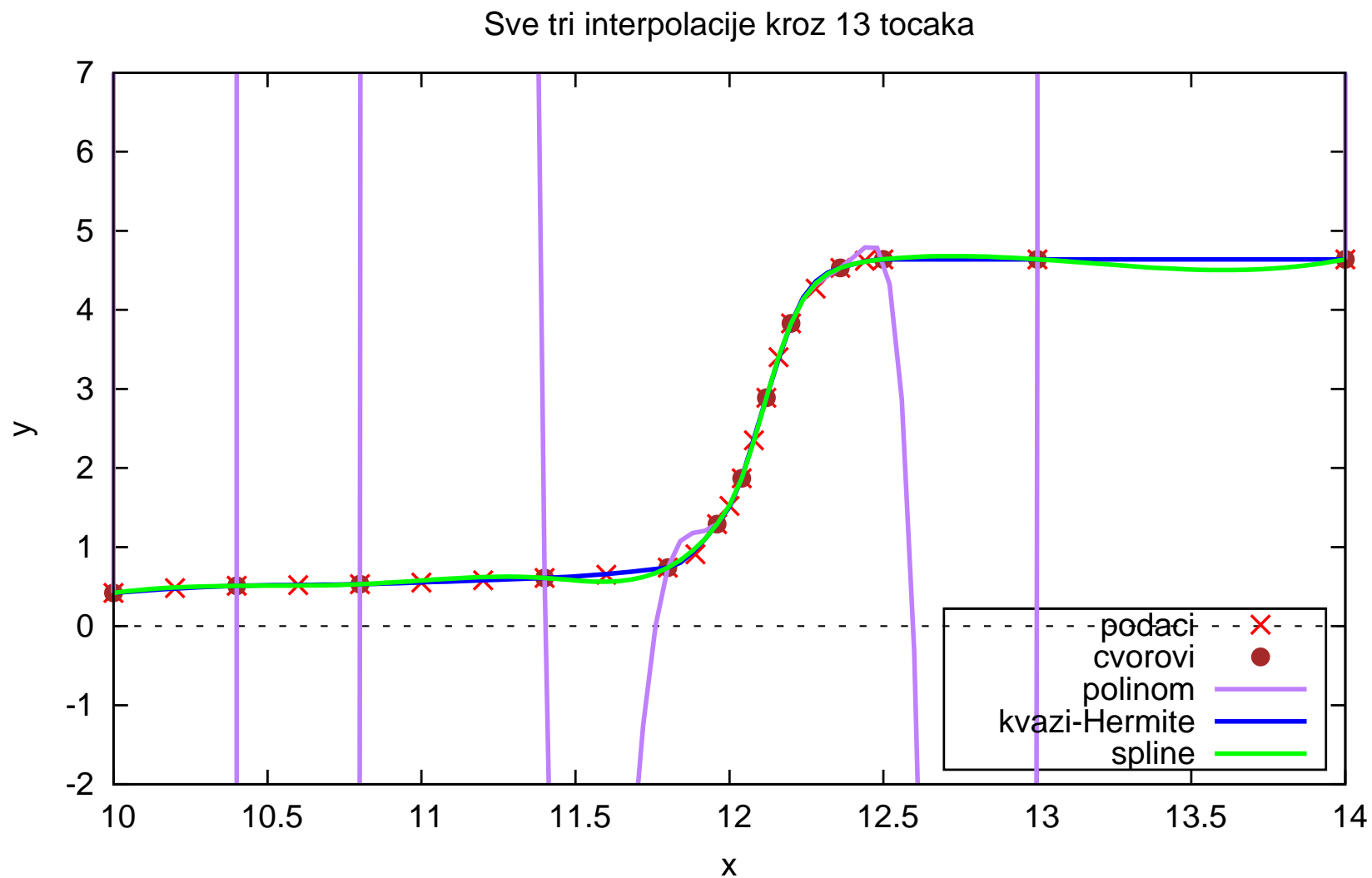


Kubični splajn — 13 čvorova

Kubicna spline interpolacija (Not-a-Knot) kroz 13 tocaka



Sve tri interpolacije zajedno — 13 čvorova



Korekcija — dopuna izmjerenih podataka

Gdje je **problem**?

- Pred **kraj** podataka, na “**ravnom**” dijelu, imamo **premalo** izmjerenih točaka.
- Ponašanje **y**-vrijednosti je toliko **očito**, da se **ne isplati** raditi “gušća” mjerenja!

Međutim, za **dobru** aproksimaciju — tamo ipak **fale** podaci, koje bismo mogli uzeti kao **točke za interpolaciju**.

Kad je već tako “**očito**”, nitko nam **ne brani** da tamo **dodamo** to što fali u originalnim mjerenjima.

- Zato, u okolini **$x = 13$** — između **12.5** i **14**, **dodajemo** još **6** točaka, sve s **istom** vrijednošću **4.64**.

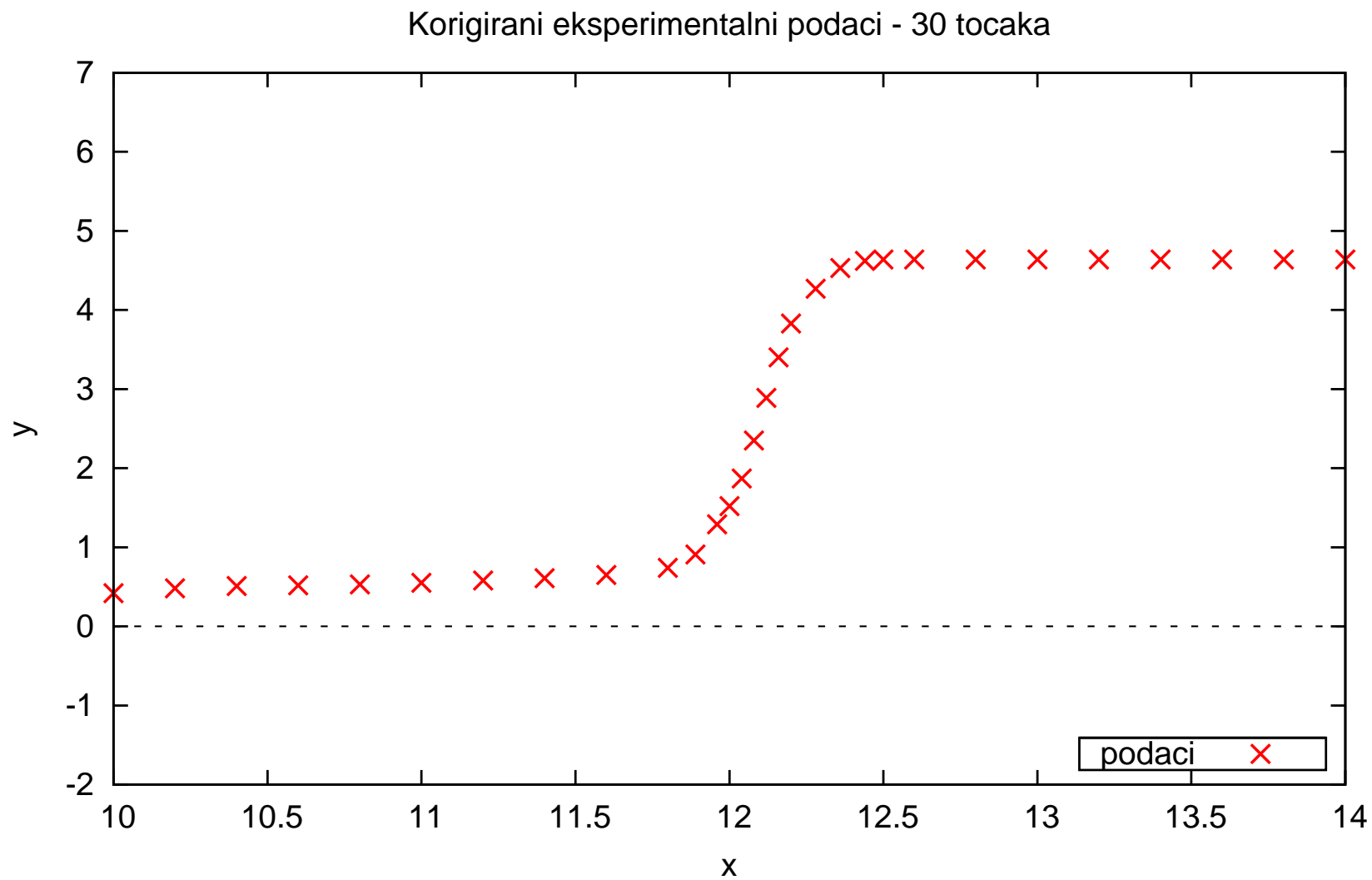
Tako dobivamo puno **veći izbor** čvorova za interpolaciju!

Korigirani izmjereni podaci — tablica

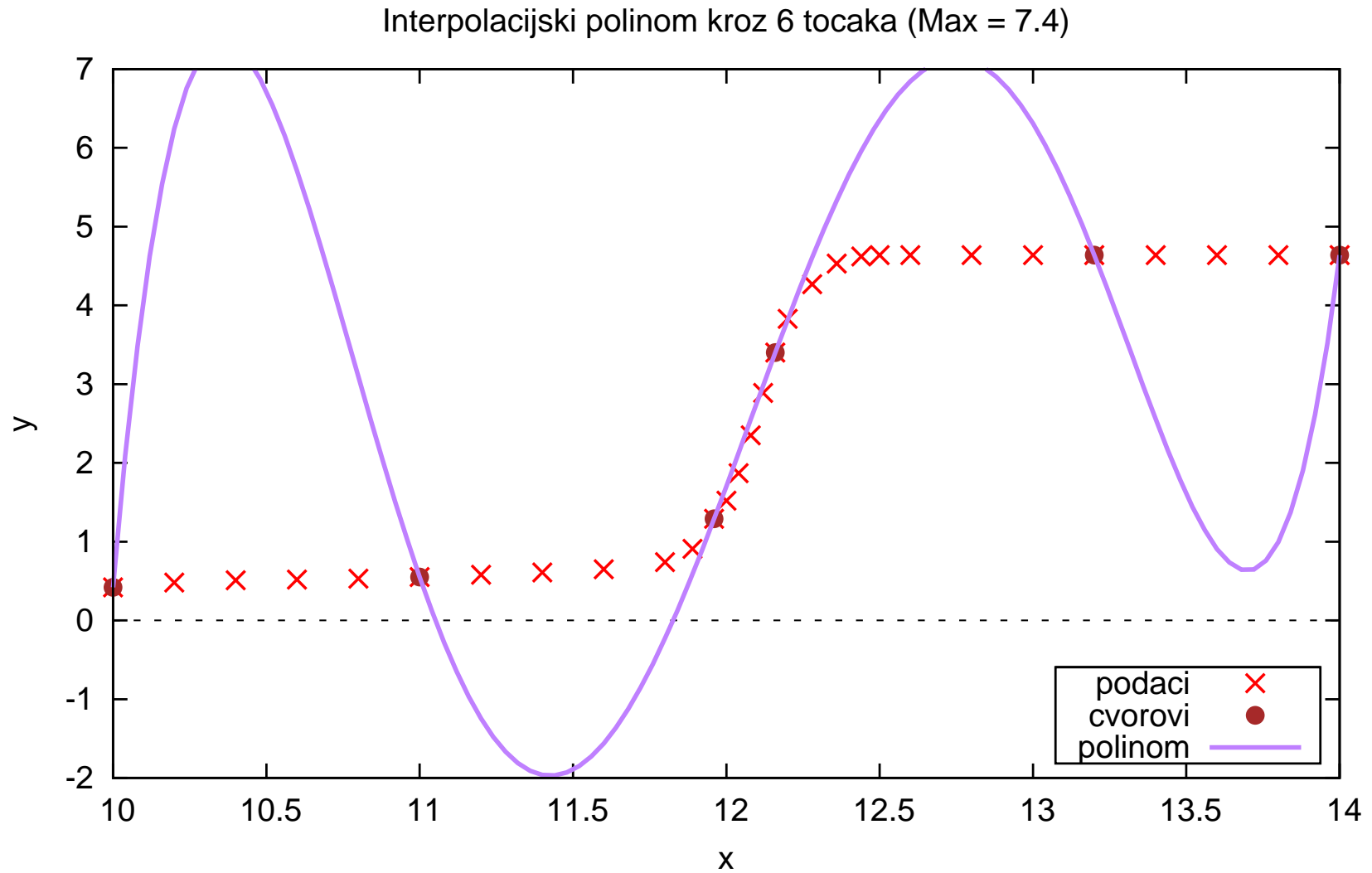
Korigirani eksperimentalno izmjereni podaci imaju 30 točaka:

k	x_k	y_k	k	x_k	y_k	k	x_k	y_k
1	10.00	0.42	11	11.89	0.91	21	12.44	4.62
2	10.20	0.48	12	11.96	1.29	22	12.50	4.64
3	10.40	0.51	13	12.00	1.52	23	12.60	4.64
4	10.60	0.52	14	12.04	1.87	24	12.80	4.64
5	10.80	0.53	15	12.08	2.35	25	13.00	4.64
6	11.00	0.55	16	12.12	2.89	26	13.20	4.64
7	11.20	0.58	17	12.16	3.40	27	13.40	4.64
8	11.40	0.61	18	12.20	3.83	28	13.60	4.64
9	11.60	0.65	19	12.28	4.27	29	13.80	4.64
10	11.80	0.74	20	12.36	4.53	30	14.00	4.64

Korigirani (dopunjeni) izmjereni podaci

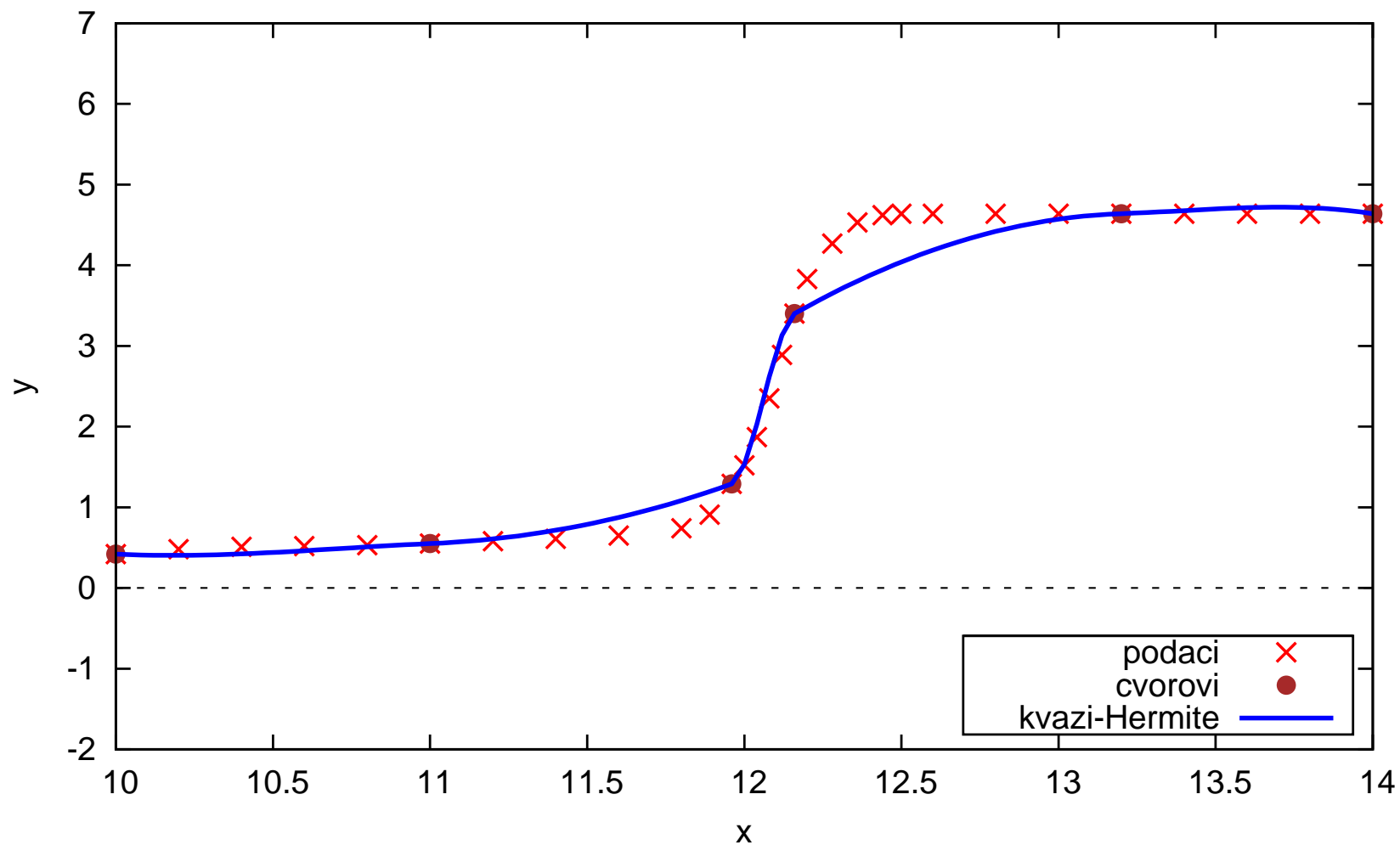


Polinom — 6 čvorova



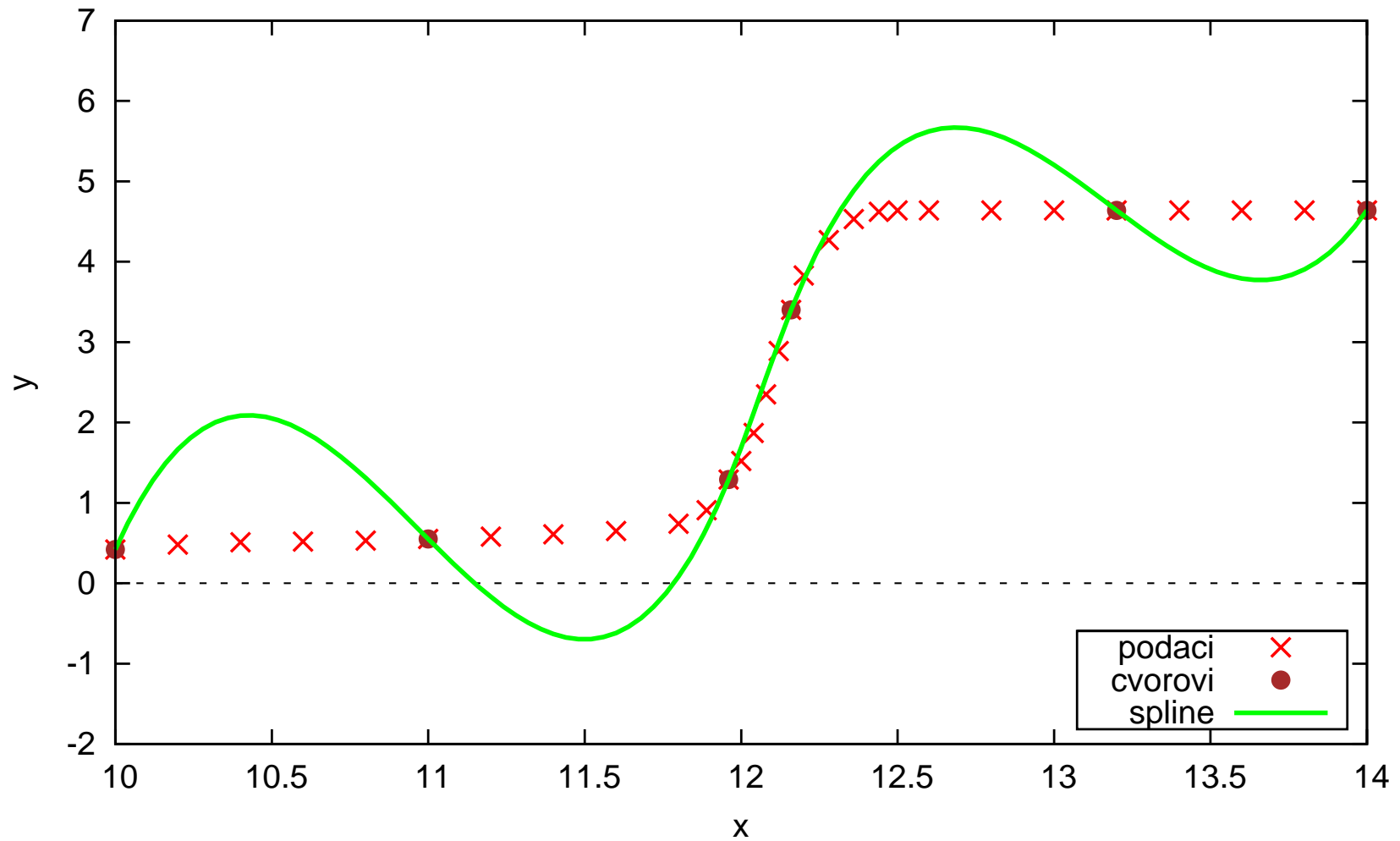
Akima — 6 čvorova

Kvazi-Hermiteova kubicna interpolacija (Akima) kroz 6 tocaka

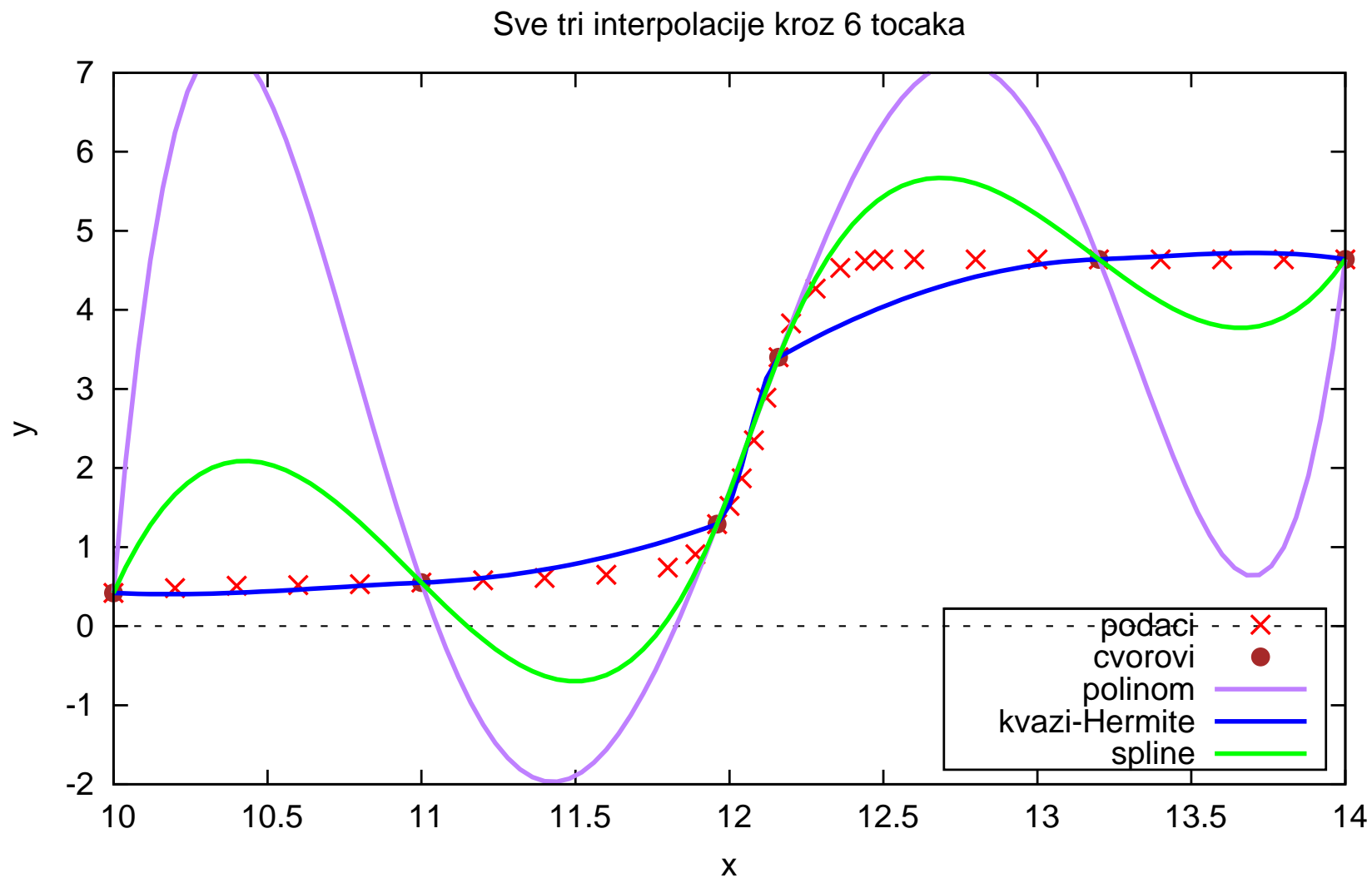


Kubični splajn — 6 čvorova

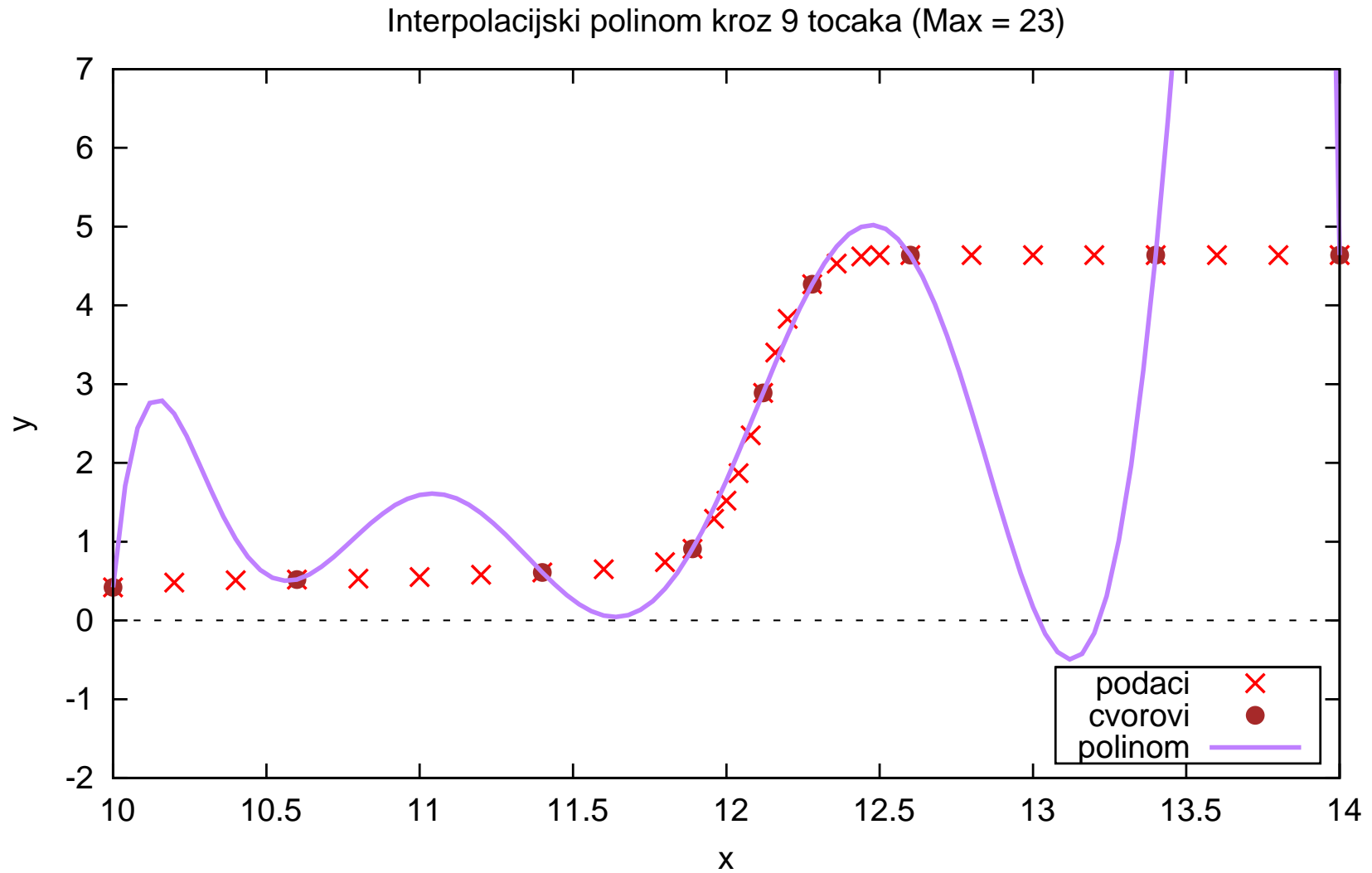
Kubicna spline interpolacija (Not-a-Knot) kroz 6 tocaka



Sve tri interpolacije zajedno — 6 čvorova

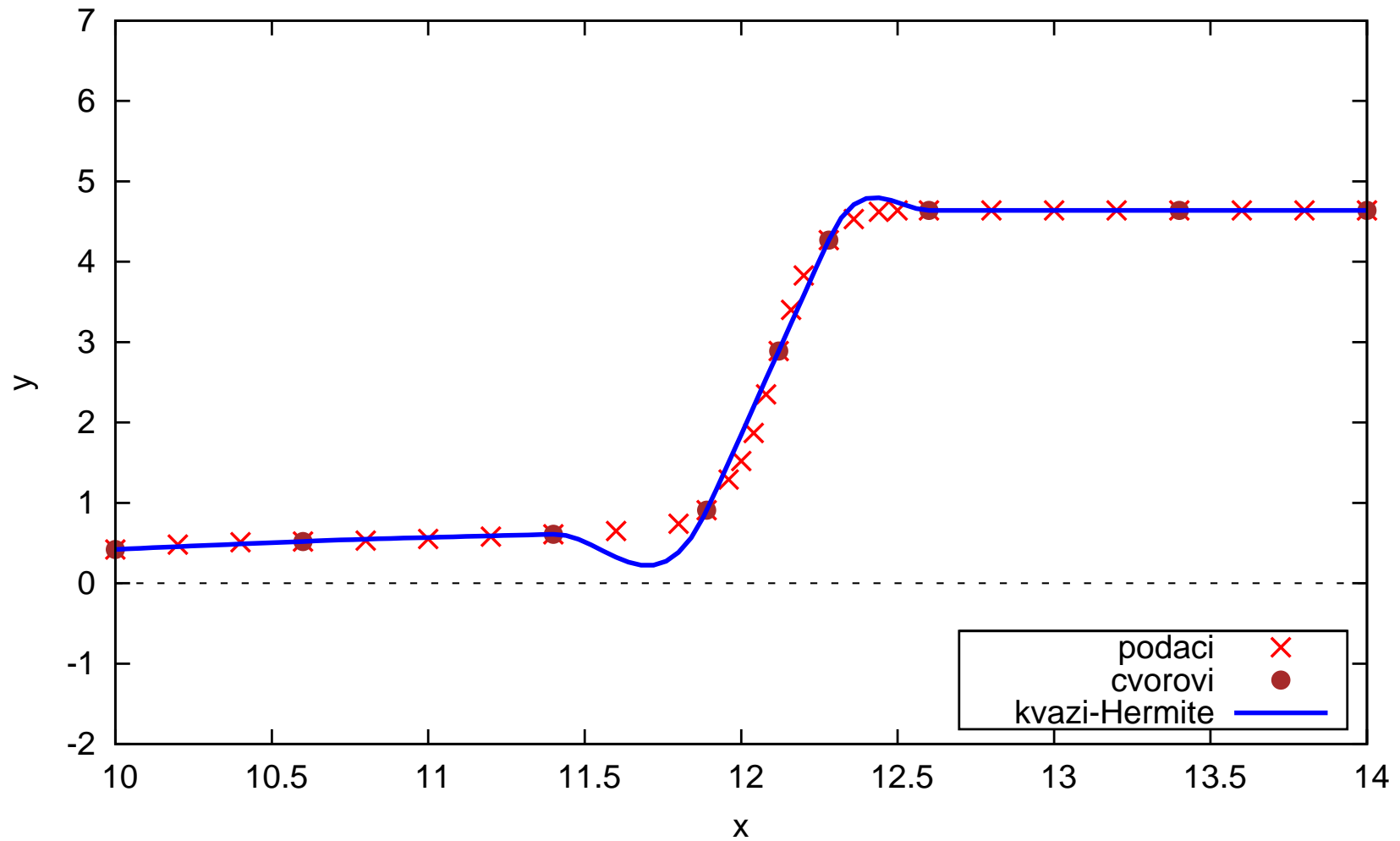


Polinom — 9 čvorova (lošije!)



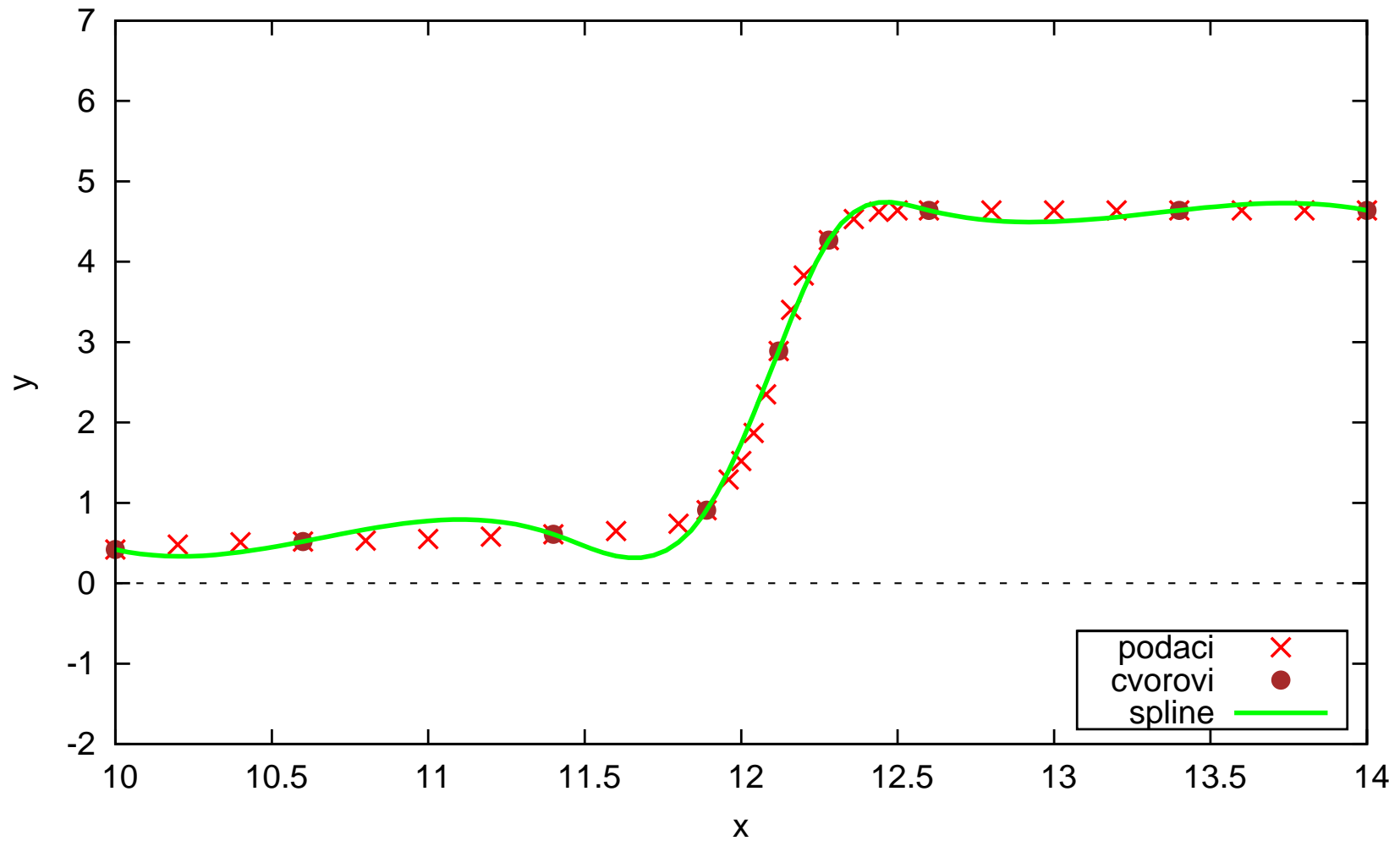
Akima — 9 čvorova

Kvazi-Hermiteova kubicna interpolacija (Akima) kroz 9 tocaka

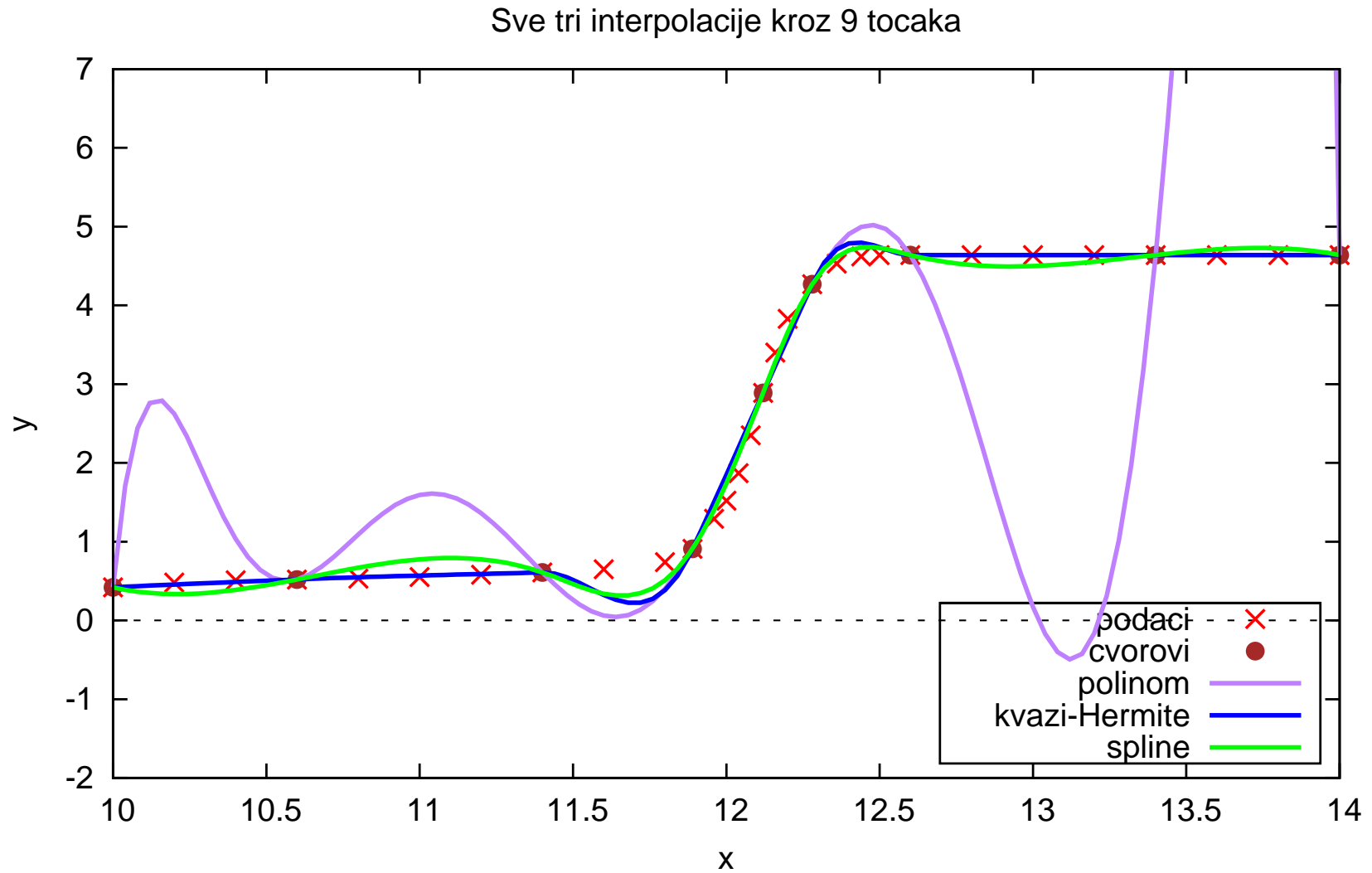


Kubični splajn — 9 čvorova

Kubicna spline interpolacija (Not-a-Knot) kroz 9 tocaka

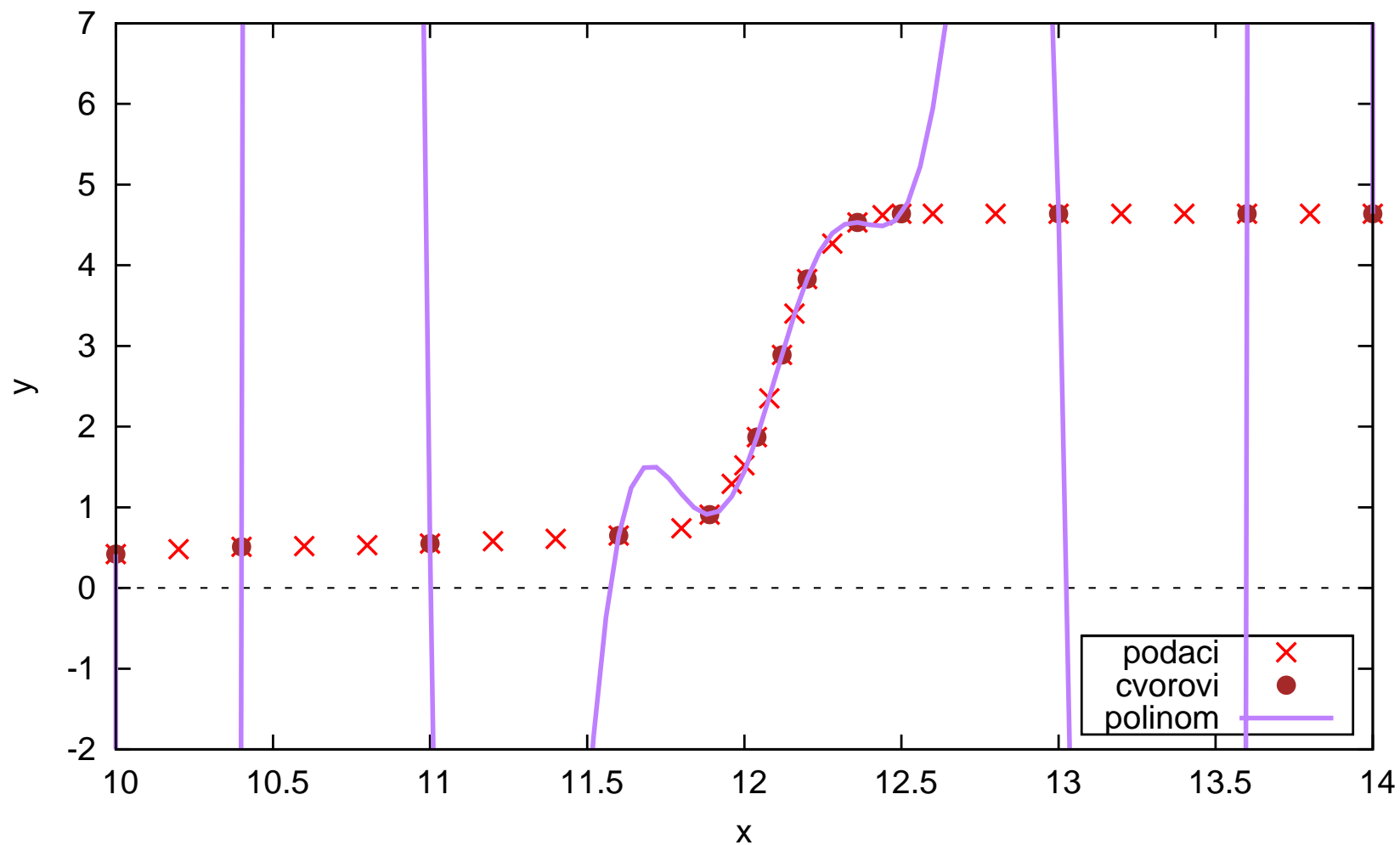


Sve tri interpolacije zajedno — 9 čvorova



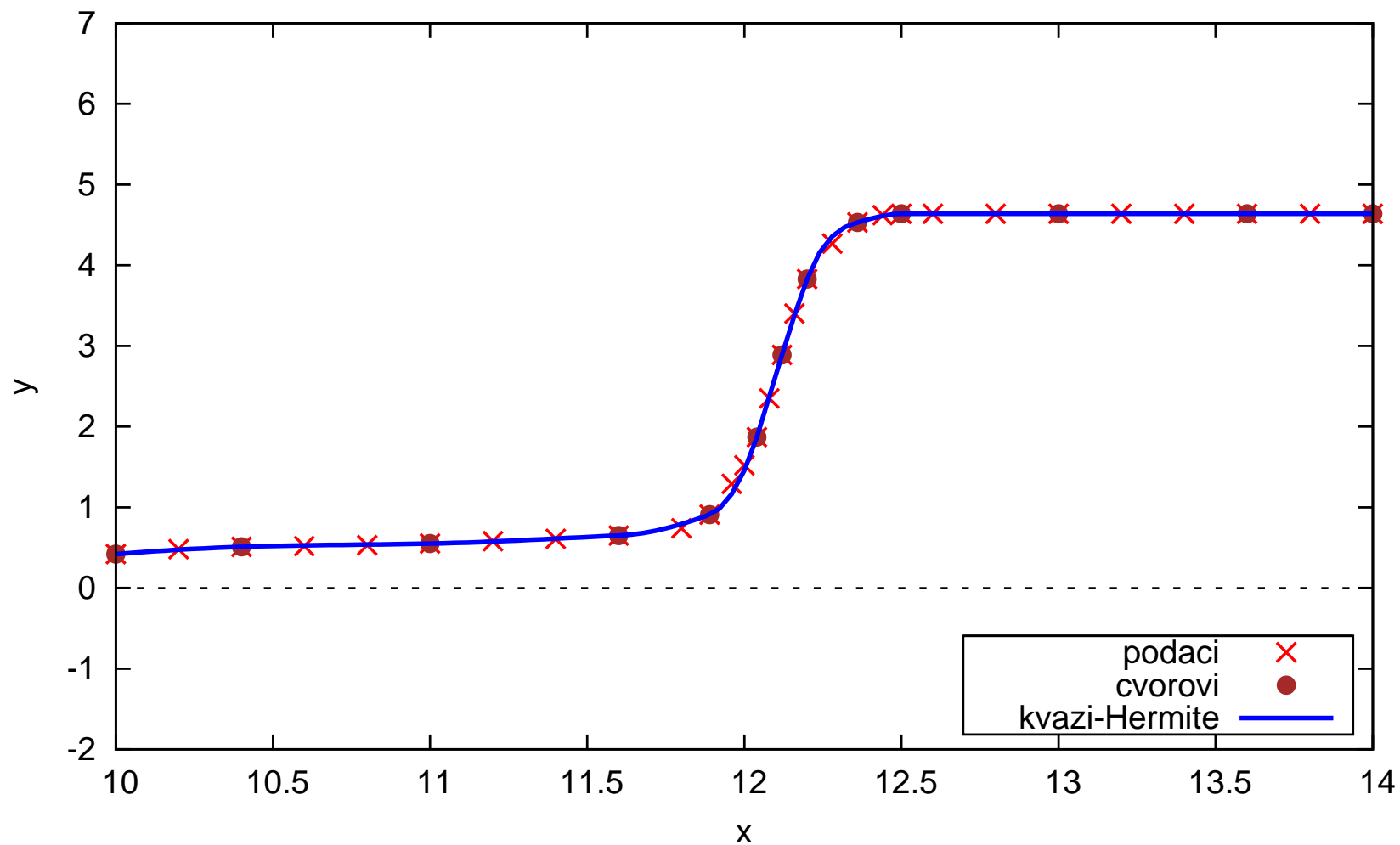
Polinom — 13 čvorova (još lošije!)

Interpolacijski polinom kroz 13 tocaka (Max = 889)



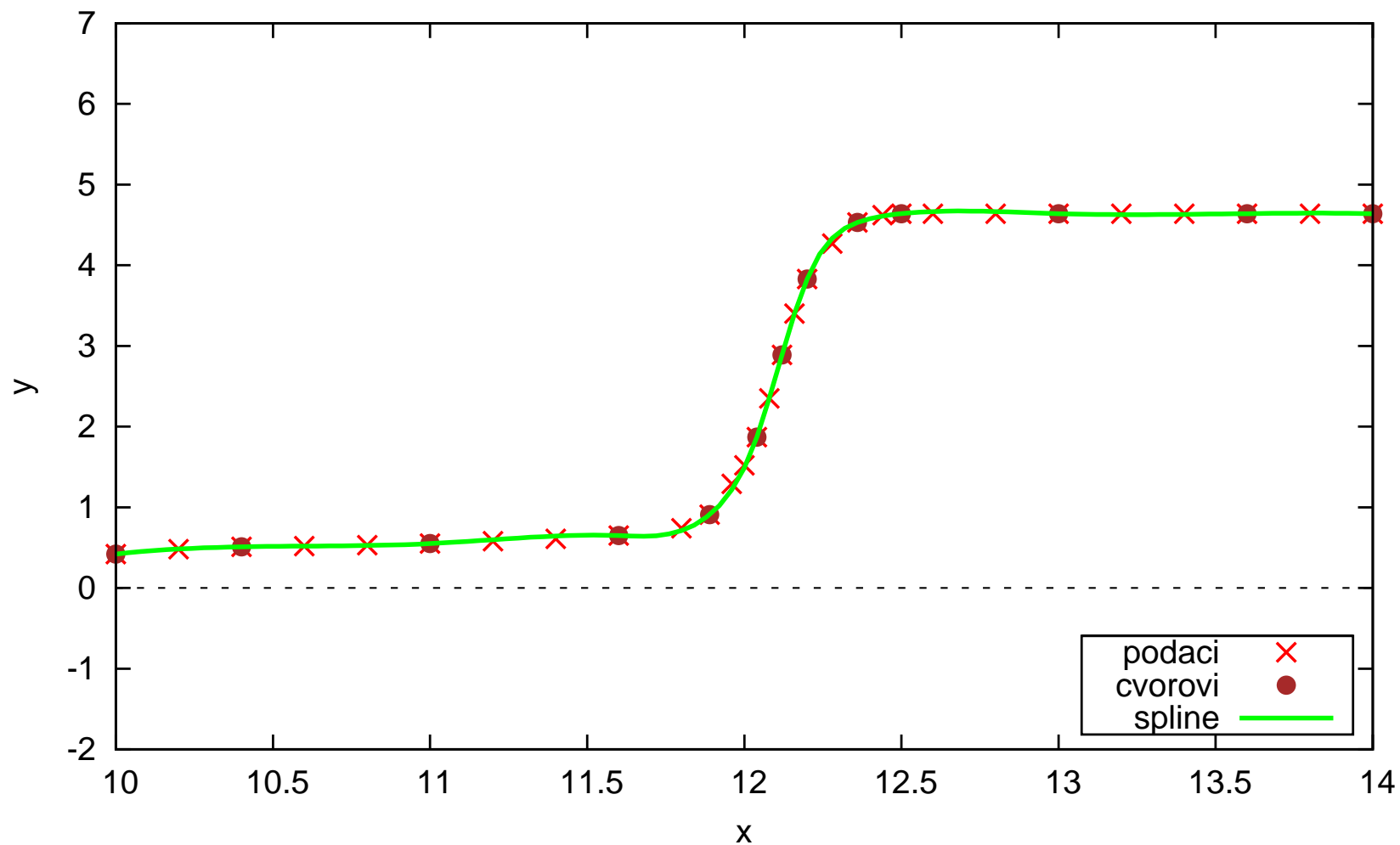
Akima — 13 čvorova

Kvazi-Hermiteova kubicna interpolacija (Akima) kroz 13 tocaka



Kubični splajn — 13 čvorova

Kubicna spline interpolacija (Not-a-Knot) kroz 13 tocaka



Sve tri interpolacije zajedno — 13 čvorova

