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:

- 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`

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

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

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 $k = 1, \ldots, n$. 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

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

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

Dodatni uvjeti interpolacije na derivaciju

Obično želimo da interpolacijska funkcija φ bude glađa:

- 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

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

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

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

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

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

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 $h \to 0$ 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, 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}		
			$\dfrac{f[x_{k-1}, x_k] - s_{k-1}}{h_k}$	
x_{k-1}	f_{k-1}			
				$\dfrac{s_k + s_{k-1} - 2f[x_{k-1}, x_k]}{h_k^2}$
		$f[x_{k-1}, x_k]$		
			$\dfrac{s_k - f[x_{k-1}, x_k]}{h_k}$	
x_k	f_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

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

Newtonov oblik polinoma p_k

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

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

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 onda 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, 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:

$$
\begin{aligned}
c_{0,k} &= f_{k-1}, \\
c_{1,k} &= s_{k-1}, \\
c_{3,k} &= \frac{s_k + s_{k-1} - 2f[x_{k-1}, x_k]}{h_k^2}, \\
c_{2,k} &= \frac{f[x_{k-1}, x_k] - s_{k-1}}{h_k} - h_k c_{3,k},
\end{aligned}
$$

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, 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

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

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Kao i prije, neka je h maksimalni razmak susjednih čvorova

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

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

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

Drugim riječima, ako ravnomjerno povećavamo broj čvorova, tako da $h \to 0$, onda i maksimalna greška teži u 0, 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	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$	$f[t_k, \ldots, t_{k+3}]$
0	1			
		0		
0	1		1	
		1		-1
1	2		0	
		1		
1	2			

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

$$
\begin{array}{c|ccccc}
t_k & f[t_k] & f[t_k, t_{k+1}] & f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}] & f[t_k, \ldots, t_{k+3}] \\
\hline
1 & 2 & & & \\
 & & 1 & & \\
1 & 2 & & -3 & \\
 & & -2 & & 6 \\
2 & 0 & & 3 & \\
 & & 1 & & \\
2 & 0 & & &
\end{array}
$$

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:

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

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

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

Numeričko deriviranje

Numeričko deriviranje — problem i nestabilnost

U praksi, derivacije funkcije često 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 tih 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 jednadžbi.

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

aproksimacija derivacije = derivacija aproksimacije (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 ≈ derivacija interp. polinoma

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

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

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

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 $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ 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 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$.

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

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

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

  i tim točkama vrijedi da je

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

  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

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

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

takva da za grešku aproksimacije k-te derivacije vrijedi

$$e_n^{(k)}(x) := f^{(k)}(x) - p_n^{(k)}(x)$$

$$= \frac{(x-\xi_{k,0})\cdots(x-\xi_{k,n-k})}{(n+1-k)!} f^{(n+1)}(\eta_k).$$

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 $\xi_{k,0}, \ldots, \xi_{k,n-k}$ 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 $k \in \{1, \ldots, n\}$, 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 $j = 0, \ldots, n$ (nultočka $\xi_{0,j}$ se “stisne” u čvor x_j).

Greška numeričkog deriviranja — sažetak

Uzmimo da je n fiksan i da su čvorovi interpolacije relativno "bliski", a točka x "nije daleko" od čvorova.

Neka je H maksimalna udaljenost do nekog čvora

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

Za "male" H, odnosno, za $H \to 0$, greška aproksimacije k-te derivacije je reda veličine

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

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 tzv. dijametar mreže

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

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:

- f ima još k derivacija više, tj. $f^{(n+1+k)}$ postoji na $[a, b]$,
- za "ljepši" oblik greške, često se uzima da je zadnja derivacija 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 $h \to 0$.

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 $k = 0, \ldots, n$.

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

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

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 interpolacije — pogrešan izvod

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 neprekidna, ili još i derivabilna funkcija! Dakle, ne tako.

Nažalost, u hrpi knjiga nađe se ovakav pogrešan "izvod".

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

- onda drugi član $f^{(n+1)}(\xi(x))$ smijemo derivirati po x,

tako da dobijemo ispravan rezultat za grešku $e_n'(x)$.

Greška polinomne interpolacije — ponavljanje

Treba krenuti iz Newtonovog oblika greške, bez ξ-ova.

Teorem. Pretpostavimo da f' 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 $k = 0, \ldots, n$.

Za svaku točku $x \in [a, b]$, za grešku interpolacije vrijedi

$$e(x) := f(x) - p_n(x) = \omega(x)\, f[x_0, \ldots, x_n, x].$$

Ovo vrijedi i u čvorovima interpolacije, zato što f' postoji na cijelom $[a, b]$, pa i u čvorovima. ∎

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

Treba nam derivacija podijeljene razlike.

Derivacija podijeljene razlike po argumentu

Teorem. Neka su $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ fiksni čvorovi podijeljene razlike i neka je $x \in [a, b]$ "varijabilni" čvor — po toj varijabli deriviramo. Za prvu derivaciju podijeljene razlike vrijedi

$$\frac{d}{dx} f[x_0, \ldots, x_n, x] = f[x_0, \ldots, x_n, x, x].$$

Ako je x višestruki čvor, onda vrijedi

$$\frac{d}{dx} f[x_0, \ldots, x_n, \underbrace{x, \ldots, x}_{k \text{ puta}}] = k \cdot f[x_0, \ldots, x_n, \underbrace{x, \ldots, x, x}_{(k+1) \text{ puta}}].$$

Funkcija f mora biti dovoljno glatka na $[a, b]$, tako da

- lijeva podijeljena razlika postoji oko točke x,
- desna podijeljena razlika postoji u točki x. ■

Derivacija greške interpolacije — korektan izvod

Dokaz ovog teorema ide iz rekurzije za podijeljenje razlike. Slično se može napraviti i za više derivacije (ponovljena prva).

Grešku interpolacije $e_n(x) = \omega(x)\, f[x_0, \ldots, x_n, x]$ deriviramo po varijabilnom čvoru x. Derivacijom produkta dobivamo

$$
\begin{aligned}
e_n'(x) &= \omega'(x)\, f[x_0, \ldots, x_n, x] + \omega(x) \cdot \frac{d}{dx} f[x_0, \ldots, x_n, x] \\
&= \omega'(x)\, f[x_0, \ldots, x_n, x] + \omega(x)\, f[x_0, \ldots, x_n, x, x].
\end{aligned}
$$

Ovdje je dovoljno da f' postoji na cijelom $[a, b]$, a f'' postoji u čvorovima (tu koristimo da su čvorovi međusobno različiti).

Na kraju, iskoristimo teorem srednje vrijednosti za podijeljene razlike. Zadnja razlika ima $n + 3$ čvora $\Longrightarrow$ trebamo $f^{(n+2)}$.

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

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

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

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

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 $H \to 0$.

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 $x_0, \ldots, x_n$, napisan u Newtonovom obliku

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

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

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

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

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

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 $h \to 0$.

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, tako da je

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

Sugestivnija oznaka je

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

jer se točke pišu u prirodnom redosljedu: x_{-1}, x_0, x_1. Uz te oznake 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}		
		$\dfrac{f_0 - f_{-1}}{h}$	
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 ili 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

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

Razlog: Za linearnu interpolaciju p_1, s čvorovima x_{-1} i x_1, polovište $x_0 = (x_{-1} + x_1)/2$ je nultočka derivacije pripadnog polinoma čvorova $\omega_1(x) = (x - x_{-1})(x - x_1)$, tj. posebna točka!

Iz ranijeg teorema, za $e_1'(x_0)$ dobivamo isti izraz za grešku, tj.

- greška derivacije je reda veličine $O(h^2)$, a ne samo $O(h)$.

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka

2. Točke x_1 i x_2 s iste strane x_0

Rasporedimo, na primjer, x_1 i x_2 desno od x_0, tako da je

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

I ovdje su točke ekvidistantne, ali 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		
		$\dfrac{f_1 - f_0}{h}$	
x_1	f_1		$\dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}$
		$\dfrac{f_2 - f_1}{h}$	
x_2	f_2		

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

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

Greška je istog reda veličine $O(h^2)$, kao u simetričnom slučaju. Međutim, konstanta je ovdje dvostruko veća.

Numeričko deriviranje — druga derivacija

Kvadratni interpolacijski polinom p_2 možemo iskoristiti i za aproksimaciju druge derivacije. Druga derivacija p_2'' je konstanta, pa u bilo kojoj točki x možemo uzeti $f''(x) \approx p_2''(x)$.

Neka su čvorovi interpolacije simetrično raspoređeni oko x_0, tj. $x_{-1} = x_0 - h$, $x_1 = x_0 + h$. Uz te oznake je (v. raniju tablicu)

$$p_2''(x) = 2\, f[x_0, x_1, x_{-1}] = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}.$$

Zadatak. Dokažite da za grešku $e_2''(x) := f''(x) - p_2''(x)$ vrijedi

$$e_2''(x_0) = -\frac{1}{12}\, h^2\, f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_{-1}, x_1),$$

a za sve ostale točke $x \in [x_{-1}, x_1]$ vrijedi $e_2''(x) = O(h)$. Nađite točan izraz za grešku. $\Rightarrow$ Polovište x_0 je opet posebna točka!

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 u teoriji.

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 (ili centralne) 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

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

Ako odatle izrazimo f_1 i f_{-1}, a zatim ih uvrstimo 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 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

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

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

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

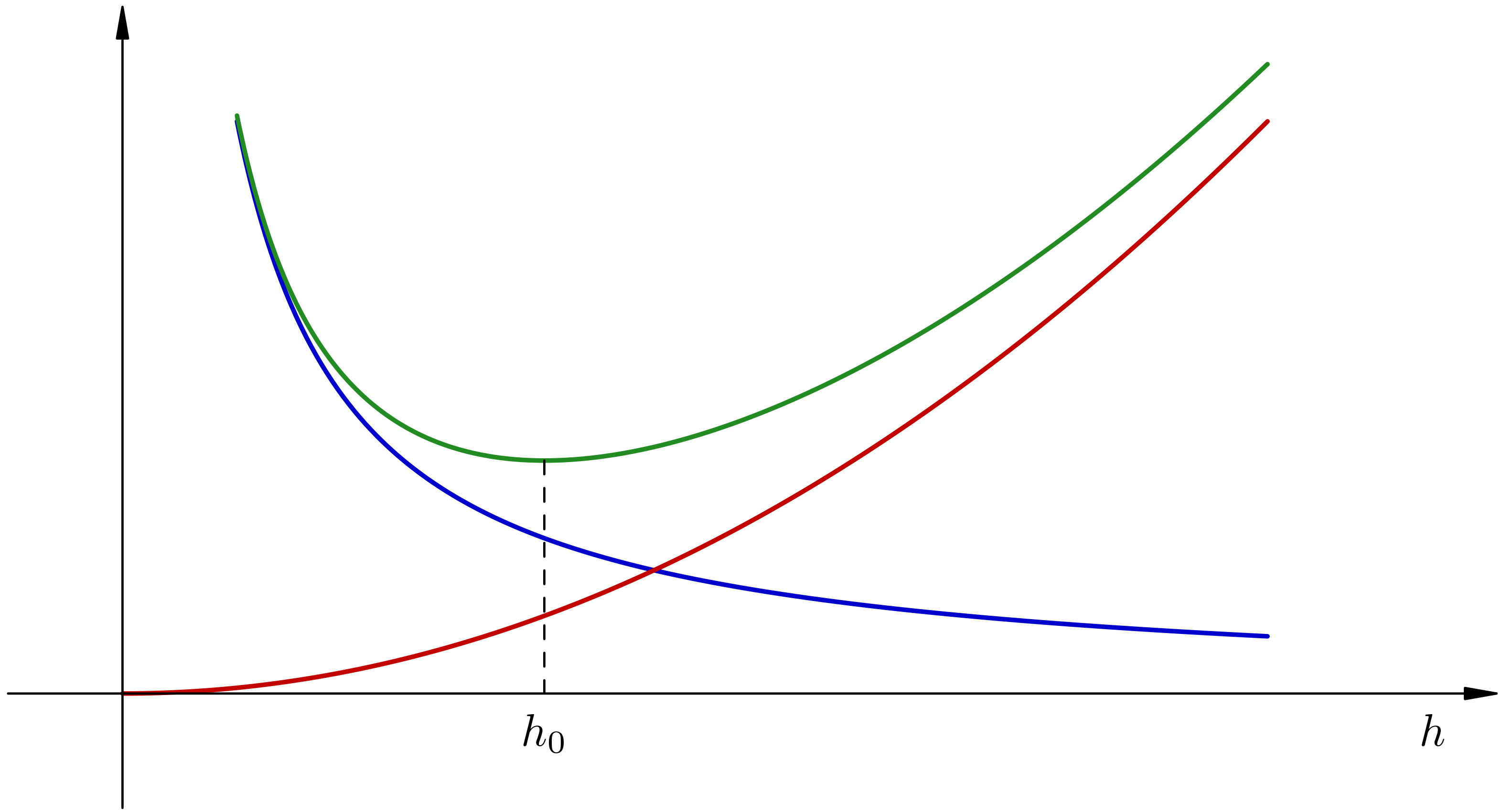
Ponašanje ove ocjene i njezina dva člana u ovisnosti od h možemo prikazati sljedećim grafom.

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

Optimalni h_0



Optimalni h_0 i minimum ukupne greške

Odmah vidimo da $e(h)$ ima minimum po h. Taj minimum se lako računa deriviranjem. Iz

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

izlazi da se lokalni minimum postiže za

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

Zbog $e''(h) > 0$ za $h > 0$, to je, ujedno, i globalni minimum. 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

Vidimo da, i u najboljem slučaju,

- kad je ukupna greška najmanja (za $h = h_0$), ta greška 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 $k = 0, \ldots, n$.

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

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

Podijeljene razlike unazad

Ako koristimo podijeljene razlike unazad, onda je

$$s_k = \begin{cases} \dfrac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}, & \text{za } k = 0, \\[2ex] \dfrac{f_k - f_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}, & \text{za } k = 1, \ldots, n. \end{cases}$$

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 — istog reda veličine kao kod po dijelovima linearne interpolacije (jedino je interpolacija φ ovdje glađa).

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 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 $k = 1, \ldots, n-1$, pripadni kvadratni interpolacijski polinom je

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

Besselova aproksimacija derivacija — sredina

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 $k = 1, \ldots, n$, prethodna se formula može napisati 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, 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

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

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_0 dobivamo

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

Ovdje, težine uz podijeljene razlike imaju suprotne predznake.

Besselova aproksimacija derivacija — kraj

Za $k = n$, pripadni kvadratni interpolacijski polinom je

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

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_n dobivamo

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

Besselova aproksimacija derivacija — greška

Dakle, za Besselovu po dijelovima kubičnu interpolaciju stavljamo

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

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:

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

uz

$$w_k = \big| f[x_k, x_{k+1}] - f[x_{k-1}, x_k] \big|, \qquad k = 1, \ldots, n-1,$$

i

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

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.

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

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

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 izglađivanja 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 $s_0, \ldots, s_n$ možemo odrediti i iz zahtjeva da funkcija φ

- ima neprekidnu drugu derivaciju u unutarnjim čvorovima mreže $x_1, \ldots x_{n-1}$, 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

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

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

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

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 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 lijeve strane 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 prethodnu relaciju s $h_k h_{k+1}$ i

- prebacimo sve s_k na lijevu stranu (oni su nepoznati),
- a članove koji nemaju s_k na desnu stranu (to je poznato).

Dobivamo da za $k = 1, \ldots, n-1$ mora vrijediti

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

Linearni sustav za kubičnu splajn interpolaciju

Ovo je linearni sustav

- s $(n+1)$ nepoznanica i $(n-1)$ jednadžbi.

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" $s_1, \ldots, s_{n-1}$.

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

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

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

Matrice A i R imaju jednake dijagonale iznad glavne.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Ostale elemente matrica L i R računamo sljedećim algoritmom

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

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

Primijetite da, kod splajn interpolacije,

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

Dva dodatna uvjeta — rubni uvjeti

Posljednje otvoreno pitanje je kako možemo izabrati s_0 i s_n? Naime, nedostaju 2 uvjeta za jedinstvenost!

- Oni se, najčešće, ne zadaju direktno.

Uobičajeno se zadaju tzv. rubni uvjeti na funkciju φ,

- iz kojih se onda određuju s_0 i s_n,
- ili dobivamo dvije dodatne jednadžbe, koje se dodaju ranijem linearnom sustavu za nagibe (tamo s_0 i s_n ostavimo na lijevoj strani, jer ih ne znamo).

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 $O(h^4)$.

- Rubni uvjeti su egzaktni — iz funkcije f, odnosno, iz f', pa nemaju nikakvu grešku aproksimacije.
- Greška dolazi samo od po dijelovima kubične interpolacije i ta 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

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

Kad to 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.
Uočite da je pripadni redak strogo dijagonalno dominantan!

Zadana druga derivacija u rubovima — kraj

Slično, iz

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

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

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

Tu jednadžbu dodajemo kao zadnju u linearni sustav i pripadni redak je opet strogo dijagonalno dominantan.

Dobiveni linearni sustav

- ima $n+1$-u jednadžbu i isto toliko nepoznanica,
- a matrica je regularna, pa ima jedinstveno rješenje.

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

Prirodni splajn

(c) Prirodni splajn

Poznato: tzv. slobodni krajevi (dolazi iz jednadžbe štapa),

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

Dodatne jednadžbe: isto kao u (b), samo se uvrsti $f''(x_0) = f''(x_n) = 0$, pa dobijemo

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

Greška aproksimacije:

- Ako f nema druge derivacije na rubu jednake 0, onda je greška u funkcijskoj vrijednosti samo $O(h^2)$,
- 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 je reda $O(h^4)$ u funkcijskoj vrijednosti.

Lošija aproksimacija derivacija povećava grešku pri rubovima!

Not-a-knot (nije čvor) splajn

(e) Not-a-knot (nije čvor) splajn

Nepoznato: dvije “rubne” jednadžbe za splajn φ.

Umjesto neke aproksimacije derivacije funkcije f u rubovima, koristimo tzv. “not-a-knot” (nije čvor) uvjet za splajn.

- 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 daje dodatne uvjete ljepljenja u čvorovima x_1 i x_{n-1}:

- u x_1 se zalijepi i treća derivacija polinoma p_1 i p_2,
- u 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

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

Iz prve jednadžbe slijedi da su vodeći koeficijenti polinoma p_1 i p_2 jednaki,

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

Uvjet ljepljenja druge derivacije u x_1 ima oblik (v. ranije)

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

U formuli za $c_{2,2}$ iskoristimo da je $c_{3,2} = c_{3,1}$

$$c_{2,2} = \frac{f[x_1, x_2] - s_1}{h_2} - h_2 c_{3,2} = \frac{f[x_1, x_2] - s_1}{h_2} - h_2 c_{3,1}.$$

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

Kad uvrstimo ovo i izraze za $c_{2,1}$, $c_{3,1}$, dobivamo

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

Sređivanjem, izlazi prva jednadžba

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

Not-a-knot (nije čvor) splajn — kraj

Na sličan način dobivamo i zadnju jednadžbu

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

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

Porijeklo naziva “not-a-knot”:

- kubični splajn uobičajeno ima neprekidne druge derivacije u unutarnjim čvorovima $x_1, \ldots, x_{n-1}$.
- 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 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

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

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.

Greška kubičnog splajna i rubni uvjeti

Ove ocjene greške, naravno, vrijede samo uz pretpostavku

- da su i rubni uvjeti dovoljno točni,
- tj. i oni zadavoljavaju 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:

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

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 $k = 0, \ldots, 5$.

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 $k = 1, \ldots, 4$.

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

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

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

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

Primjer — prirodni splajn

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	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$	$f[t_k, \ldots, t_{k+3}]$
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 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 $x_1, \ldots, x_{n-1}$ 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 $k = 0, \ldots, n$. 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,

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

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

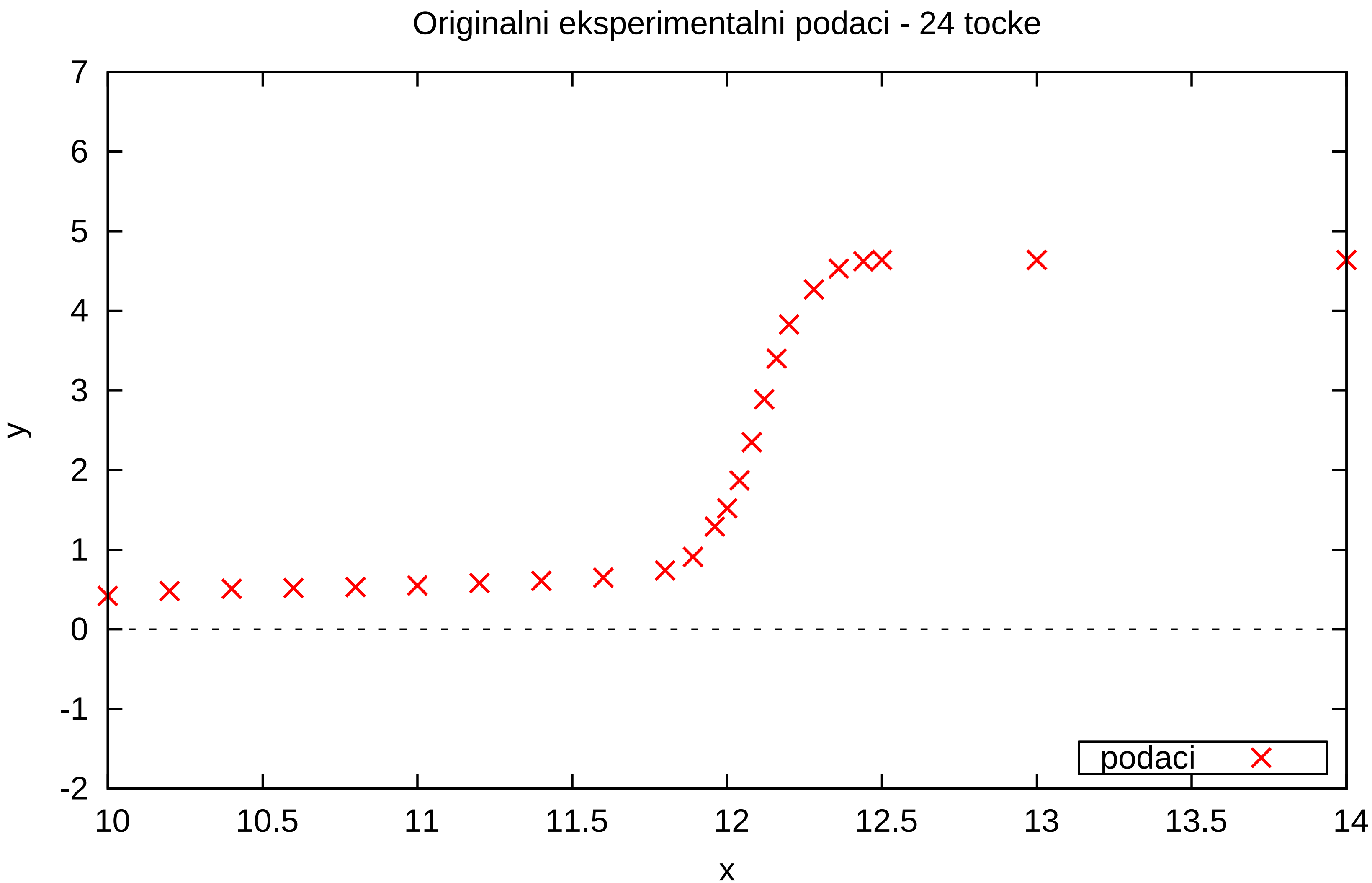
Originalni eksperimentalno izmjereni podaci su 24 točke:

k	x_k	y_k
1	10.00	0.42
2	10.20	0.48
3	10.40	0.51
4	10.60	0.52
5	10.80	0.53
6	11.00	0.55
7	11.20	0.58
8	11.40	0.61

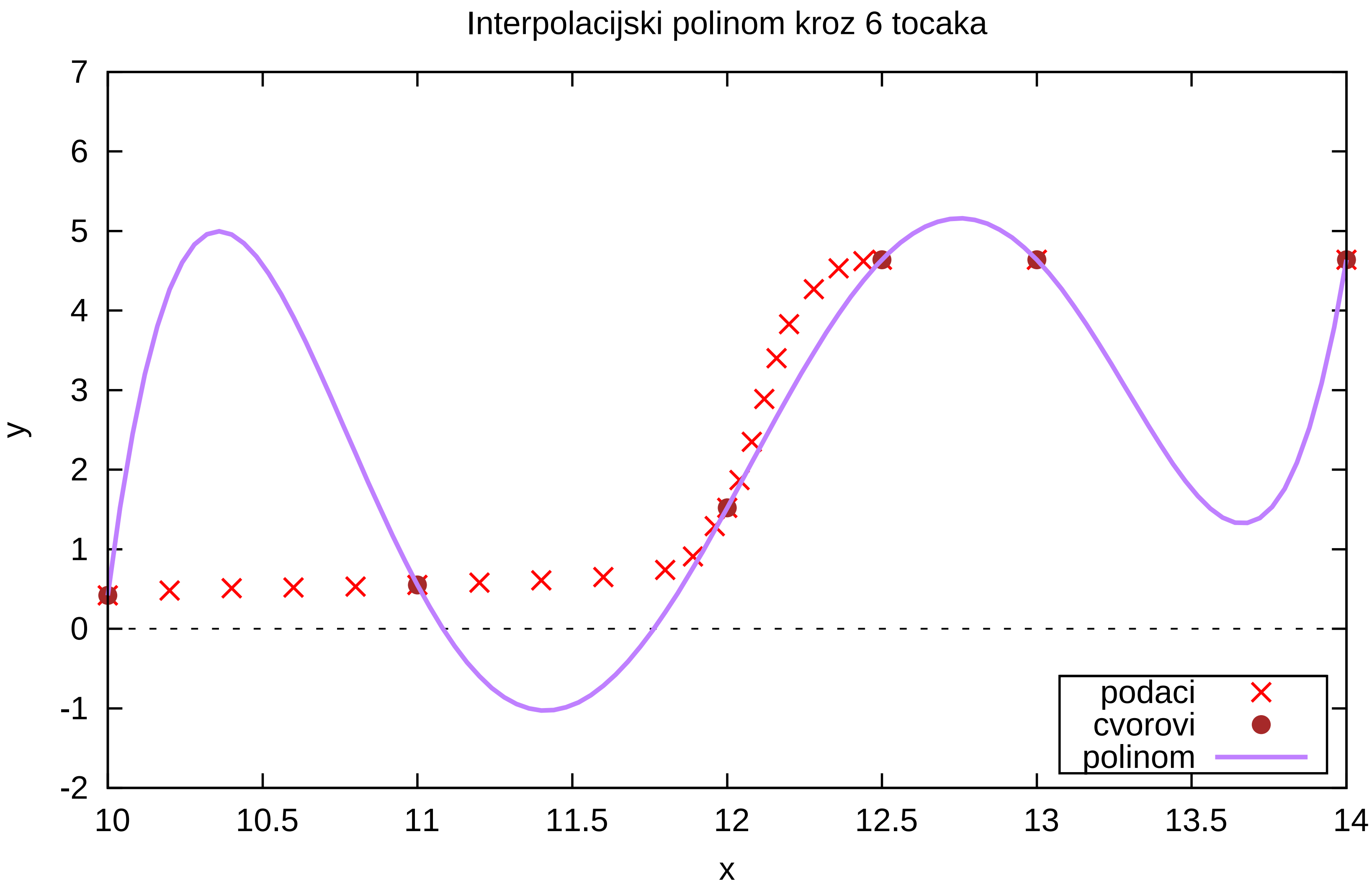
k	x_k	y_k
9	11.60	0.65
10	11.80	0.74
11	11.89	0.91
12	11.96	1.29
13	12.00	1.52
14	12.04	1.87
15	12.08	2.35
16	12.12	2.89

k	x_k	y_k
17	12.16	3.40
18	12.20	3.83
19	12.28	4.27
20	12.36	4.53
21	12.44	4.62
22	12.50	4.64
23	13.00	4.64
24	14.00	4.64

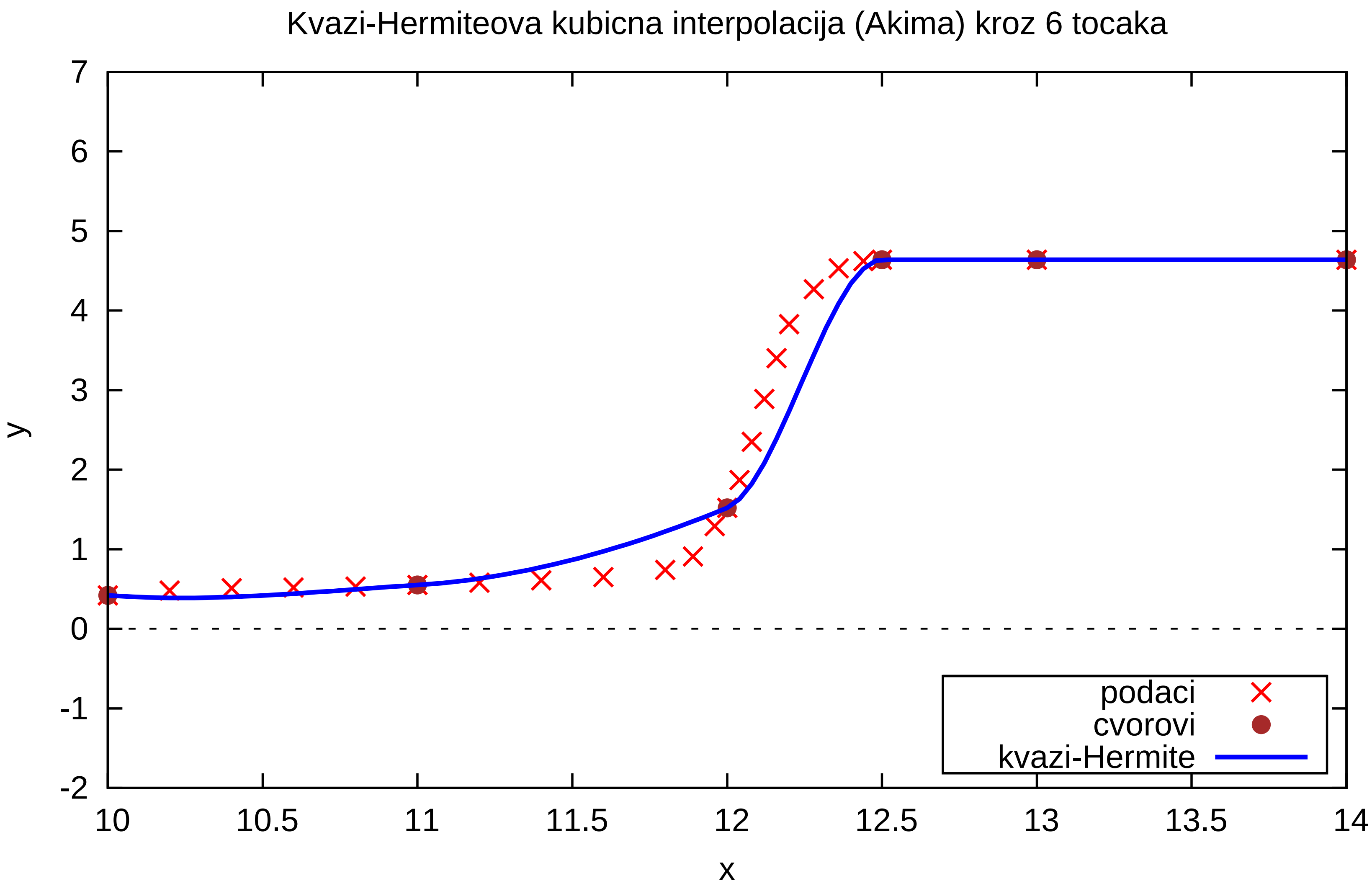
Eksperimentalno izmjereni podaci



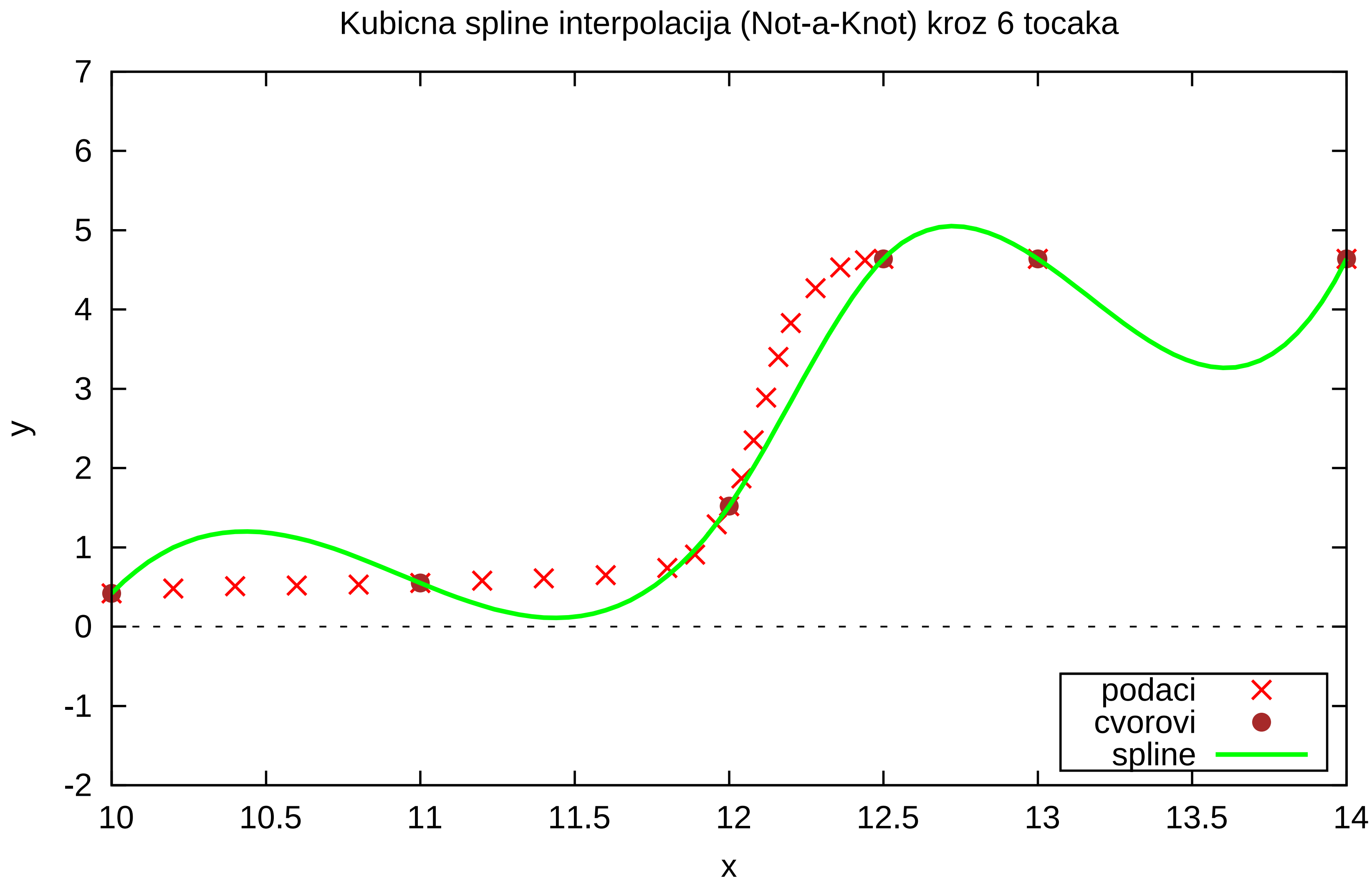
Polinom — 6 čvorova



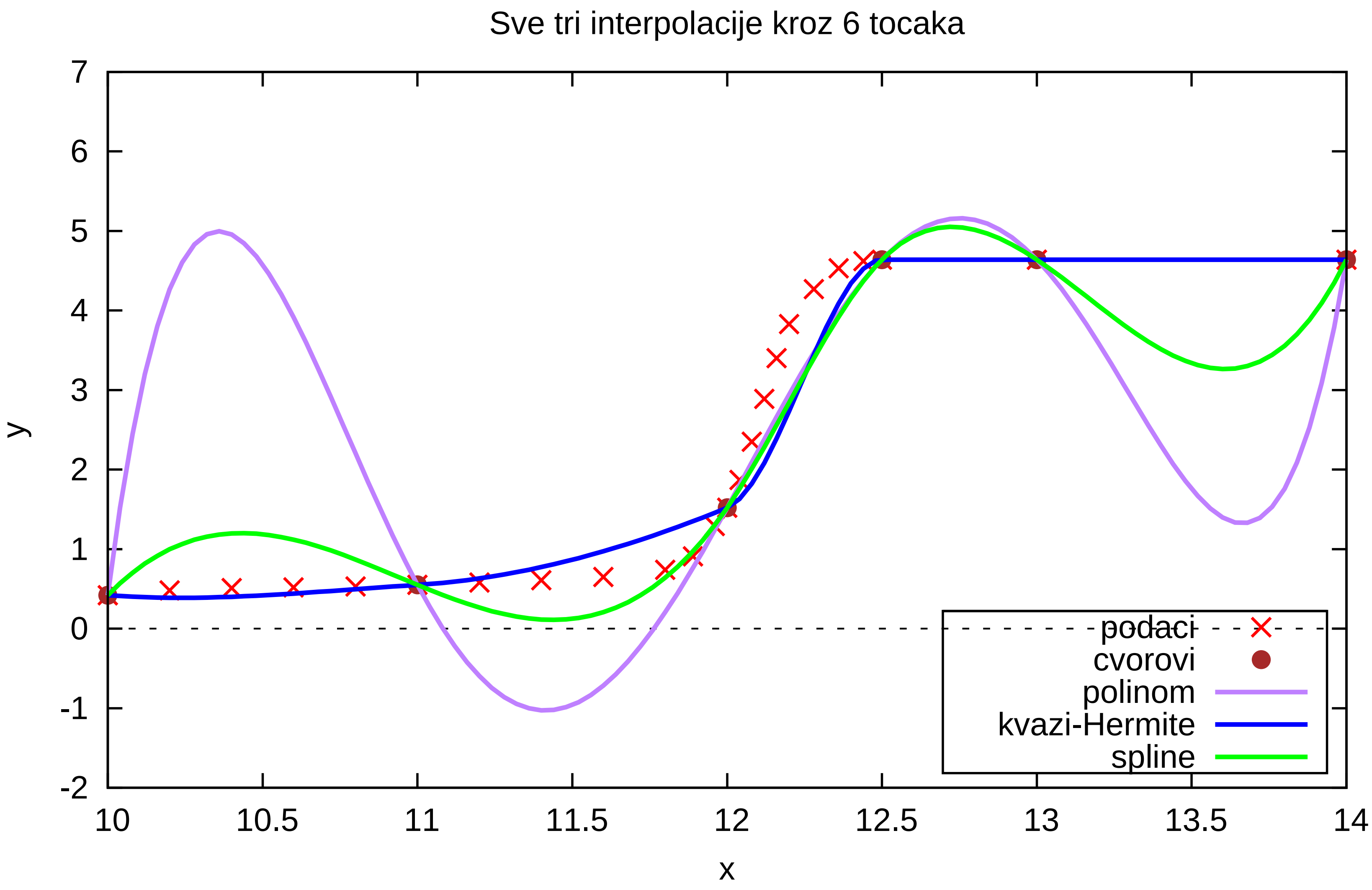
Akima — 6 čvorova



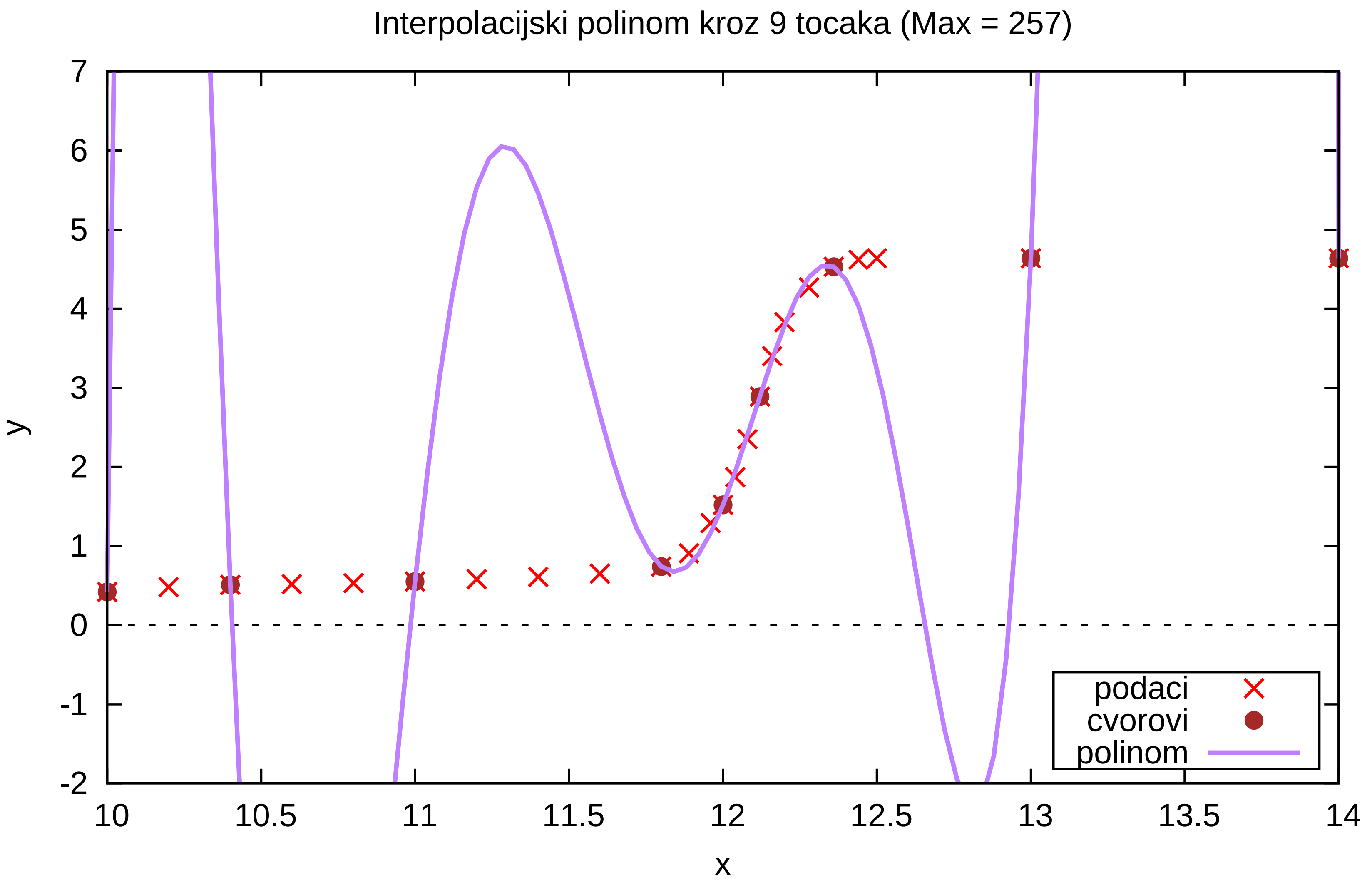
Kubični splajn — 6 čvorova



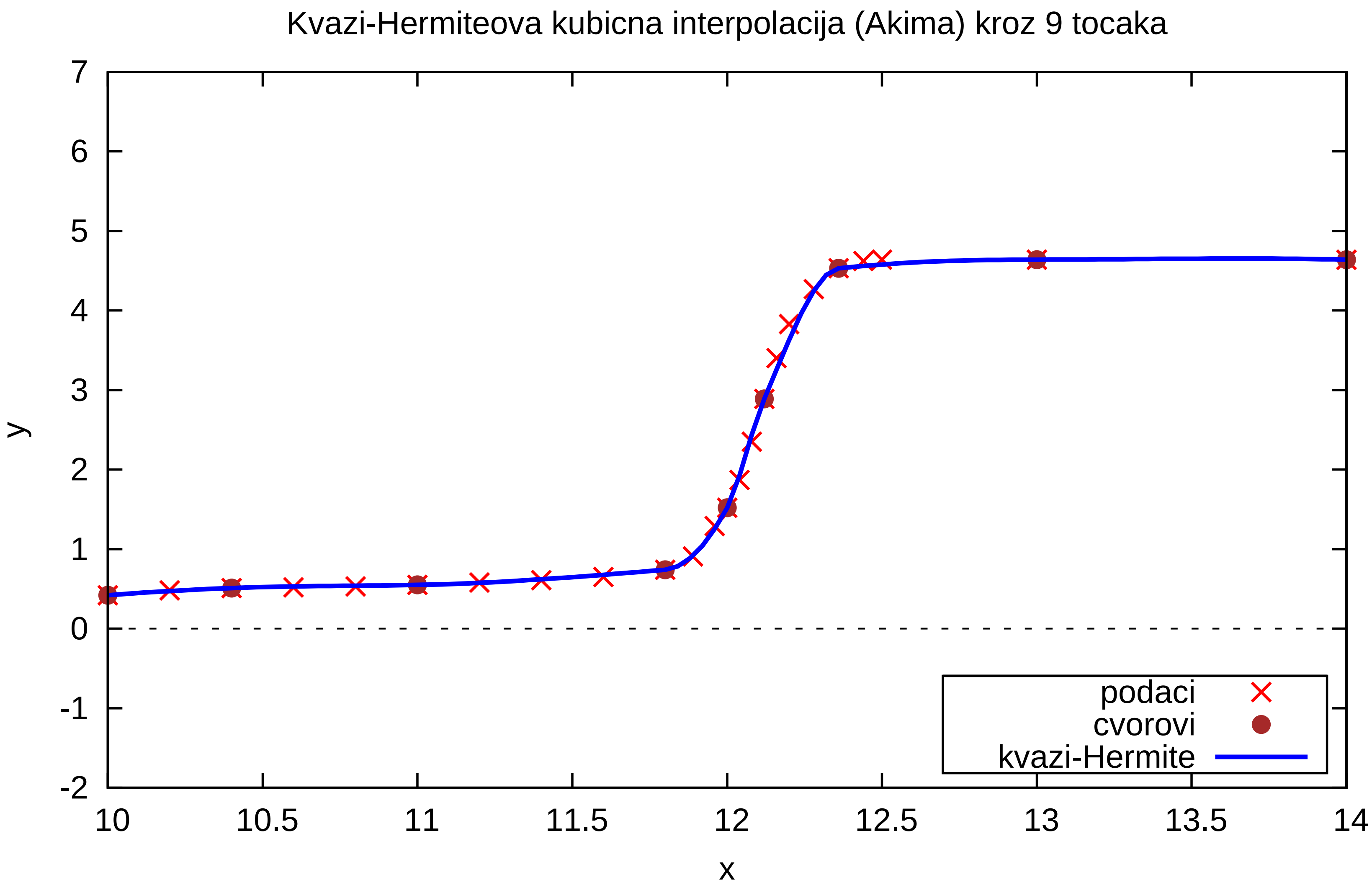
Sve tri interpolacije zajedno — 6 čvorova



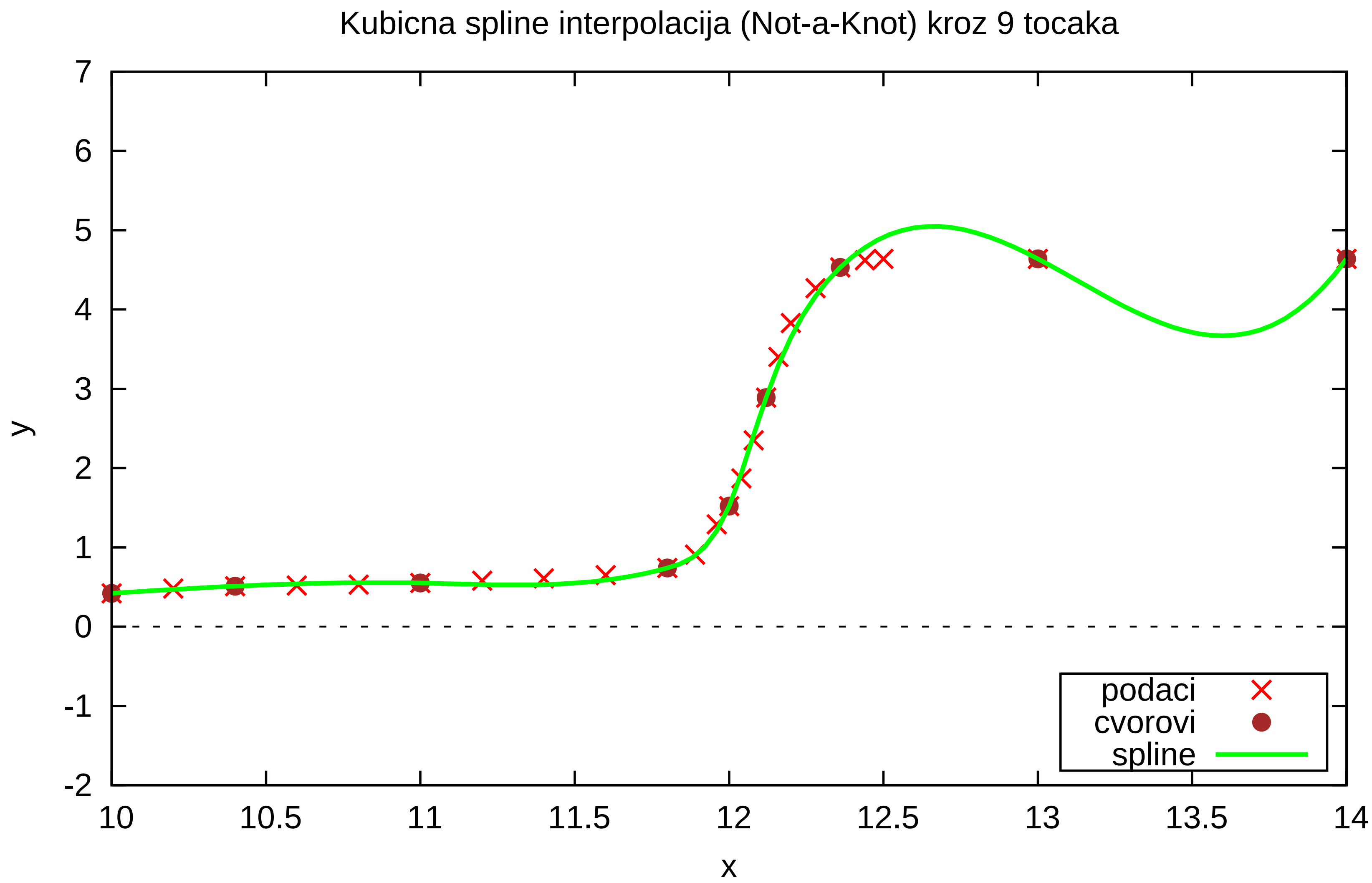
Polinom — 9 čvorova (lošije!)



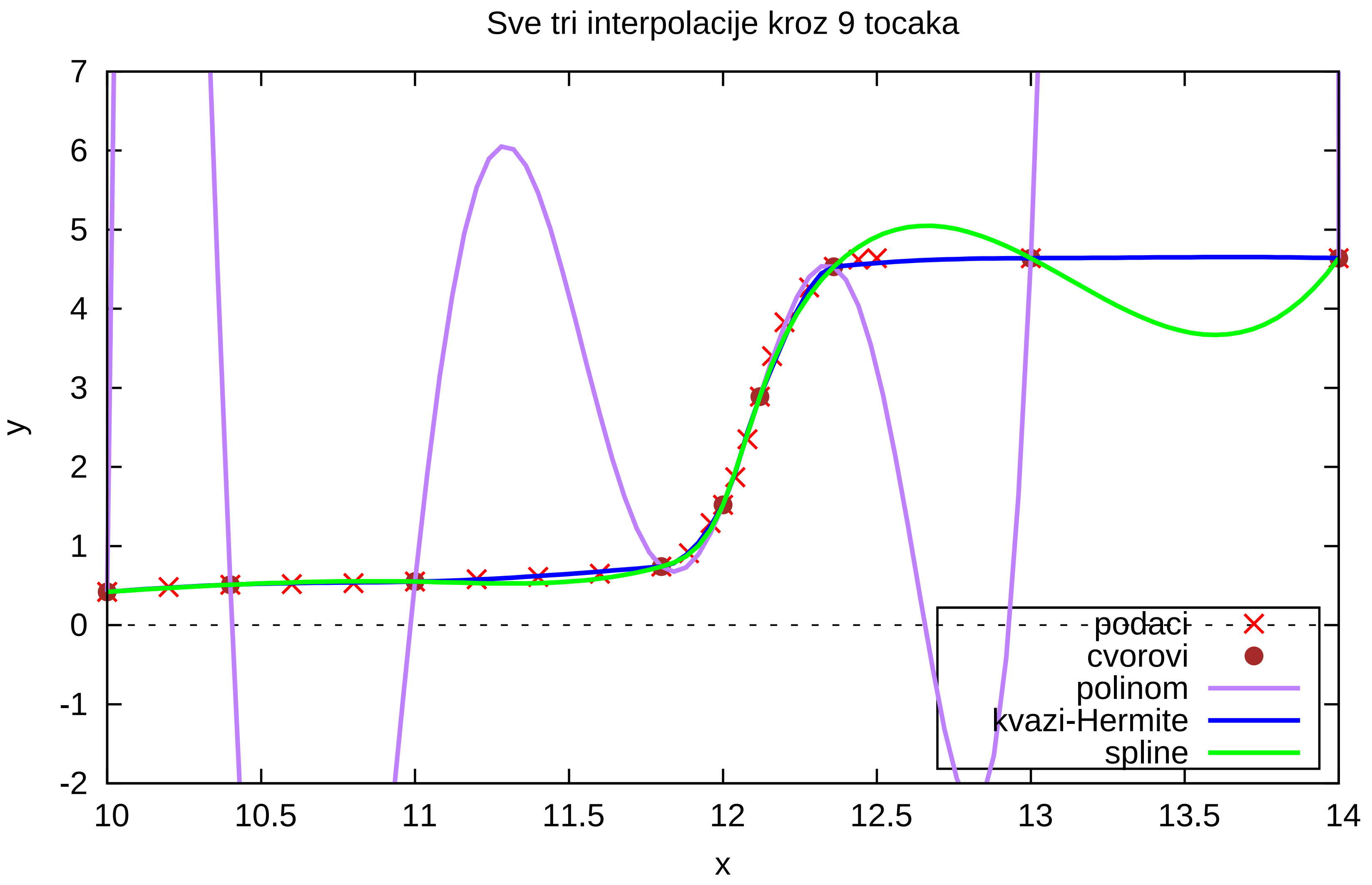
Akima — 9 čvorova



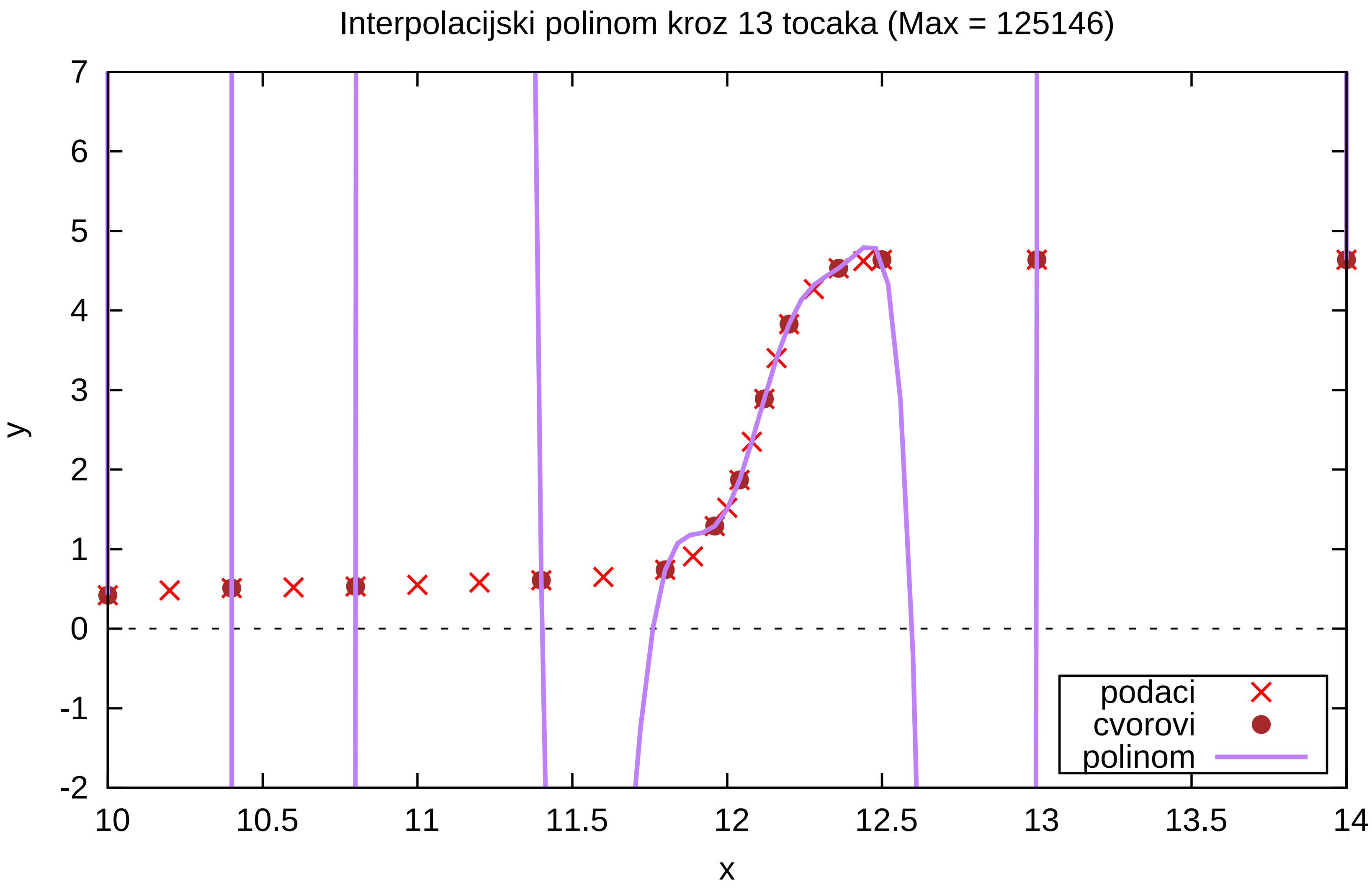
Kubični splajn — 9 čvorova



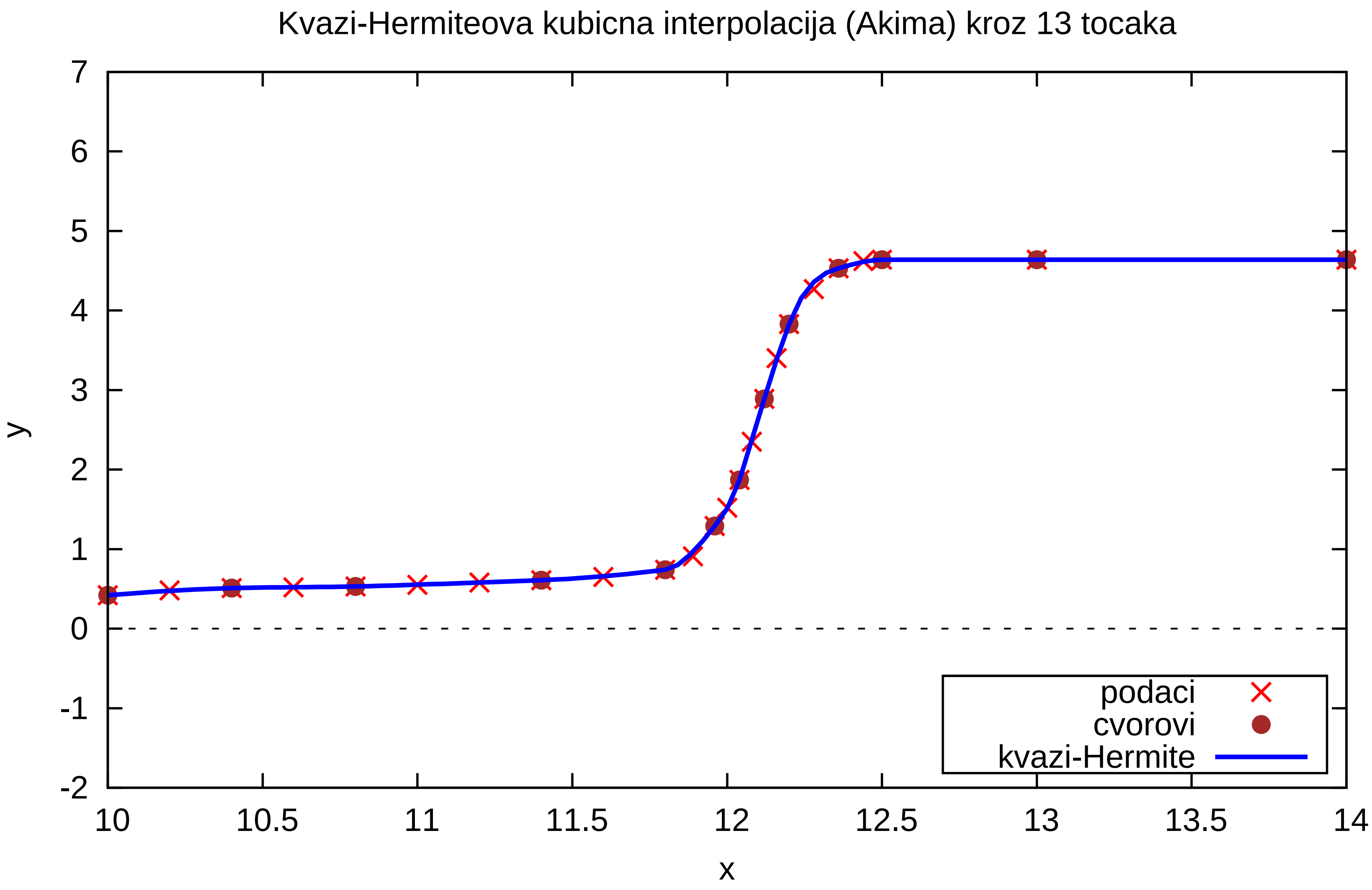
Sve tri interpolacije zajedno — 9 čvorova



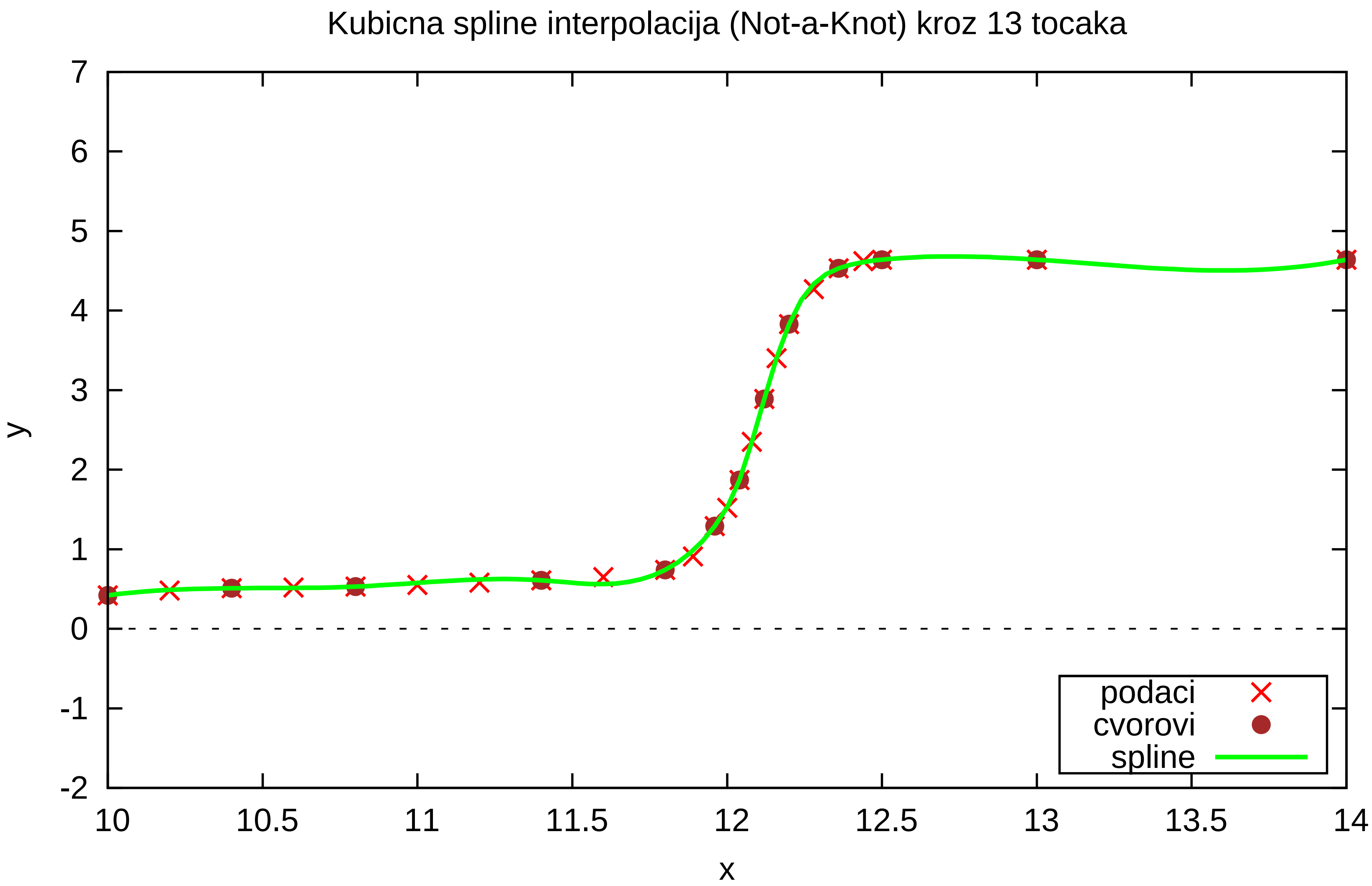
Polinom — 13 čvorova (još lošije!)



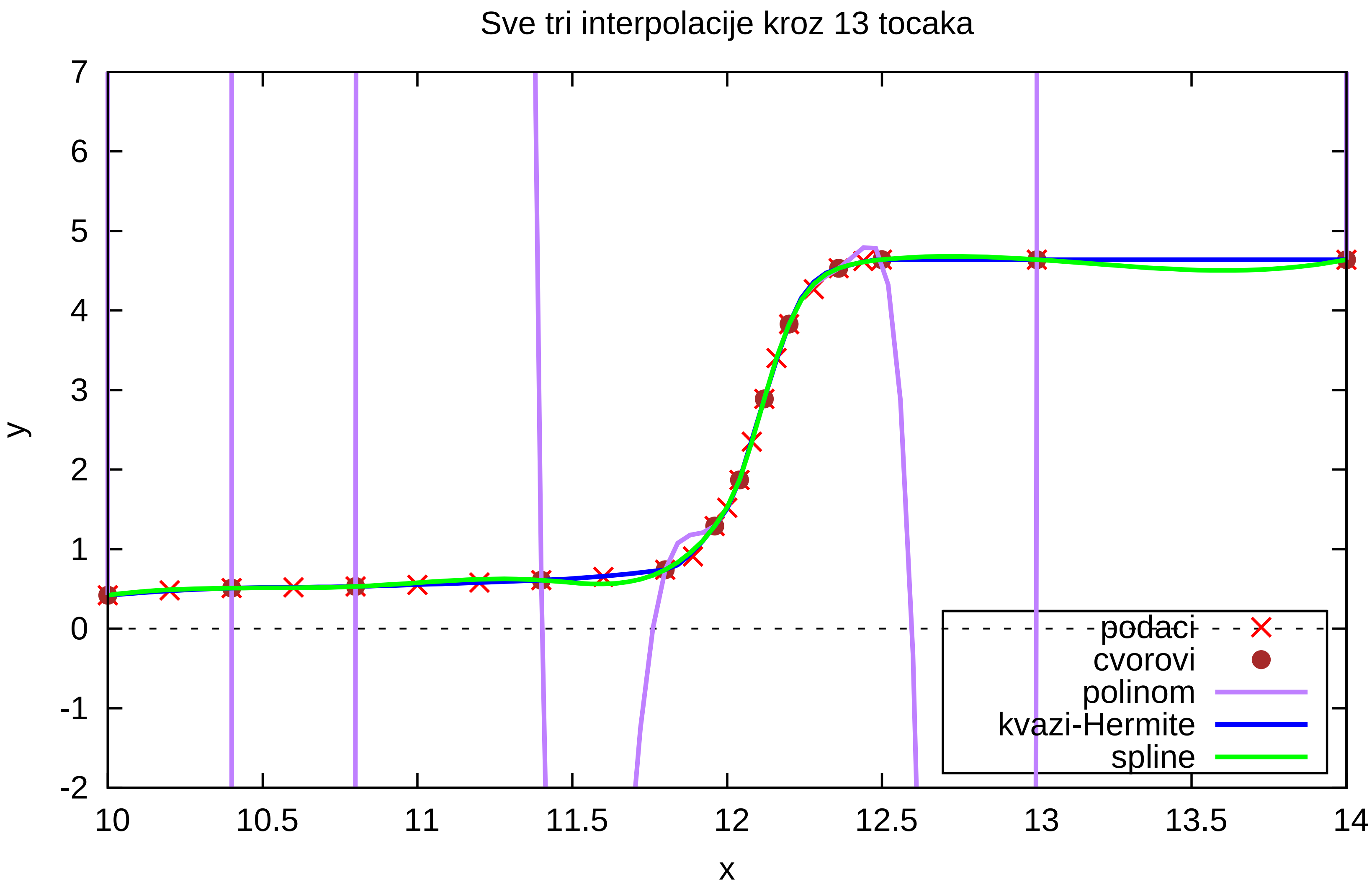
Akima — 13 čvorova



Kubični splajn — 13 čvorova



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.

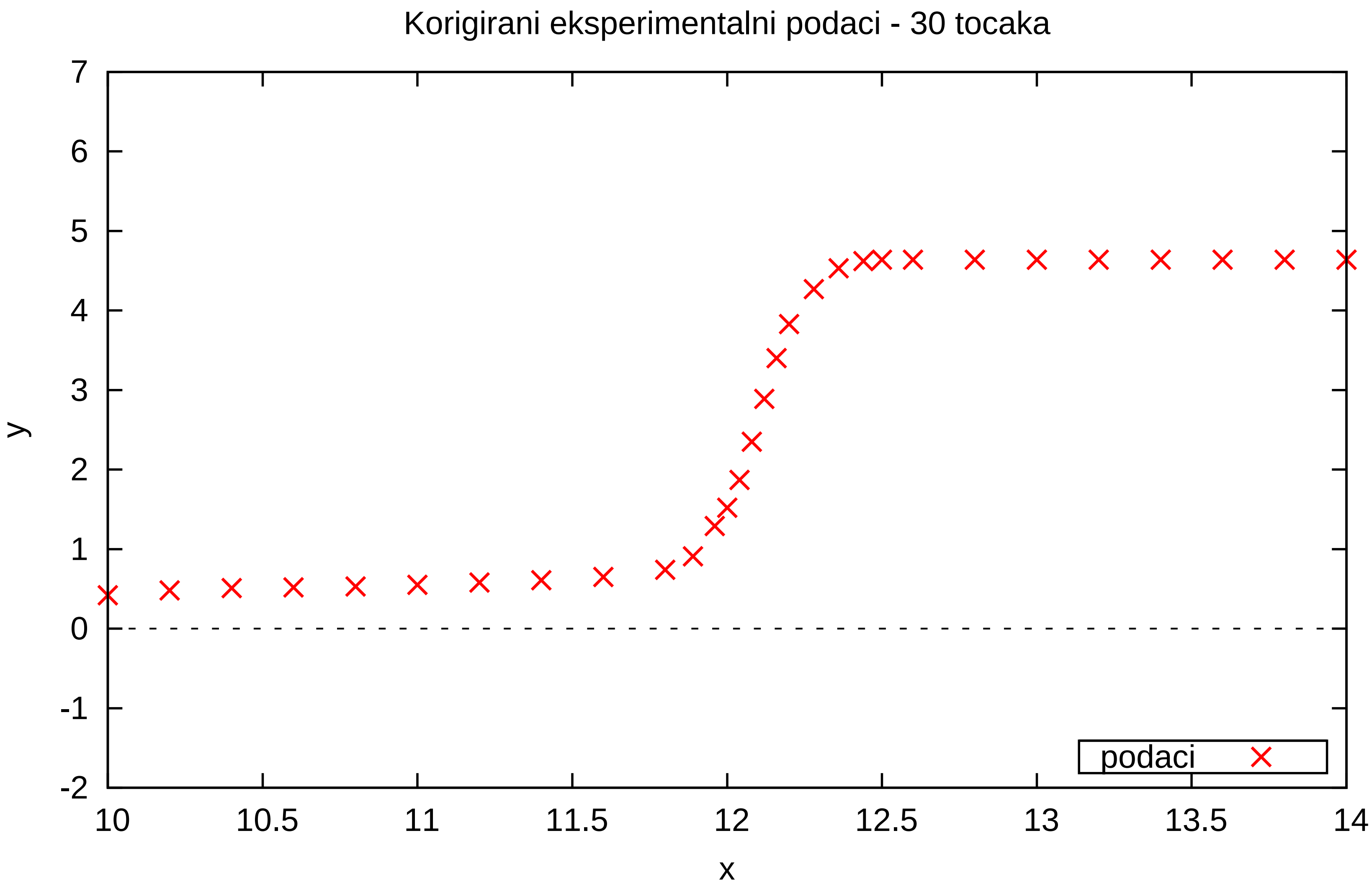
Tako dobivamo puno veći izbor čvorova za interpolaciju!

Korigirani izmjereni podaci — tablica

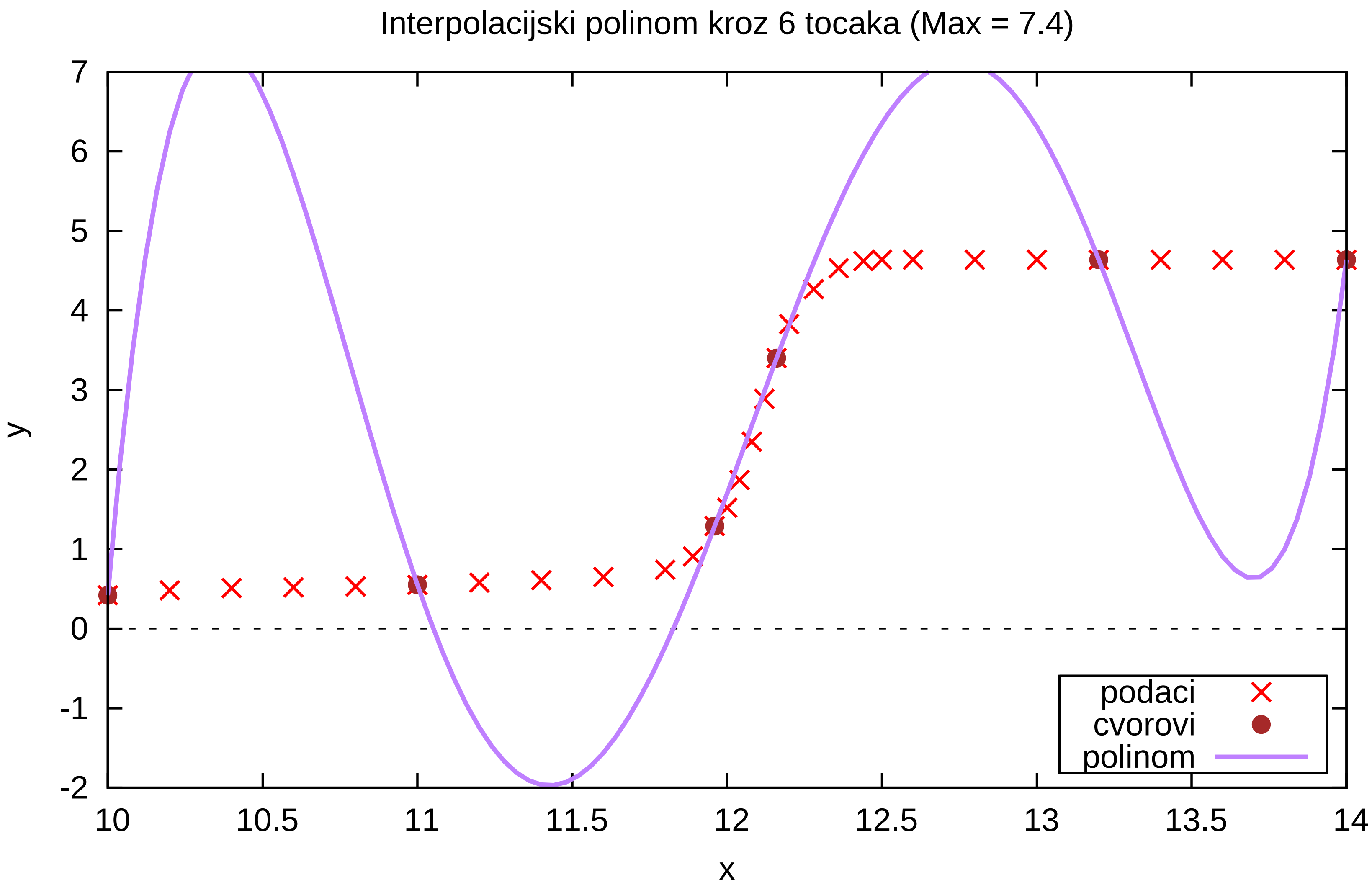
Korigirani eksperimentalno izmjereni podaci imaju 30 točaka:

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

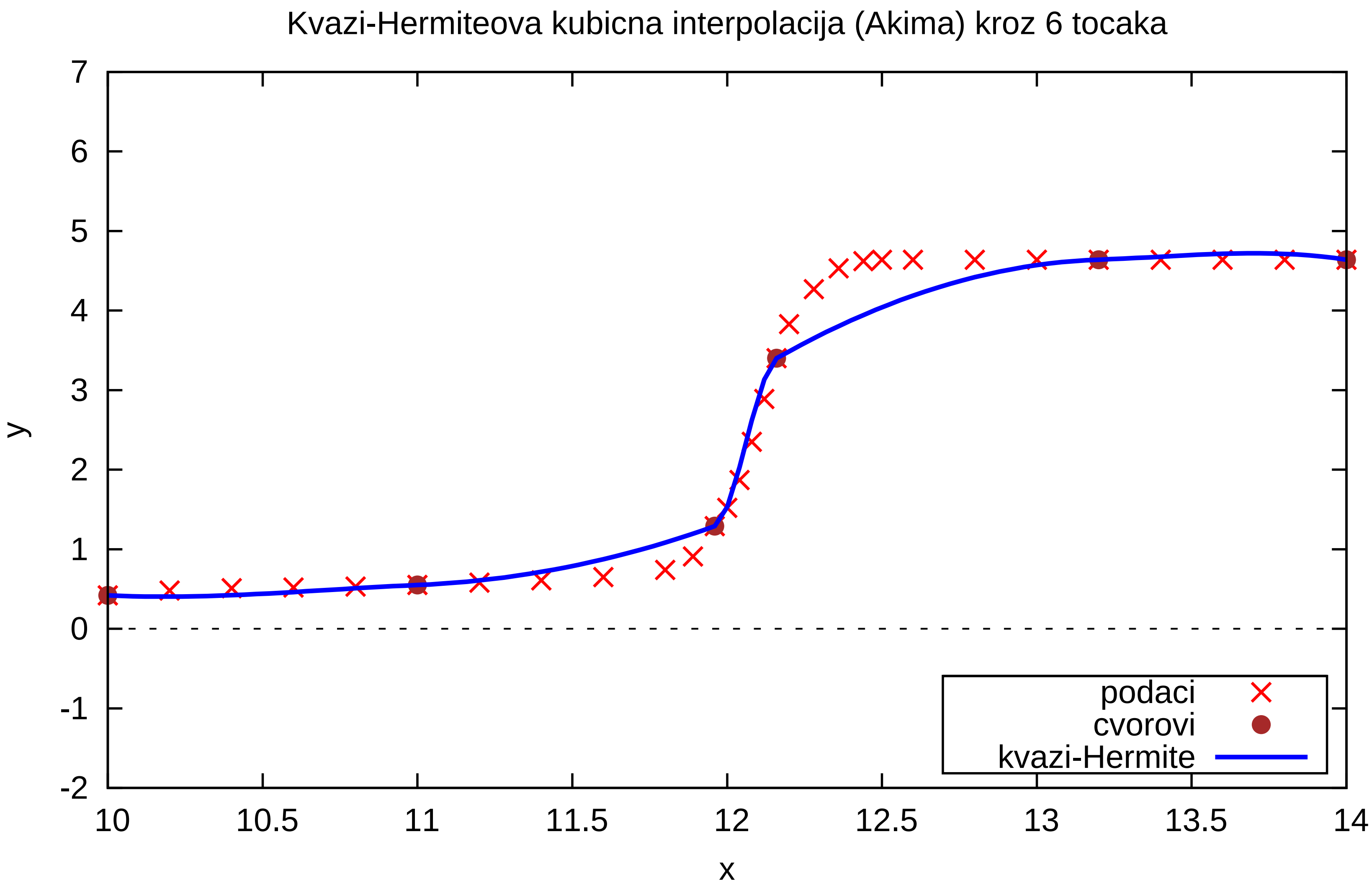
Korigirani (dopunjeni) izmjereni podaci



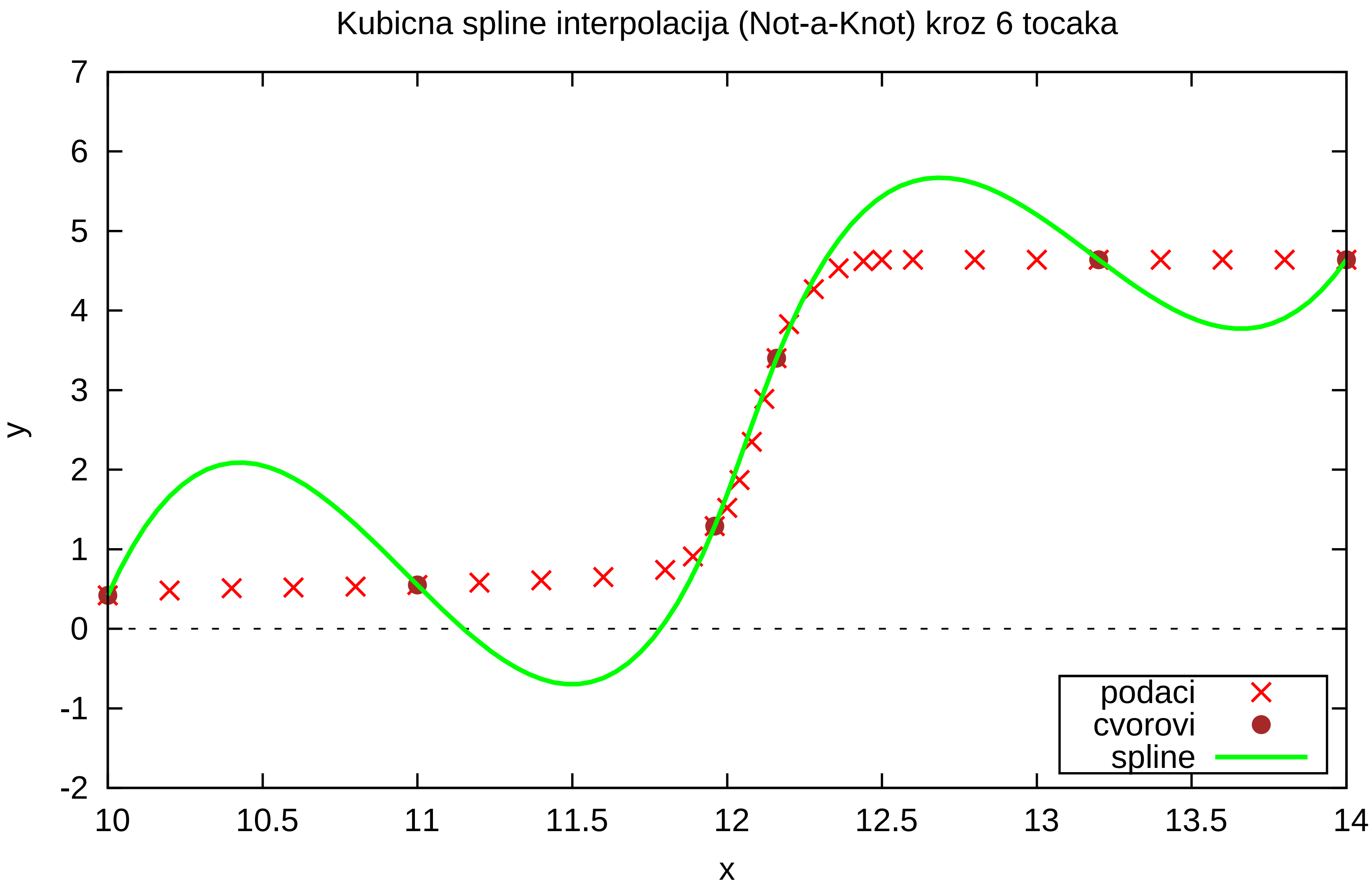
Polinom — 6 čvorova



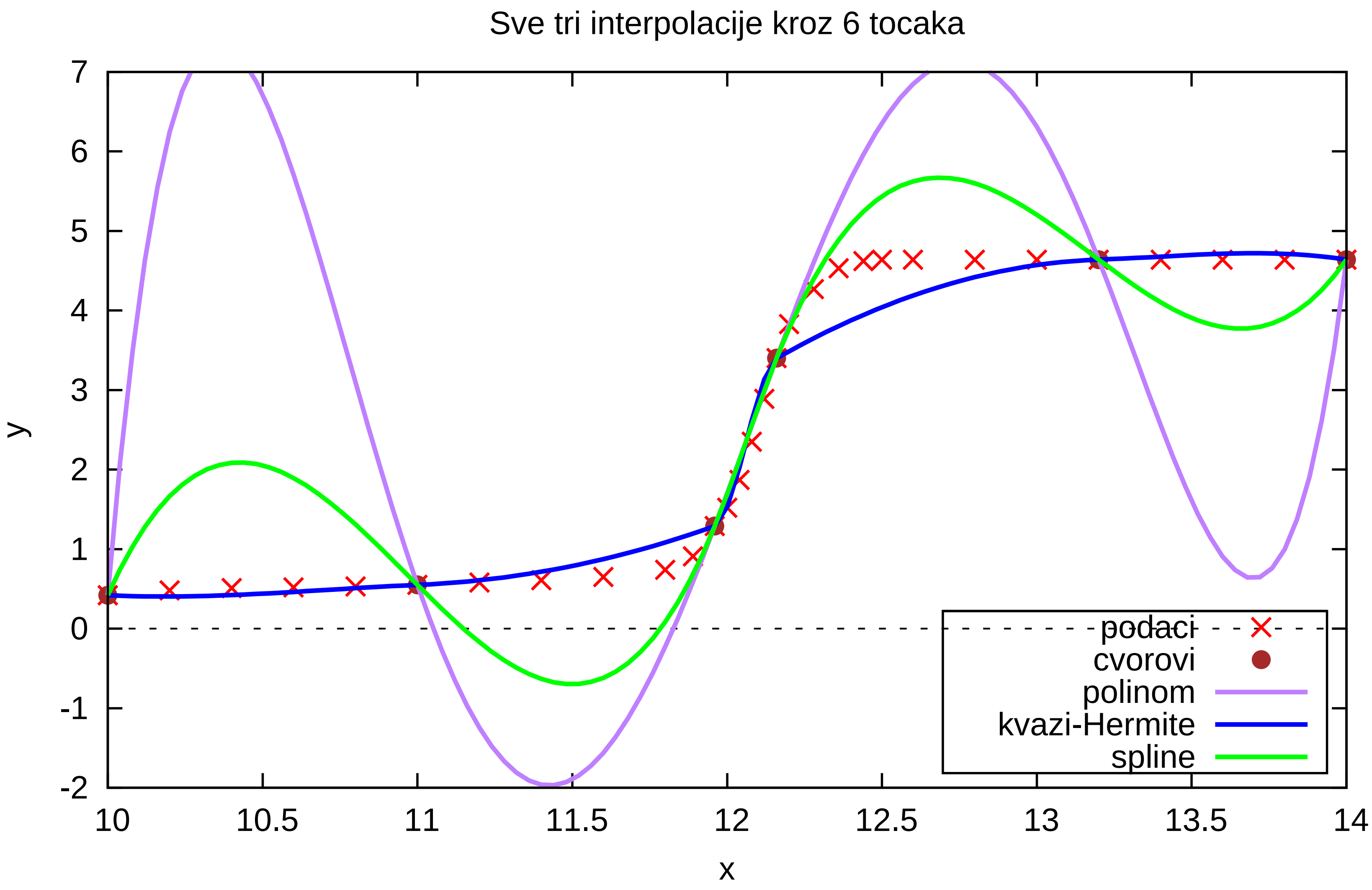
Akima — 6 čvorova



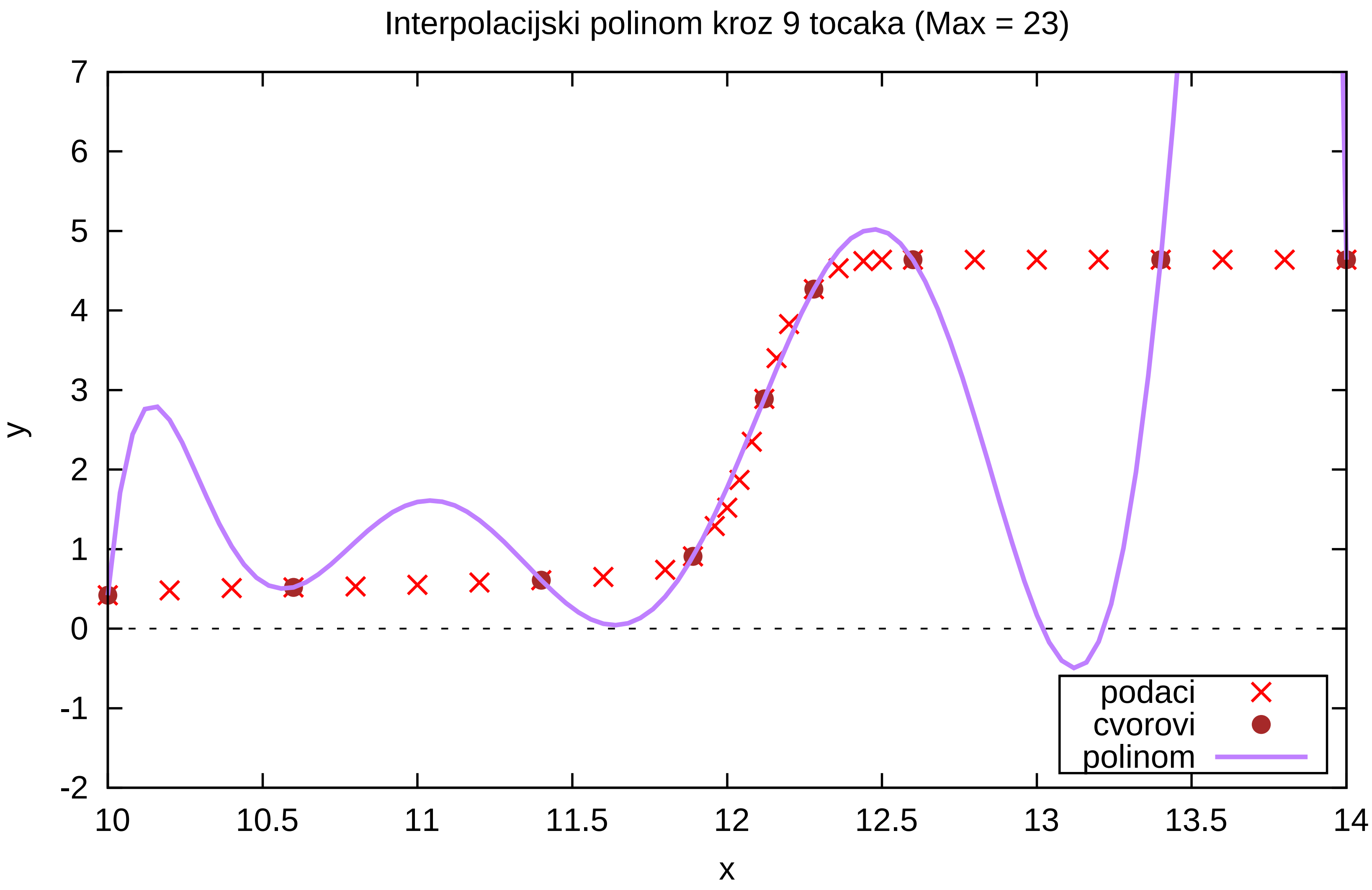
Kubični splajn — 6 čvorova



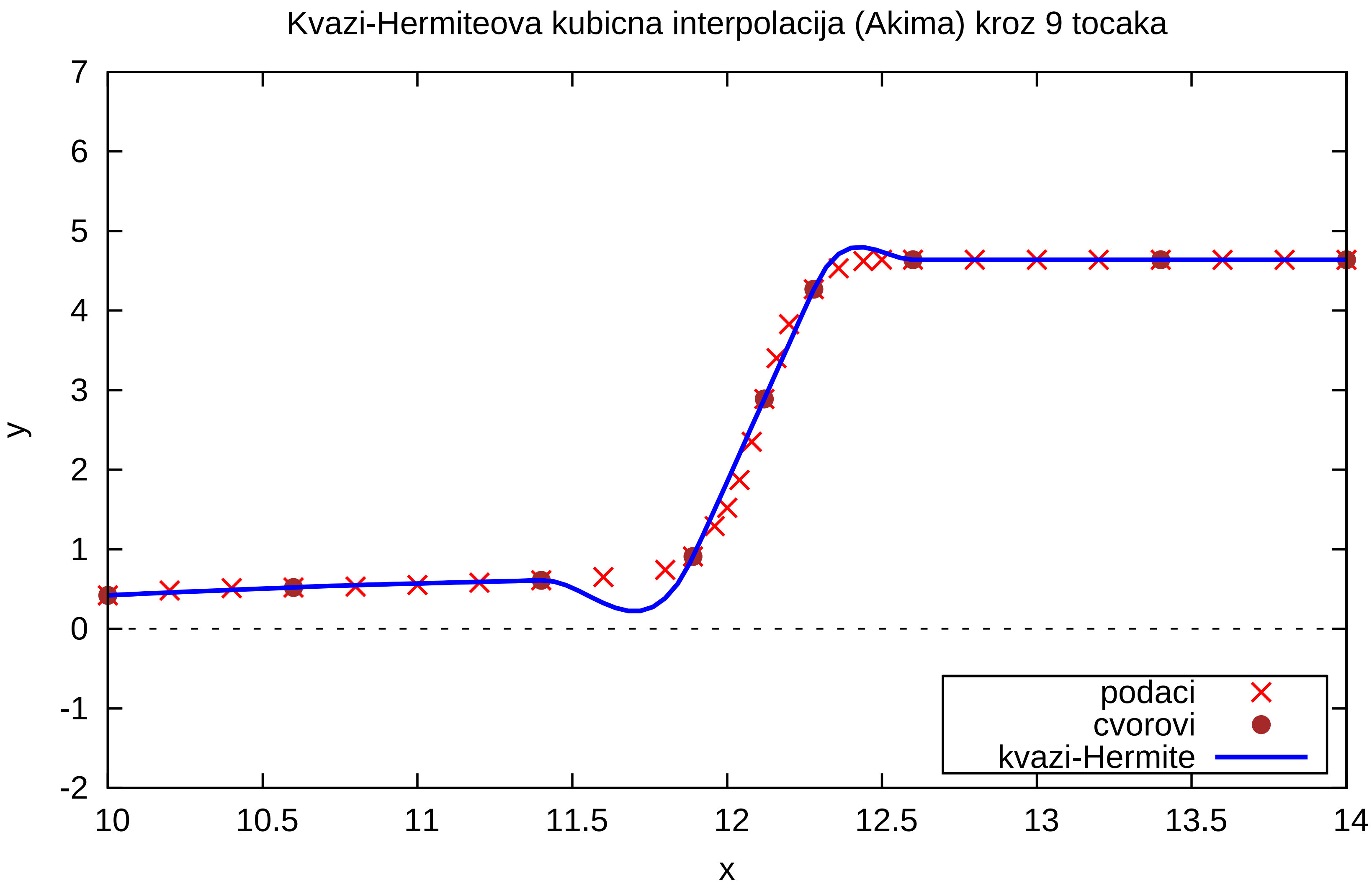
Sve tri interpolacije zajedno — 6 čvorova



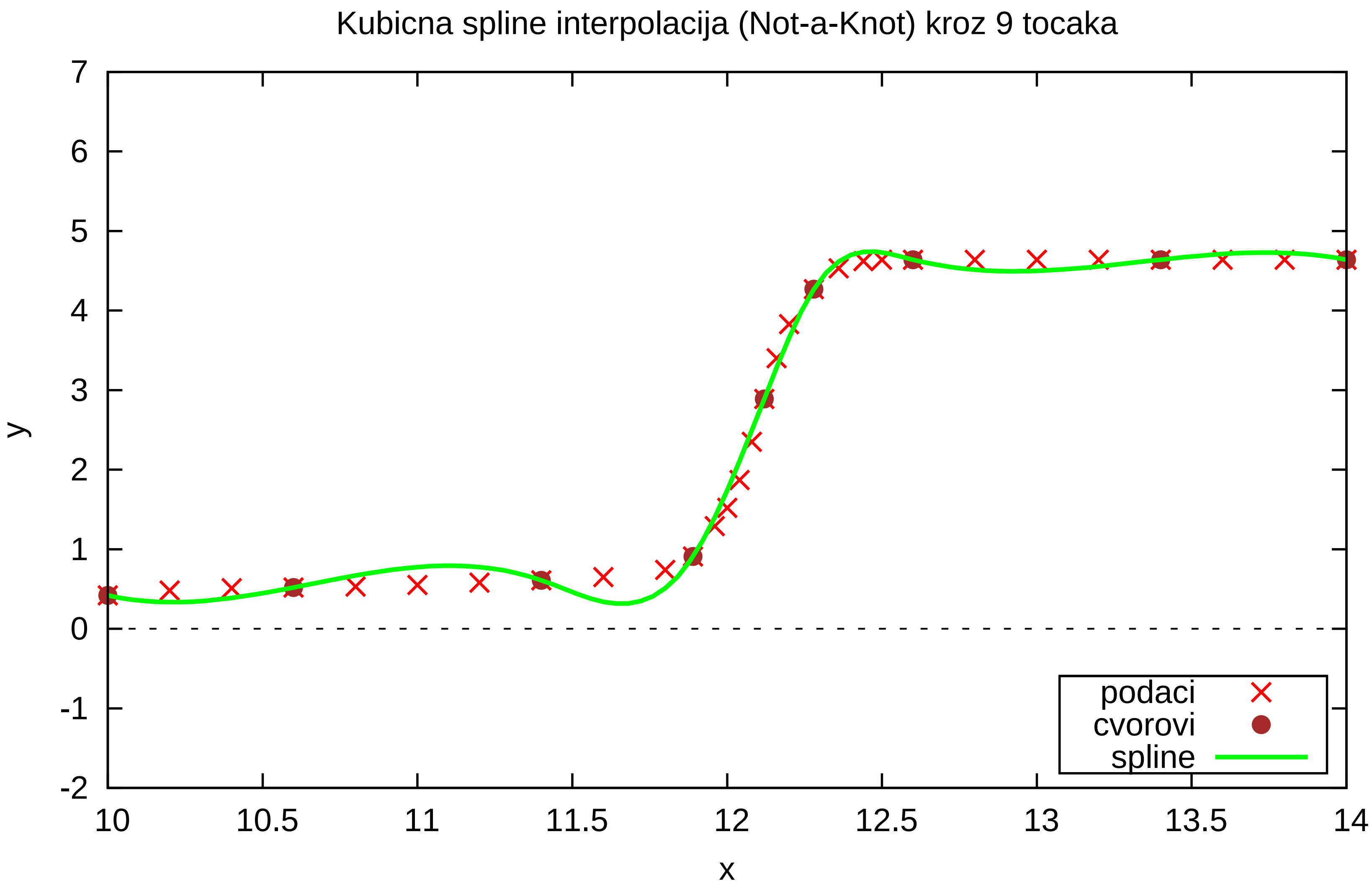
Polinom — 9 čvorova (*lošije!*)



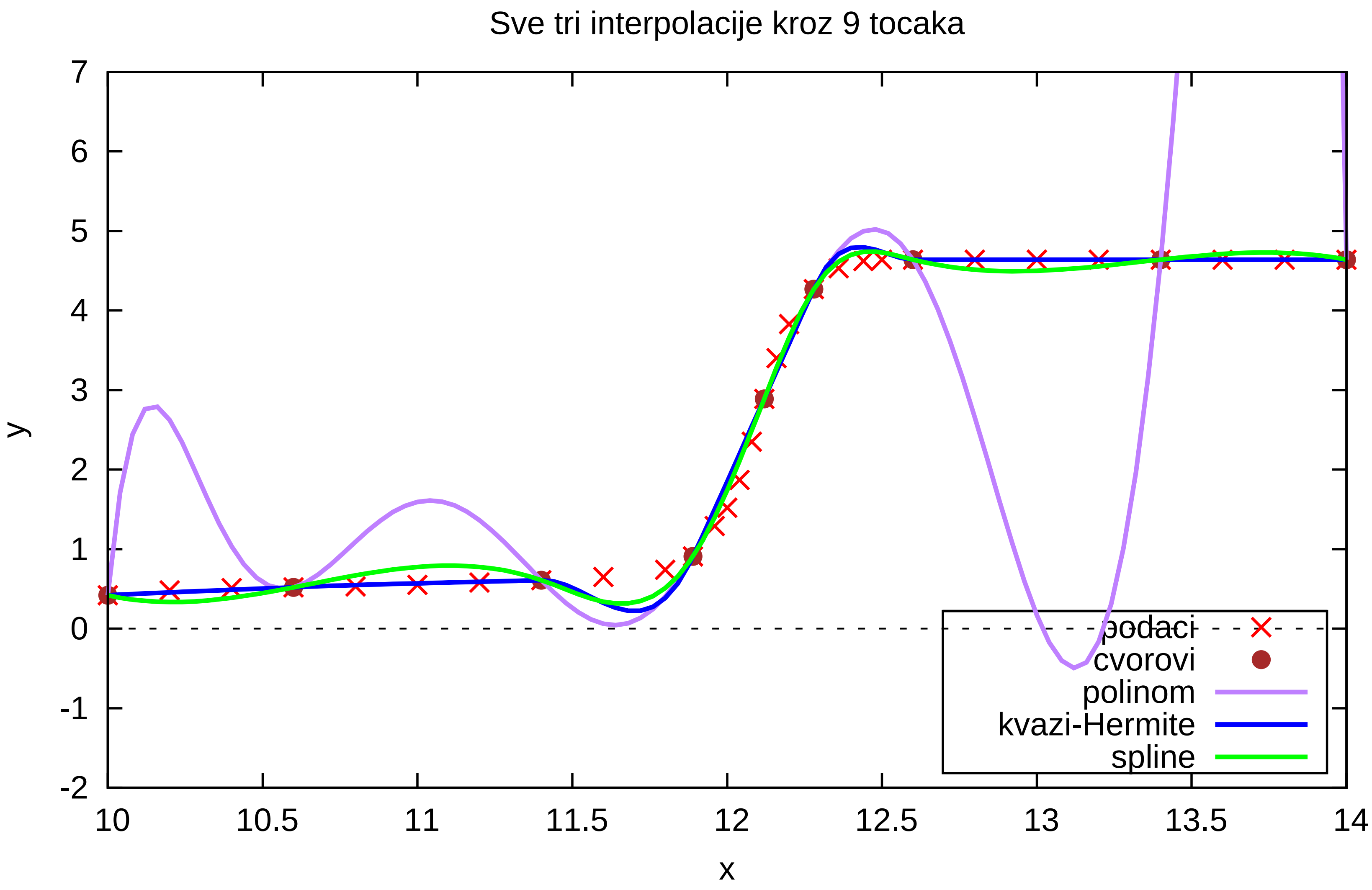
Akima — 9 čvorova



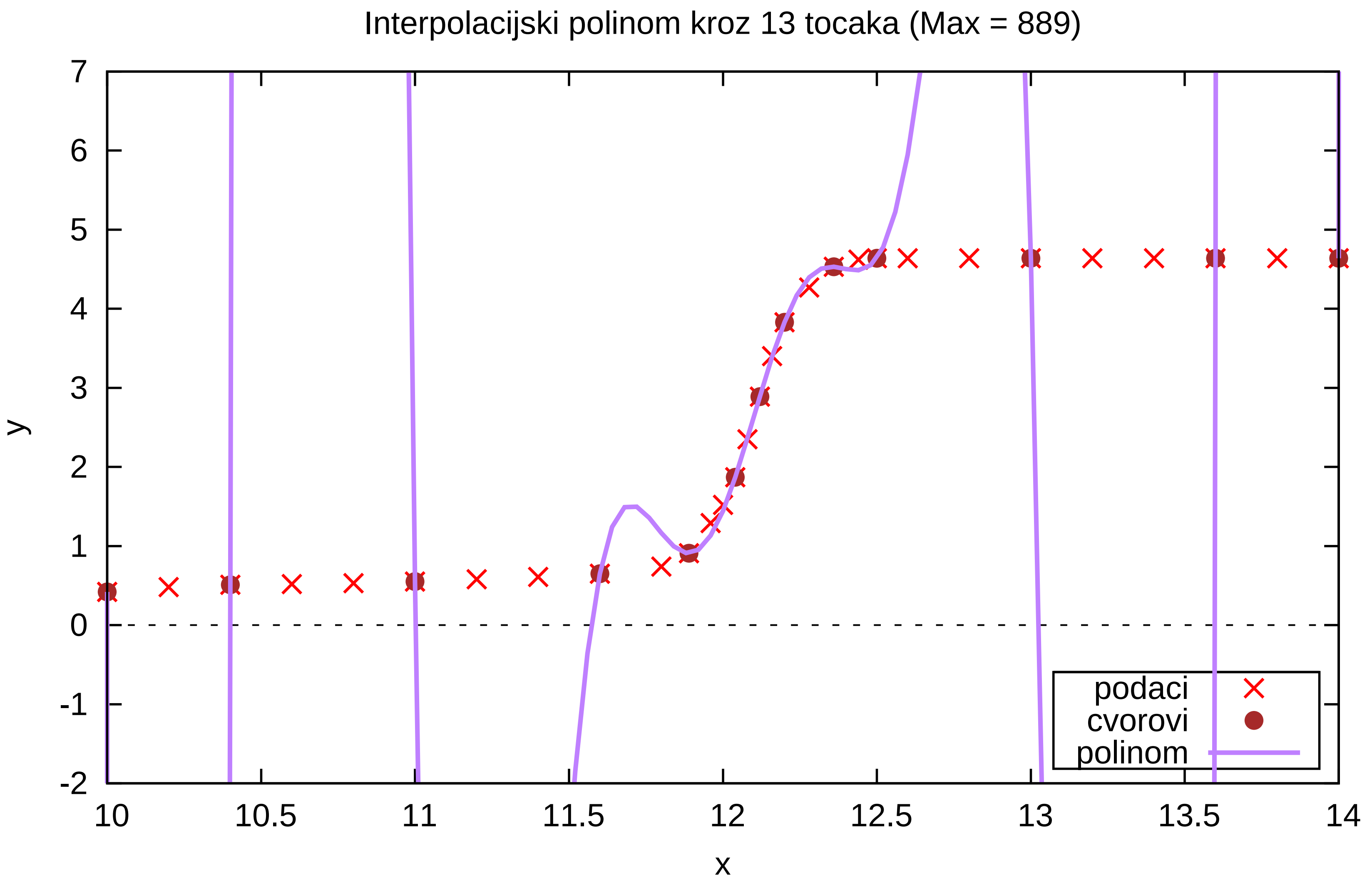
Kubični splajn — 9 čvorova



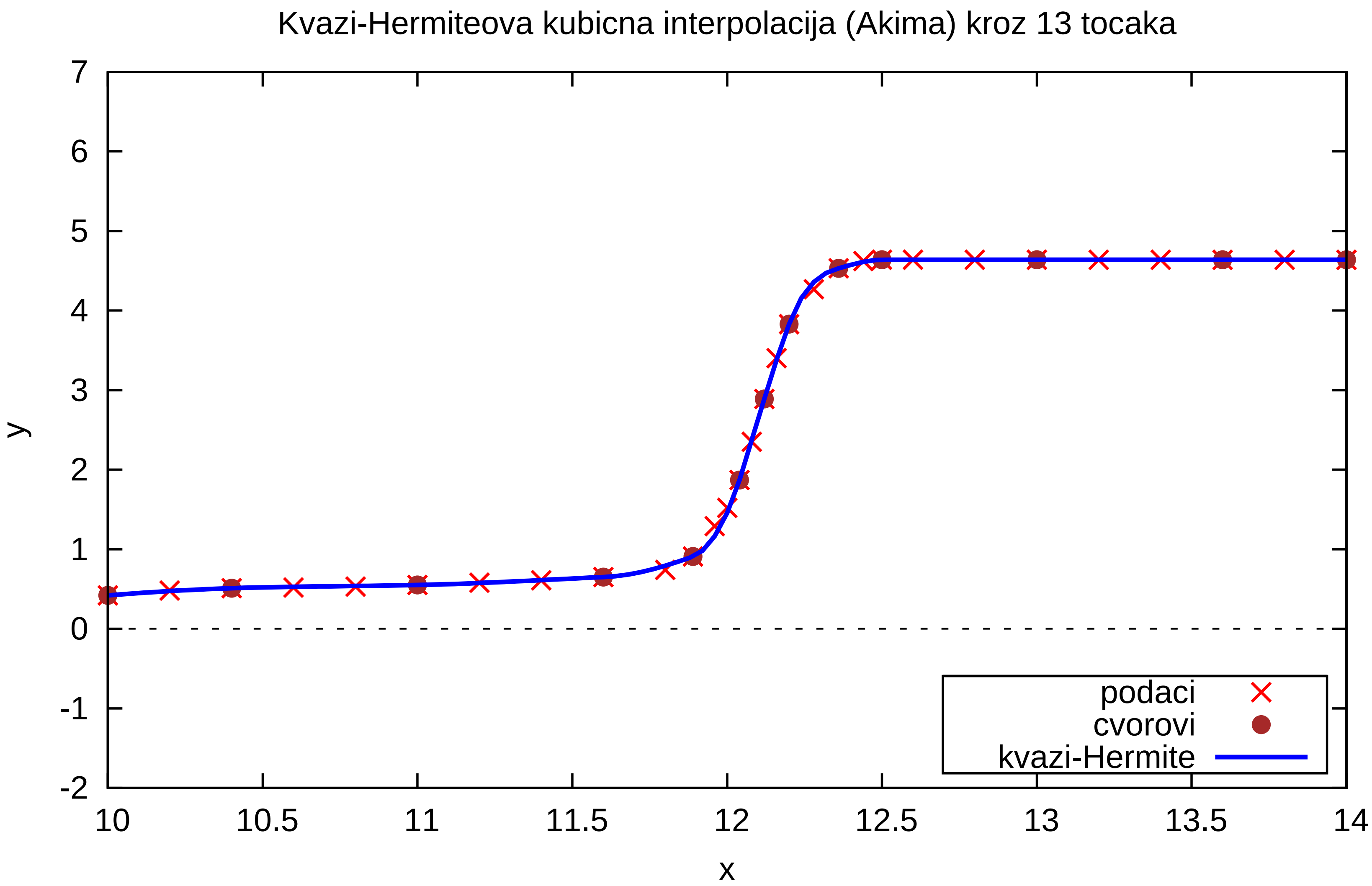
Sve tri interpolacije zajedno — 9 čvorova



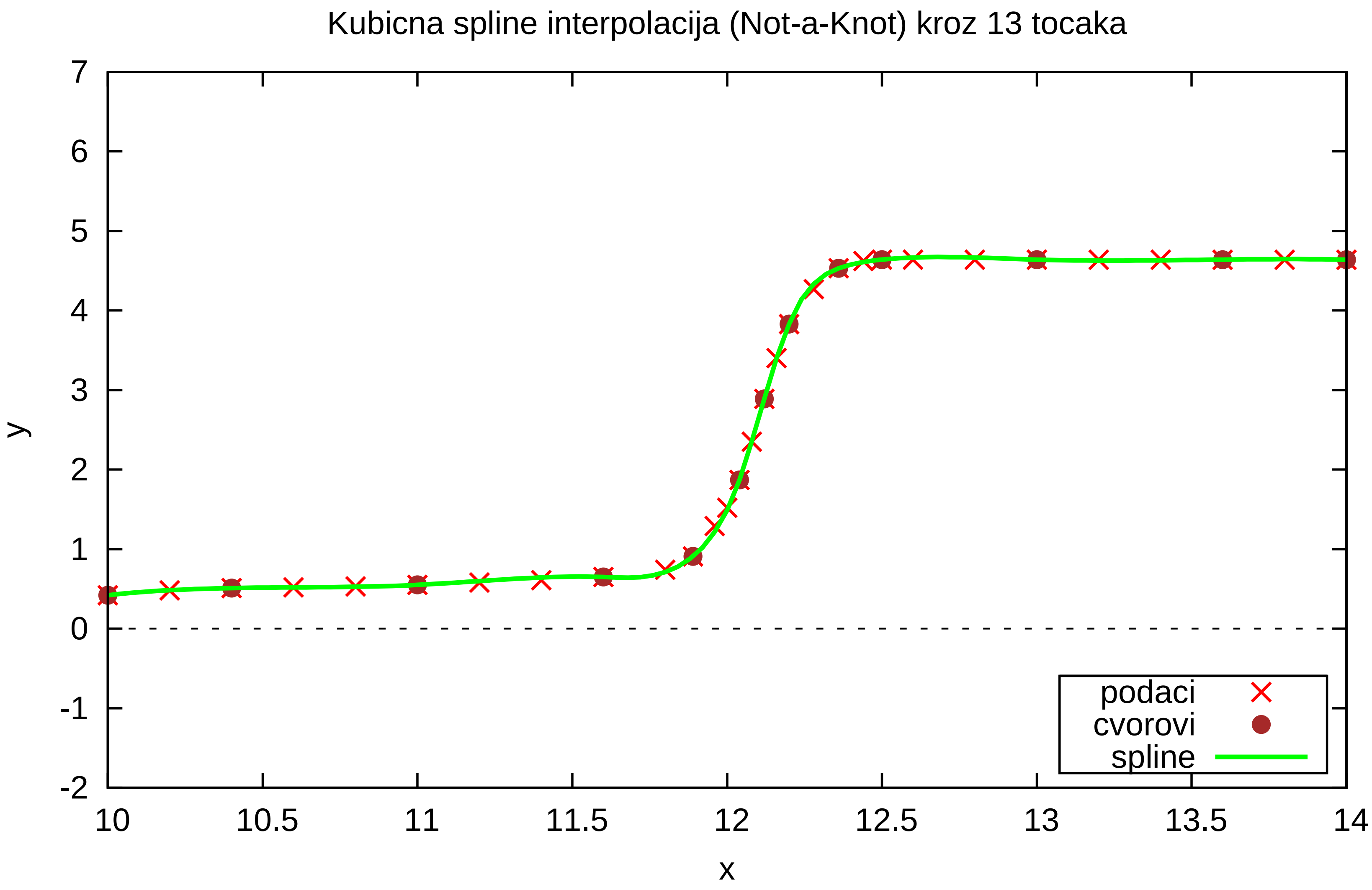
Polinom — 13 čvorova (još lošije!)



Akima — 13 čvorova



Kubični splajn — 13 čvorova



Sve tri interpolacije zajedno — 13 čvorova