Numerička matematika

4. predavanje

Saša Singer i Nela Bosner

PMF - Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

Rješavanje linearnih sustava
- Kad ne treba pivotirati u LU faktorizaciji?
- Simetrične pozitivno definitne matrice

Uvod u problem aproksimacije i interpolacije

Interpolacija polinomima
- Izbor baze za interpolaciju
- Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma
- Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Rješavanje linearnih sustava

- Kad ne treba pivotirati u LU faktorizaciji?
- Simetrične pozitivno definitne matrice

Uvod u problem aproksimacije i interpolacije

Interpolacija polinomima

- Izbor baze za interpolaciju
- Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma
- Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

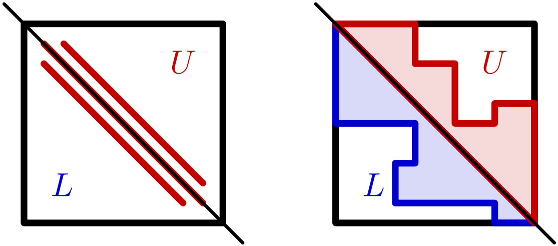
Struktura LU faktorizacije

Ako matrica A, koja ulazi u LU faktorizaciju, ima nekakvu strukturu, pitanje je kad će se ta struktura očuvati u L i U.

To je posebno bitno za tzv. "šuplje" sustave

- gdje se sva informacija o matrici A može spremiti u bitno manje od n^2 elemenata.

Ako ne pivotiramo, onda se čuvaju, recimo, sljedeće forme:



Prva su vrpčaste matrice, a druga su "rupe udesno i nadolje".

Kad ne moramo pivotirati?

Dakle, zgodno je znati kad ne treba pivotirati, a da imamo

- garantiranu stabilnost algoritma Gaussovih eliminacija, odnosno, LU faktorizacije.

Postoje razni tipovi matrica kod kojih ne moramo pivotirati. Na primjer, to su:

- strogo dijagonalno dominantne matrice po stupcima, tj. matrice kod kojih za svaki stupac vrijedi

$$|a_{jj}| > \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} |a_{ij}|, \quad j = 1, \ldots, n,$$

- dijagonalno dominantne matrice po recima ($i \leftrightarrow j$),
- simetrične pozitivno definitne matrice (v. malo kasnije).

Dijagonalno dominantna — ne treba pivotirati

Za dijagonalno dominantne matrice po stupcima, treba samo pokazati da, iza prvog koraka eliminacije, ostaju dijagonalno dominantne po stupcima. Dalje = indukcija po koracima.

Prvi korak. Element $a_{11} \neq 0$ (čak je maksimalan po apsolutnoj vrijednosti u prvom stupcu), pa sigurno možemo napraviti prvi korak eliminacije. Dobivamo matricu $A^{(2)}$ oblika

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_1^T \\ 0 & S^{(2)} \end{bmatrix},$$

pri čemu je $S^{(2)}$ regularna (dokaz korištenjem determinanti).

Za nastavak, moramo pokazati da je matrica $S^{(2)}$, također, dijagonalno dominantna po stupcima ("korak indukcije").

Dijagonalno dominantna — ne treba pivotirati

Iz formula za transformacije elemenata, za $j = 2, \ldots, n$, slijedi

$$\sum_{\substack{i=2 \\ i \neq j}}^{n} |a_{ij}^{(2)}| = \sum_{\substack{i=2 \\ i \neq j}}^{n} \left| a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} \, a_{1j} \right| \leq \sum_{\substack{i=2 \\ i \neq j}}^{n} |a_{ij}| + \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} \right| \sum_{\substack{i=2 \\ i \neq j}}^{n} |a_{i1}|$$

(dijagonalna dominantnost obje sume)

$$< (|a_{jj}| - |a_{1j}|) + \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} \right| \cdot (|a_{11}| - |a_{j1}|)$$

$$= |a_{jj}| - \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} \, a_{j1} \right| \qquad \text{(koristimo } |a| - |b| \leq |a - b|\text{)}$$

$$\leq \left| a_{jj} - \frac{a_{1j}}{a_{11}} \, a_{j1} \right| = |a_{jj}^{(2)}|.$$

Dakle, i $S^{(2)}$ je dijagonalno dominantna po stupcima.

Dijagonalno dominantne matrice — preciznije

Za kompleksnu matricu $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ kažemo da je dijagonalno dominantna po stupcima ako vrijedi

$$|a_{jj}| \geq \sum_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{n} |a_{ij}|, \quad j = 1, \ldots, n.$$

Ako vrijedi stroga nejednakost ($>$), za sve $j = 1, \ldots, n$, onda kažemo da je A strogo dijagonalno dominantna po stupcima.

Matrica A je (strogo) dijagonalno dominantna po recima, ako je A^* (strogo) dijagonalno dominantna po stupcima ($i \leftrightarrow j$).

U oba slučaja, Gaussove eliminacije i LU faktorizacija su

- savršeno stabilne i bez pivotiranja.

GE i LU za dijagonalno dominantne matrice

Teorem (Wilkinson). Neka je A kompleksna regularna kvadratna matrica reda n.

- Ako je A dijagonalno dominantna po recima ili stupcima, tada A ima LU faktorizaciju bez pivotiranja i za faktor rasta vrijedi $\rho_n \leq 2$.
- Ako je A dijagonalno dominantna po stupcima, u LU faktorizaciji bez pivotiranja vrijedi $|\ell_{ij}| \leq 1$, za sve i, j.

To znači da parcijalno pivotiranje ne radi nikakve zamjene redaka — najveći element u stupcu je već na dijagonali.

∎

Napomena. Regularnost samo osigurava da dijagonalni elementi ne smiju biti nula, jer dozvoljavamo $\geq$.

Dokaz. Sličan prethodnom (v. skripta ili Higham, ASNA3).

Simetrične pozitivno definitne matrice

Za simetrične/hermitske pozitivno definitne matrice radi se "simetrizirana" varijanta LU faktorizacije,

- jer je 2 puta brža nego obična LU faktorizacija,
- i čuva strukturu matrice A — čak i kad računamo u aritmetici računala, množenjem faktora uvijek dobivamo simetričnu/hermitsku matricu.

Ova simetrizirana faktorizacija zove se faktorizacija Choleskog.

Prisjećanje. Kompleksna matrica $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je hermitska ako vrijedi

$$A = A^*, \quad \text{ili} \quad a_{ji} = \bar{a}_{ij}, \quad i, j = 1, \ldots, n.$$

Spektar od A je realan! Ako je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, onda je hermitska matrica isto što i simetrična, tj. $* = T$ (nema konjugiranja).

Simetrične pozitivno definitne matrice

Definicija. Matrica $A \in \mathcal{F}^{n\times n}$ je pozitivno definitna ako za svaki vektor $x \in \mathcal{F}^n$, takav da je $x \neq 0$, vrijedi

$$\langle Ax, x\rangle = x^* Ax > 0.$$

Napomena. Pozitivna definitnost matrice se ne vidi odmah. Obično se unaprijed, iz prirode problema, zna da je neka matrica pozitivno definitna (očuvanje energije i slično).

Ekvivalentni uvjeti za pozitivnu definitnost:

- sve svojstvene vrijednosti od A su realne i pozitivne, tj. vrijedi

$$\lambda_k(A) > 0, \quad k = 1, \ldots, n,$$

gdje λ_k označava k-tu najveću svojstvenu vrijednost;

Simetrične pozitivno definitne matrice

Ekvivalentni uvjeti (nastavak):

- sve vodeće glavne minore od A su pozitivne, tj. vrijedi

$$\det(A_k) > 0, \quad k = 1, \ldots, n,$$

  gdje je $A_k = A(1:k, 1:k)$ vodeća glavna podmatrica od A, reda k.

Posljedica. Sve vodeće glavne podmatrice A_k su regularne, za $k = 1, \ldots, n$. Posebno, matrica A je regularna.

Digresija. Katkad se lakše vidi da neka matrica nije pozitivno definitna. Pokažite da nisu pozitivno definitne one matrice

- koje na dijagonali imaju bar jedan negativan element ili nulu.

Pozitivna definitnost i simetrija

Za kompleksne matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, može se pokazati da vrijedi

- A je pozitivno definitna $\implies$ A je hermitska ($A = A^*$).

Za realne matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ to ne mora vrijediti, tj.

- pozitivno definitna matrica ne mora biti simetrična (može biti i $A \neq A^T$).

Međutim, u numerici se vrlo često koristi "stroža" varijanta pojma — koja, po definiciji, uključuje i simetriju:

- Realna matrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pozitivno definitna ako je simetrična i za svaki $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$, vrijedi $x^T A x > 0$.

Da ne bude zabune, u nastavku, koristimo "strožu" definiciju! U tom slučaju, originalni pojam (bez simetrije) katkad se zove samo "pozitivnost" matrice A.

LU faktorizacija za sim. poz. def. matrice

Tvrdnja. Za svaku hermitsku/simetričnu pozitivno definitnu matricu A

- uvijek se može napraviti LU faktorizacija bez pivotiranja.

Osim toga, matrica U ima pozitivnu dijagonalu i regularna je.

Dokaz. Sve vodeće glavne podmatrice $A_k = A(1:k, 1:k)$ su regularne, pa prva tvrdnja slijedi iz teorema o LU faktorizaciji.

U LU faktorizaciji matrice A, za sve vodeće glavne podmatrice matrica A i U vrijedi (v. prošli puta)

$$\det(A_k) = \det(U_k) = u_{11}\, u_{22} \cdots u_{kk}, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Iz drugog ekvivalentnog uvjeta $\det(A_k) > 0$, slijedi $u_{11} > 0$ i $u_{kk} = \det(A_k) / \det(A_{k-1}) > 0$, za $k = 2, \ldots, n$.

■

Simetrizirana LU faktorizacija

Tvrdnja. LU faktorizaciju hermitske/simetrične pozitivno definitne matrice A možemo napisati u simetriziranom obliku

$$A = LDL^*,$$

gdje je

- L donja trokutasta matrica s jedinicama na dijagonali,
- a D dijagonalna matrica s pozitivnom dijagonalom.

Ta faktorizacija se obično zove LDL^* faktorizacija.

Dokaz. Ide u dva koraka. U LU faktorizaciji matrice A, faktor U se prvo rastavi na

$$U = DM^*,$$

gdje je M^* gornja trokutasta s jedinicama na dijagonali, a zatim se dokaže da je $M = L$.

Simetrizirani LU — faktorizacija Choleskog

Prvi korak. Faktorizaciju $U = DM^*$ dobijemo tako da

- dijagonalne elemente u_{ii} od U izlučimo slijeva (iz redaka) u dijagonalnu matricu D (s pozitivnom dijagonalom),
- svaki redak u U podijelimo s dijagonalnim elementom u_{ii} u tom retku — dobijemo M^* s jedinicama na dijagonali (M^* ostaje gornja trokutasta, kao i U).

Dakle, izlazi da je

$$A = LDM^*,$$

gdje su L i M donje trokutaste s jedinicama na dijagonali, a D je dijagonalna s pozitivnim dijagonalnim elementima.

Sve tri matrice su regularne.

Simetrizirani LU — faktorizacija Choleskog

Drugi korak. Zbog hermitičnosti/simetrije matrice A, vrijedi

$$LDM^* = A = A^* = (LDM^*)^* = MDL^*.$$

Množenjem slijeva s L^{-1} i zdesna s $L^{-*} = (L^{-1})^*$ dobivamo

$$DM^* L^{-*} = L^{-1} MD.$$

Na lijevoj strani imamo produkt gornjih trokutastih matrica, a na desnoj donjih, pa su ti produkti = dijagonalna matrica.

Matrice M i L imaju jedinice na dijagonali, pa usporedbom dijagonala izlazi da su obje strane baš jednake D. Koristeći regularnost od L i D, dobivamo

$$L^{-1} MD = D \implies MD = LD \implies M = L.$$

■

Faktorizacija Choleskog — standardni oblik

Teorem (Standardni oblik faktorizacije Choleskog). Za svaku hermitsku/simetričnu pozitivno definitnu matricu A postoji faktorizacija

$$A = R^* R,$$

gdje je R gornja trokutasta matrica. Ako fiksiramo da R ima (na pr.) pozitivnu dijagonalu, ova faktorizacija je jedinstvena.

Dokaz. Matrica A ima jedinstvenu LDL^* faktorizaciju (jedinstvenost slijedi iz jedinstvenosti LU faktorizacije).

Nadalje, D ima pozitivnu dijagonalu, pa se može rastaviti kao

$$D = \Delta \cdot \Delta = \Delta \cdot \Delta^*,$$

gdje je Δ dijagonalna i $\Delta_{ii} = \sqrt{D_{ii}} = \sqrt{u_{ii}} > 0$ ($+$ predznak).

Faktorizacija Choleskog — standardni oblik

Tada LDL^* faktorizaciju od A možemo napisati u obliku

$$A = LDL^* = (L\Delta)(\Delta L^*) = (L\Delta)(\Delta^* L^*) = (L\Delta)(L\Delta)^*.$$

Uz oznaku $R := (L\Delta)^*$ dobivamo faktorizaciju Choleskog

$$A = R^* R.$$

∎

Napomena. Mnogi slovom L označavaju matricu $L := L\Delta$, pa se u literaturi faktorizacija Choleskog može naći napisana kao

$$A = LL^*.$$

Oprez: Ovaj “novi” L više nema jedinice na dijagonali!

Kad znamo da postoji, faktorizacija Choleskog se može i direktno izvesti (slično kao LU), znajući da je $A = R^* R$.

Algoritam

Ograničimo se na realni slučaj. Iz $A = R^T R$, za gornji trokut od A, slijedi

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} r_{ki}\, r_{kj}, \quad i \le j,$$

pa dobivamo sljedeću rekurziju za elemente:

$$\begin{aligned}
&\text{za } j = 1, \ldots, n: \\
&\qquad r_{ij} = \frac{1}{r_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}\, r_{kj} \right), \quad i = 1, \ldots, j-1, \\
&\qquad r_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} r_{kj}^2 \right)^{1/2}.
\end{aligned}$$

U prvom koraku, za $j = 1$, računamo samo $r_{11} = \sqrt{a_{11}}$.

Algoritam

Zbog grešaka zaokruživanja, pod korijenom možemo dobiti

- negativan izraz ili nulu $\Longrightarrow$ nužna provjera!

Faktorizacija Choleskog

```
za j = 1 do n radi {
  /* Nađi j-ti stupac od R */
  /* Supstitucija unaprijed iznad dijagonale */
  za i = 1 do j - 1 radi {
    sum = A[i, j];
    za k = 1 do i - 1 radi {
      sum = sum - R[k, i] * R[k, j];
    }
    R[i, j] = sum / R[i, i];
  }
```

Algoritam

```
  /* Dijagonalni element */
  sum = A[j, j];
  za k = 1 do j - 1 radi {
    sum = sum - R[k, j]**2; /* ** <=> pow */
  }
  /* Provjera prije korijena */
  ako je sum > 0.0 onda {
    R[j, j] = sqrt(sum);
  }
  inače
    /* Matrica nije pozitivno definitna,
    STOP */
}
```

Napomena. Za simetričnu matricu A, test `sum > 0.0` ekvivalentan je provjeri pozitivne definitnosti od A.

Komentar na algoritam, složenost

Ovo je tzv. *jik* varijanta algoritma, a naziv dolazi od poretka petlji (izvana, prema unutra), uz prirodno imenovanje indeksa.

- Ovdje se matrica R generira stupac po stupac (Fortran),
- dok se, u LU faktorizaciji, matrica U generirala redak po redak (ijk varijanta), a L stupac po stupac, a
- GE su ekvivalentne kij varijanti.

Zato to nije jedina varijanta za realizaciju algoritma (v. iza).

Za složenost algoritma = broj aritmetičkih operacija, izlazi

$$OP(n) \sim \frac{1}{3}\, n^3,$$

što je, približno, polovina složenosti LU faktorizacije. Razlog:

- računamo samo jednu trokutastu matricu, a ne dvije.

Algoritam — *ijk* varijanta (račun "na ruke", C)

Zamjenom indeksa i, j dobivamo tzv. *ijk* varijantu algoritma:

za $i = 1, \ldots, n$:

$$r_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}^2 \right)^{1/2},$$

$$r_{ij} = \frac{1}{r_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}\, r_{kj} \right), \quad j = i+1, \ldots, n.$$

Tu se R računa redak po redak, a za $i = n$ računamo samo r_{nn}.

Kad imamo faktorizaciju Choleskog $A = R^T R$, onda se rješenje sustava $Ax = b$ svodi na rješavanje dva trokutasta sustava

$$R^T y = b, \quad Rx = y.$$

Rješenje linearnog sustava

Ove sustave lako rješavamo:

- sustav $R^T y = b$ — supstitucijom unaprijed

$$y_1 = \frac{b_1}{r_{11}},$$

$$y_i = \frac{1}{r_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} r_{ji}\, y_j \right), \quad i = 2, \ldots, n,$$

- sustav $Rx = y$ — supstitucijom unatrag

$$x_n = \frac{y_n}{r_{nn}},$$

$$x_i = \frac{1}{r_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} r_{ij}\, x_j \right), \quad i = n-1, \ldots, 1.$$

Alternativa za rješenje linearnog sustava

Za razliku od LU faktorizacije, ovdje

- u obje supstitucije imamo dijeljenja (istim brojevima).

U praksi se često koristi LDL^T oblik faktorizacije Choleskog.

Prednosti te varijante su višestruke:

- U algoritmu LDL^T faktorizacije nema drugih korijena.
- Rješavaju se tri jednostavna linearna sustava
$$Lz = b, \quad Dy = z, \quad L^T x = y.$$
- Srednji sustav $Dy = z$ treba samo n dijeljenja.
- U preostala dva sustava, L ima jediničnu dijagonalu (nema dijeljenja), pa ukupno štedimo n dijeljenja.

Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

I kod faktorizacije Choleskog možemo koristiti pivotiranje. Međutim, da bismo očuvali simetriju radne matrice,

- pivotiranje mora biti "simetrično", tj.
- radimo istovremene zamjene redaka i stupaca u A

  $$A \mapsto P^T A P,$$

  gdje je P matrica permutacije,
- $\Rightarrow$ dijagonalni element zamjenjuje mjesto s dijagonalnim.

Matrica $P^T A P$ je opet hermitska/simetrična i, što je ključno,

- ostaje pozitivno definitna (dokažite to)!

Posljedica. Sve glavne podmatrice od A (a ne samo vodeće) imaju pozitivnu determinantu.

Dijagonalno pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

Standardno se koristi tzv. dijagonalno pivotiranje:

- u k-tom koraku faktorizacije, izbor pivotnog elementa je

$$a_{rr}^{(k)} = \max_{k \le i \le n} a_{ii}^{(k)}.$$

To odgovara potpunom pivotiranju u LU faktorizaciji ili GE. Naime, najveći elementi u $A^{(k)}$ kod kij ili kji varijanti (kao kod GE) su sigurno na dijagonali.

Dokaz. U $A = A^{(1)}$, gledamo bilo koju glavnu podmatricu A_2, reda 2,

$$A_2 = \begin{bmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ \bar{a}_{ij} & a_{jj} \end{bmatrix}.$$

Iz $\det(A_2) > 0$ slijedi $a_{ii} a_{jj} > |a_{ij}|^2$, pa je bar jedan od dijagonalnih elemenata veći od $|a_{ij}|$. Isto vrijedi za sve $A^{(k)}$. ∎

Dijagonalno pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

Ovim postupkom dobivamo faktorizaciju Choleskog

$$P^T A P = R^T R,$$

u kojoj, u slučaju *kij* i *kji* varijante algorima, za elemente matrice R vrijedi

$$r_{kk}^2 \geq \sum_{i=k}^{j} r_{ij}^2, \quad j = k+1, \ldots, n, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Desna strana = elementi j-tog stupca, od k-tog do dijagonale. Posebno, to znači da R ima nerastuću dijagonalu

$$r_{11} \geq \cdots \geq r_{nn} > 0.$$

Isto je u QR faktorizaciji s pivotiranjem stupaca (v. kasnije).

Nažalost, kod Hilbertove matrice, ni to ne pomaže! Probajte!

Može li LDL^T za bilo koje simetrične matrice?

Pitanje. Može li se LDL^T faktorizacija napraviti za bilo koju simetričnu matricu $A = A^T$ — općenito, indefinitnu,

- uz dozvolu da matrica D ima i negativne elemente?

To ne vrijedi! Kontraprimjer je tzv. elementarna indefinitna matrica

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Pomaže li simetrična permutacija redaka i stupaca? Opet, ne!

Pravo poopćenje na indefinitne matrice dobivamo tako da

- dozvolimo dijagonalne blokove reda 2 u matrici D.

Faktorizacija: Bunch–Parlett ili Bunch–Kaufman–Parlett (razlike su u pivotiranju). Slično ide za $A = -A^T$ (Bunch).

Rješavanje linearnih sustava
- Kad ne treba pivotirati u LU faktorizaciji?
- Simetrične pozitivno definitne matrice

Uvod u problem aproksimacije i interpolacije

Interpolacija polinomima
- Izbor baze za interpolaciju
- Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma
- Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Općenito o problemu aproksimacije

Što je problem aproksimacije?

Poznate su neke informacije o funkciji f, definiranoj na nekom podskupu $X \subseteq \mathbb{R}$.

Na osnovu tih informacija, želimo funkciju f

- zamijeniti nekom drugom funkcijom φ na istom skupu X, ili na još većem skupu,
- tako da su funkcije f i φ bliske u nekom smislu.

Skup X je najčešće:

- interval oblika $[a, b]$ (koji može biti i neograničen), ili
- diskretni skup točaka.

Pitanje: Zašto uopće želimo zamjenu $f \mapsto \varphi$?

Oblici problema aproksimacije

Problem aproksimacije javlja se u dva bitno različita oblika.

Prvi oblik: Znamo funkciju f (analitički ili slično),

- ali je njezina forma prekomplicirana za računanje.

U tom slučaju,

- izaberemo neke informacije o f i
- po nekom kriteriju odredimo aproksimacijsku funkciju φ.

Prednosti ovog oblika problema aproksimacije:

- Možemo birati informacije o f koje ćemo koristiti.
- Jednako tako, možemo ocijeniti grešku dobivene aproksimacije φ, obzirom na prave vrijednosti funkcije f.

Oblici problema aproksimacije (nastavak)

Drugi oblik: Ne znamo funkciju f,

- već samo neke informacije o njoj,
- na primjer, vrijednosti na nekom (diskretnom) skupu točaka.

Zamjenska funkcija φ određuje se iz raspoloživih informacija.

- Osim samih podataka (poznate vrijednosti),
- ove informacije mogu uključivati i očekivani oblik ponašanja tih podataka, tj. oblik funkcije φ.

Mane ovog oblika problema aproksimacije:

- Ne može se napraviti ocjena pogreške,
- bez dodatnih informacija o nepoznatoj funkciji f.

Prvi oblik problema — primjene

Prvi oblik se obično koristi u teoriji

- za razvoj numeričkih metoda na bazi aproksimacije.

Na primjer, za numeričko

- integriranje funkcija (integriramo aproksimaciju),
- rješavanje diferencijalnih jednadžbi.

Praktični primjer:

- programska biblioteka za računanje raznih elementarnih funkcija (exp, sin, cos, sqrt, ...), poput `<math.h>`.

Traži se maksimalna brzina i puna točnost, na razini osnovne greške zaokruživanja u.

Realizacija standardno ide racionalnim aproksimacijama.

Drugi oblik problema — primjene

Drugi oblik problema se vrlo često javlja u praksi.

Na primjer,

- kod mjerenja nekih veličina (rezultat je "tablica"),
- osim izmjerenih podataka, pokušavamo aproksimirati i podatke koji se nalaze "između" izmjerenih točaka.

To je ključna svrha ovakve aproksimacije!

Napomena. Kod mjerenja se javljaju i greške mjerenja.

- Zato postoje posebne tehnike — vrste aproksimacija, za "ublažavanje" tako nastalih grešaka.

Na primjer, metoda najmanjih kvadrata ima opravdanje u matematičkoj statistici.

Izbor aproksimacijske funkcije φ

Aproksimacijska funkcija φ bira se

- prema prirodi modela — izbor dolazi iz problema,
- ali tako da bude relativno jednostavna za računanje.

Obično se prvo fiksira (izabere) neki skup funkcija $\mathcal{F}$.

- Onda se traži "najbolja" aproksimacija φ iz tog skupa $\mathcal{F}$.

Skup $\mathcal{F}$ može biti vektorski prostor, ali ne mora.

Za praktično računanje, funkcija φ obično ovisi

- o nekom konačnom broju parametara a_k, $k = 0, \ldots, m$,
- koje treba odrediti po nekom kriteriju aproksimacije.

Ideja: Sve moguće vrijednosti ovih $m + 1$ parametara određuju skup svih "dozvoljenih" funkcija $\mathcal{F}$.

Parametrizacija aproksimacijske funkcije φ

Kad funkciju φ zapišemo u obliku

$$\varphi(x) = \varphi(x; a_0, a_1, \ldots, a_m),$$

kao funkciju koja ovisi i o parametrima a_k, onda kažemo

- da smo izabrali opći oblik aproksimacijske funkcije φ (u odnosu na skup $\mathcal{F}$ — na primjer, izborom baze u $\mathcal{F}$).

Prema obliku ovisnosti o parametrima, aproksimacijske funkcije možemo grubo podijeliti na:

- linearne aproksimacijske funkcije,
- nelinearne aproksimacijske funkcije.

Koje su bitne razlike između ove dvije grupe?

Linearne aproksimacijske funkcije

Opći oblik linearne aproksimacijske funkcije je

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x),$$

gdje su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ poznate funkcije koje znamo računati.

Linearnost u ovisnosti o parametrima znači:

- traženi parametri su koeficijenti u linearnoj kombinaciji poznatih funkcija.

Velika prednost: Određivanje parametara a_k obično vodi na "linearne" probleme (koji su lakše rješivi od nelinearnih):

- sustave linearnih jednadžbi, ili
- linearne probleme optimizacije.

Linearne aproksimacijske funkcije (nastavak)

Standardni model za linearni oblik aproksimacije:

- skup “dozvoljenih” funkcija $\mathcal{F}$ je vektorski prostor, a
- funkcije $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ su neka baza u tom prostoru.

Unaprijed se bira (fiksira):

- vektorski prostor $\mathcal{F}$, odgovarajuće dimenzije $m + 1$,
- baza $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ u $\mathcal{F}$.

Napomena. Kod približnog numeričkog računanja,

- “dobar” izbor baze je ključan za stabilnost postupka
- i za točnost izračunatih vrijednosti parametara $a_0, \ldots, a_m$ aproksimacijske funkcije φ.

Primjer 1 — polinomi

Nekoliko primjera najčešće korištenih vektorskih prostora $\mathcal{F}$.

Polinomi. Uzimamo $\mathcal{F} = \mathcal{P}_m$, gdje je $\mathcal{P}_m$ vektorski prostor polinoma stupnja $\leq m$ (dimenzija tog prostora je $m + 1$).

Standardni izbor baze je $\varphi_k(x) = x^k$, za $k = 0, \ldots, m$, tj.

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m.$$

Nije nužno da φ zapišemo u bazi potencija $\{\, 1,\ x,\ \ldots,\ x^m \,\}$. Upravo suprotno, vrlo često je neka druga baza bitno bolja.

- Na primjer, $\{\ 1,\ (x - x_0),\ (x - x_0)\,(x - x_1),\ \ldots\ \}$, gdje su $x_0,\ x_1,\ \ldots$ zadane točke (v. kod interpolacije).
- Ortogonalni polinomi, obzirom na pogodno izabrani skalarni produkt (v. kod najmanjih kvadrata).

Primjer 2 — trigonometrijski polinomi

Trigonometrijski "polinomi". Za funkcije φ_k uzima se prvih $m+1$ funkcija iz skupa

$$\{\, 1,\ \cos x,\ \sin x,\ \cos 2x,\ \sin 2x,\ \ldots \,\}.$$

Koriste se za aproksimaciju periodičkih funkcija na intervalu perioda — ovdje je period $P = 2\pi$, a interval je, na pr., $[0, 2\pi]$.

- Primjena je, recimo, u obradi i modeliranju signala.

Varijacije u izboru baze:

- Koristi se dodatni faktor u argumentu sinusa i kosinusa ($x \mapsto \lambda x$) — koji služi za kontrolu perioda ($P \mapsto P/\lambda$).
- Ponekad se biraju samo parne ili samo neparne funkcije iz ovog skupa.

Primjer 3 — polinomni splajnovi

Polinomni splajnovi. To su funkcije koje su "po dijelovima" polinomi. Ako su zadane točke $x_0 < \cdots < x_n$, onda se splajn funkcija φ, na svakom podintervalu između susjednih točaka,

- svodi na polinom određenog fiksnog (niskog) stupnja, tj.

$$\varphi\,\Big|_{[x_{k-1},x_k]} = p_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n,$$

a p_k su polinomi — najčešće, stupnjeva 1, 2, 3 ili 5.

U točkama x_i obično se zahtijeva da funkcija φ zadovoljava još

- i "uvjete lijepljenja" vrijednosti funkcije i nekih njezinih derivacija, ili nekih aproksimacija za te derivacije.

Splajnovi se često koriste u praksi, zbog dobrih ocjena greške aproksimacije i kontrole oblika aproksimacijske funkcije.

Nelinearne aproksimacijske funkcije

Nelinearne aproksimacijske funkcije φ

$$\varphi(x) = \varphi(x; a_0, a_1, \ldots, a_m),$$

imaju nelinearnu ovisnost o parametrima $a_0, \ldots, a_m$. Dovoljna je nelinearnost u nekom/jednom od njih.

Pripadni skup “dozvoljenih” funkcija $\mathcal{F}$ najčešće

- nije vektorski prostor.

Određivanje parametara a_k, općenito, vodi na “nelinearne” probleme:

- sustave nelinearnih jednadžbi, ili
- nelinearne probleme optimizacije.

Primjer 4 — “opće” eksponencijalne funkcije

Par primjera oblika nelinearnih aproksimacijskih funkcija, koji se često koriste u praksi.

Opće eksponencijalne funkcije. To su linearne kombinacije običnih eksponencijalnih funkcija s različitim parametrima u eksponentu

$$\varphi(x) = c_0 e^{b_0 x} + c_1 e^{b_1 x} + \cdots + c_r e^{b_r x}.$$

Nelinearno ovise o parametrima $b_0, \ldots, b_r$. Broj nezavisnih parametara (tzv. “stupnjeva slobode”) je $m + 1 = 2r + 2$.

Ovakve “opće” eksponencijalne funkcije opisuju

- procese rasta i odumiranja u raznim populacijama,
- s primjenom u biologiji, ekonomiji i medicini.

Primjer 5 — racionalne funkcije

Racionalne funkcije. Imaju opći oblik

$$\varphi(x) = \frac{b_0 + b_1 x + \cdots + b_r x^r}{c_0 + c_1 x + \cdots + c_s x^s}.$$

Broj nezavisnih parametara $(m + 1)$ je samo $r + s + 1$, a ne $r + s + 2$, kako formalno piše.

Objašnjenje. Razlomci se mogu proširivati:

- Ako su b_i, c_i parametri, onda su to i tb_i, tc_i, za $t \neq 0$.
- Uvijek možemo fiksirati jedan od koeficijenata b_i ili c_i, a koji je to — obično slijedi iz prirode modela.

Racionalne funkcije imaju mnogo bolja svojstva aproksimacije od polinoma stupnja m, a pripadna teorija je relativno nova.

Kriteriji aproksimacije — interpolacija

Interpolacija je zahtjev da se funkcije f i φ podudaraju na nekom konačnom skupu točaka.

- Te točke nazivamo čvorovima interpolacije.
- Zahtjevu se može, ali ne mora, dodati zahtjev da se u čvorovima, osim funkcijskih vrijednosti, poklapaju i vrijednosti nekih derivacija.

U najjednostavnijem obliku interpolacije, kad se podudaraju samo funkcijske vrijednosti,

- od podataka o funkciji f, koristi se samo informacija o njezinoj vrijednosti na skupu od $n+1$ točaka,
- tj. podaci su (x_k, f_k), gdje je $f_k := f(x_k)$, za $k = 0, \ldots, n$.

Kriteriji aproksimacije — interpolacija

Kod interpolacije zadanih vrijednosti,

- broj parametara interpolacijske funkcije mora biti jednak broju zadanih podataka, tj. mora biti $m = n$.

Prijevod: “broj stupnjeva slobode” = “broj uvjeta”.

- Parametri $a_0, \ldots, a_n$ određuju se iz uvjeta interpolacije
$$\varphi(x_k; a_0, a_1, \ldots, a_n) = f_k, \quad k = 0, \ldots, n,$$
što je, općenito, nelinearni sustav jednadžbi.
- Linearnost funkcije φ povlači da parametre a_k dobivamo iz sustava linearnih jednadžbi,
  - koji ima točno $n + 1$ jednadžbi za $n + 1$ nepoznanica.

  Matrica tog sustava je kvadratna.

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

Minimizacija pogreške je drugi kriterij određivanja parametara aproksimacije. Funkcija φ bira se tako da se minimizira neka odabrana norma $\|\ \|$ funkcije pogreške

$$e(x) := f(x) - \varphi(x),$$

u nekom odabranom prostoru funkcija $\mathcal{F}$ za φ, na nekoj odabranoj domeni X.

Ove aproksimacije često se zovu i najbolje aproksimacije po normi. Dijele se na

- diskretne — ako se $\|e\|$ minimizira na diskretnom skupu podataka X (to znači da je X konačan ili prebrojiv);
- kontinuirane — ako se $\|e\|$ minimizira na kontinuiranom skupu podataka X (obično je X interval oblika $[a, b]$).

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

Standardno se kao norme pogreške koriste

- 2-norma i
- ∞-norma.

Ponekad se koristi i 1-norma.

Za 2-normu,

- pripadna aproksimacija zove se srednjekvadratna,
- a metoda za njezino nalaženje zove se metoda najmanjih kvadrata.

Funkcija φ, odnosno, njezini parametri, traže se tako da bude

$$\|e(x)\|_2 \to \min, \quad \text{za } \varphi \in \mathcal{F}.$$

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

- U diskretnom slučaju, za $X = \{x_0, \ldots, x_n\}$, dobivamo

$$\sqrt{\sum_{k=0}^{n} (f(x_k) - \varphi(x_k))^2} \to \min .$$

- U kontinuiranom slučaju, za $X = [a, b]$, dobivamo

$$\sqrt{\int_a^b (f(x) - \varphi(x))^2 \, dx} \to \min .$$

Preciznije, minimizira se samo ono pod korijenom, pa odatle naziv “najmanji kvadrati”.

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

U slučaju ∞-norme, pripadna aproksimacija zove se minimaks aproksimacija, a parametri se biraju tako da je

$$\|e(x)\|_\infty \to \min, \quad \text{za } \varphi \in \mathcal{F}.$$

- U diskretnom slučaju, za $X = \{x_0, \ldots, x_n\}$, traži se

$$\max_{k=0,\ldots,n} |f(x_k) - \varphi(x_k)| \to \min\,.$$

- U kontinuiranom slučaju, za $X = [a, b]$, traži se

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - \varphi(x)| \to \min\,.$$

Naziv “minimaks” dolazi od minimizacije maksimuma.

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

Minimaks tip aproksimacija je poželjniji od srednjekvadratnih,

- jer se traži da maksimalna greška bude minimalna,
- ali ih je, općenito, mnogo teže izračunati (na primjer, dobivamo problem minimizacije nederivabilne funkcije!).

Za znatiželjne: U praksi — norme, pored funkcije, mogu uključivati i neke njezine derivacije. Primjer takve norme je

$$\|f\| = \sqrt{\int_a^b \left[\, (f(x))^2 + (f'(x))^2 \,\right] dx},$$

na prostoru $C^1[a, b]$ — svih funkcija koje imaju neprekidnu prvu derivaciju na $[a, b]$.

Ključni problemi kod aproksimacije

Matematički problemi koje treba riješiti:

- Egzistencija i jedinstvenost rješenja problema aproksimacije, što ovisi o tome
  - koje funkcije f aproksimiramo kojim funkcijama φ (dva prostora)
  - i kako mjerimo grešku e (norma).
- Analiza kvalitete dobivene aproksimacije — vrijednost "najmanje" pogreške $\|e\|$ i ponašanje funkcije greške e na cijeloj domeni X.
  (Norma greške $\|e\|$ je samo jedan broj, a ne funkcija.)
- Konstrukcija algoritama za računanje najbolje aproksimacije.

Veza aproksimacije i interpolacije — diskretno

U diskretnom linearnom slučaju,

- problem interpolacije na konačnom skupu točaka X (točke iz X su čvorovi interpolacije),

možemo smatrati specijalnim, ali posebno važnim slučajem

- najbolje aproksimacije po normi na skupu X,
- uz neku standardnu normu na konačnodimenzionalnim vektorskim prostorima (ovisi o tome odakle biramo φ).

Posebnost: Uz minimizaciju norme pogreške $\|e\| \to \min$, dodatno tražimo da je

- minimum norme pogreške jednak nuli, tj. $\min \|e\| = 0$.

To je onda ekvivalentno odgovarajućim uvjetima interpolacije.

Veza aproksimacije i interpolacije — primjer

Primjer. Neka je $X = \{x_0, \ldots, x_n\}$ i tražimo aproksimacijsku funkciju φ u vektorskom prostoru

- $\mathcal{P}_n$ — svih polinoma stupnja najviše baš n (tj. $m = n$).

Kao kriterij aproksimacije uzmimo neku p-normu ($1 \leq p \leq \infty$)

- vektora e grešaka funkcijskih vrijednosti na skupu X.

Za $1 \leq p < \infty$, zahtjev je

$$\|e\|_p = \|f - \varphi\|_p = \left(\sum_{k=0}^{n} |f(x_k) - \varphi(x_k)|^p \right)^{1/p} \to \min .$$

Za $p = \infty$, tražimo

$$\|e\|_\infty = \|f - \varphi\|_\infty = \max_{k=0,\ldots,n} |f(x_k) - \varphi(x_k)| \to \min .$$

Veza aproksimacije i interpolacije — primjer

Očito je $\|e\|_p = 0$ ekvivalentno uvjetima interpolacije

$$f(x_k) = \varphi(x_k), \quad k = 0, \ldots, n.$$

Međutim, nije jasno može li se to postići, tj.

- postoji li takva aproksimacijska funkcija $\varphi \in \mathcal{P}_n$,
- za koju je minimum norme greške jednak nuli,

tako da je φ i interpolacijska funkcija.

U nastavku, pokazat ćemo da je odgovor potvrdan za ovaj primjer. Razlog: Prostor $\mathcal{P}_n$, u kojem tražimo aproksimaciju,

- ima dovoljno veliku dimenziju za egzistenciju ($m \geq n$), a
- $m = n$ garantira jedinstvenost interpolacijske funkcije φ.

Interpolacija polinomima

Neka je funkcija f zadana na

- diskretnom skupu međusobno različitih točaka (čvorova) x_k, za $k = 0, \ldots, n$, tj. vrijedi $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$.
- Poznate funkcijske vrijednosti u tim točkama skraćeno označavamo s $f_k := f(x_k)$.

Komentar. Kad bismo dozvolili da je $x_i = x_j$, za neke $i \neq j$,

- ili f nije funkcija (ako je $f_i \neq f_j$),
- ili imamo redundantan podatak (ako je $f_i = f_j$).

Ako je $[a, b]$ segment, u praksi su točke obično numerirane tako da je

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b,$$

ali to ovdje nije bitno.

Egzistencija i jedinstvenost

Pitanja:

- Uz koje uvjete postoji interpolacijski polinom?
- Je li on jedinstven?

Odgovor daje sljedeći teorem.

Teorem. Neka je $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Za zadane podatke (x_k, f_k), $k = 0, \ldots, n$, gdje je $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$, postoji jedinstveni interpolacijski polinom $\varphi \in \mathcal{P}_n$, stupnja najviše n,

$$\varphi(x) := p_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

za kojeg vrijedi

$$p_n(x_k) = f_k, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Uočiti: čvorovi moraju biti različiti, a f_k mogu biti bilo kakvi!

Egzistencija i jedinstvenost (nastavak)

Dokaz. Neka je $p_n \in \mathcal{P}_n$ polinom stupnja najviše n, zapisan u bazi potencija,

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n.$$

Uvjete interpolacije napišemo u obliku linearnog sustava s nepoznanicama $a_0, \ldots, a_n$,

$$\begin{aligned}
p_n(x_0) &= a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n = f_0 \\
p_n(x_1) &= a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n = f_1 \\
&\cdots\cdots\cdots \\
p_n(x_n) &= a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n = f_n.
\end{aligned}$$

Pokažimo da je matrica ovog sustava regularna, ako i samo ako su čvorovi različiti, a onda sustav ima jedinstveno rješenje.

Egzistencija i jedinstvenost (nastavak)

Provjeru regularnosti matrice napravit ćemo računanjem vrijednosti determinante.

Pripadna determinanta je tzv. Vandermondeova determinanta

$$D_n = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ 1 & x_{n-1} & x_{n-1}^2 & \cdots & x_{n-1}^n \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{vmatrix}.$$

Egzistencija i jedinstvenost (nastavak)

Definiramo determinantu koja “naliči” na D_n, samo umjesto čvora x_n, stavimo da je posljednji redak u $V_n(x)$ funkcija od x:

$$V_n(x) = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{n-1} & x_{n-1}^2 & \cdots & x_{n-1}^n \\ 1 & x & x^2 & \cdots & x^n \end{vmatrix}.$$

Primijetimo da je

$$D_n = V_n(x_n).$$

Promatrajmo $V_n(x)$ kao funkciju varijable x.

Egzistencija i jedinstvenost (nastavak)

Razvojem po posljednjem retku $V_n(x)$, uočavamo da je

- $V_n(x)$ = polinom stupnja najviše n u varijabli x,
- a koeficijent tog polinoma uz x^n je determinanta D_{n-1} ("križanje" zadnjeg retka i stupca u $V_n(x)$).

Ako u determinantu $V_n(x)$, redom, uvrštavamo $x_0, \ldots, x_{n-1}$,

- determinanta $V_n(x_k)$, za $k = 0, \ldots, n-1$, ima dva jednaka retka,

pa je

$$V_n(x_0) = V_n(x_1) = \cdots = V_n(x_{n-1}) = 0,$$

tj. točke $x_0, \ldots, x_{n-1}$ su nultočke polinoma $V_n(x)$, stupnja n.

Egzistencija i jedinstvenost (nastavak)

Za polinom $V_n(x)$, stupnja n, znamo

- vodeći koeficijent — D_{n-1},
- sve nultočke — $x_0, \ldots, x_{n-1}$,

pa $V_n(x)$ možemo napisati kao produkt

$$V_n(x) = D_{n-1}\,(x - x_0)\,(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}).$$

Uvrštavanjem $x = x_n$, dobivamo rekurzivnu relaciju za D_n

$$D_n = D_{n-1}\,(x_n - x_0)\,(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1}).$$

Odmah vidimo da je $D_0 = 1$ (lijevi gornji kut!), pa indukcijom slijedi

$$D_n = \prod_{0 \le j < i \le n} (x_i - x_j).$$

Egzistencija i jedinstvenost (nastavak)

Budući da je (po pretpostavci) $x_i \neq x_j$, za $i \neq j$, onda je

$$D_n \neq 0,$$

a vrijedi i obrat. Matrica linearnog sustava je regularna, pa

- postoji jedinstveno rješenje $a_0, \ldots, a_n$ za koeficijente polinoma p_n u standardnoj bazi potencija.

Iz jedinstvenosti prikaza u bazi slijedi da postoji jedinstveni interpolacijski polinom $\varphi = p_n \in \mathcal{P}_n$ za zadane podatke. ∎

Napomena. Nadalje ćemo se baviti

- raznim formama interpolacijskog polinoma,
- koje će uvijek predstavljati isti interpolacijski polinom,

samo zapisan u raznim bazama.

Izbor baze i matrica sustava

Ako u prostoru polinoma $\mathcal{P}_n$ izaberemo neku bazu $\varphi_0, \ldots, \varphi_n$, onda interpolacijski polinom p_n možemo prikazati u obliku

$$p_n = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x).$$

Linearni sustav za nepoznate koeficijente $a_0, \ldots, a_n$ ima oblik

$$\begin{aligned}
p_n(x_0) &= a_0\varphi_0(x_0) + a_1\varphi_1(x_0) + \cdots + a_n\varphi_n(x_0) = f_0 \\
p_n(x_1) &= a_0\varphi_0(x_1) + a_1\varphi_1(x_1) + \cdots + a_n\varphi_n(x_1) = f_1 \\
&\cdots\cdots\cdots \\
p_n(x_n) &= a_0\varphi_0(x_n) + a_1\varphi_1(x_n) + \cdots + a_n\varphi_n(x_n) = f_n.
\end{aligned}$$

Pitanje. Može li se relativno jednostavno pronaći baza $\varphi_0, \ldots, \varphi_n$ za koju je matrica ovog sustava jedinična matrica?

Primjer

Primjer. Nađite interpolacijski polinom p_{40}, stupnja 40, zapisan u standardnoj bazi potencija, koji interpolira funkciju

$$f(x) = \sin x,$$

na ekvidistantnoj mreži čvorova $x_i = i\,\dfrac{\pi}{2}$, na intervalu $[0, 20\pi]$.

Vandermondeov linearni sustav je katastrofalno uvjetovan,

$$\kappa_2 \approx 5.027 \cdot 10^{82},$$

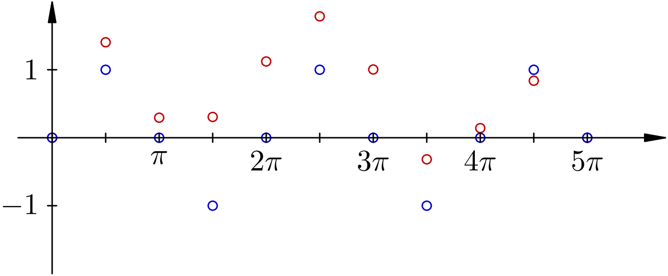
pa se očekuju velike greške u rješenju.

Kad izračunamo vrijednost u čvorovima interpolacije, greške su tolike da interpolacijski polinom ne interpolira zadane podatke — dakle, ni izračunati rezidual više nije malen.

Primjer (nastavak)

Legenda. Slika prikazuje samo dio podataka do 5π. Oznake:

- plavi kružići = zadane vrijednosti funkcije sin,
- crveni kružići = izračunate vrijednosti polinoma p_{40} u čvorovima interpolacije.



Zaključak. Treba naći brži način računanja (ovo traje $O(n^3)$), koji u čvorovima daje grešku 0.

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Pogledajmo uvjetovanost Vandermondeovih matrica za neke standardne izbore mreža čvorova, u ovisnosti o broju čvorova.

Oznaka: Za zadani $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ promatramo mrežu s $n + 1$ čvorova

$$x_i^{(n)}, \quad i = 0, \ldots, n, \qquad x_0^{(n)} < \cdots < x_n^{(n)}.$$

Pripadnu Vandermondeovu matricu reda $n + 1$ označavamo s

$$V^{(n+1)} = V^{(n+1)}\big(x_0^{(n)}, \cdots, x_n^{(n)}\big),$$

a njezini elementi su

$$\left(V^{(n+1)}\right)_{ij} = \left(x_{i-1}^{(n)}\right)^{j-1}, \quad i, j = 1, \ldots, n + 1.$$

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Primjer 1. Ekvidistantna mreža s n podintervala na segmentu $[-1, 1]$,

$$x_i^{(n)} = -1 + \frac{2}{n} \cdot i, \quad i = 0, \ldots, n.$$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$	n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$	n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$	n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
1	$1.000 \cdot 10^{0}$	8	$1.605 \cdot 10^{3}$	25	$2.131 \cdot 10^{11}$	60	$2.253 \cdot 10^{28}$
2	$3.226 \cdot 10^{0}$	10	$1.395 \cdot 10^{4}$	30	$5.642 \cdot 10^{13}$	70	$1.722 \cdot 10^{33}$
3	$8.012 \cdot 10^{0}$	12	$1.234 \cdot 10^{5}$	35	$1.496 \cdot 10^{16}$	80	$1.329 \cdot 10^{38}$
4	$2.353 \cdot 10^{1}$	14	$1.105 \cdot 10^{6}$	40	$4.044 \cdot 10^{18}$	90	$1.033 \cdot 10^{43}$
5	$6.383 \cdot 10^{1}$	16	$9.983 \cdot 10^{6}$	45	$1.093 \cdot 10^{21}$	100	$8.083 \cdot 10^{47}$
6	$1.898 \cdot 10^{2}$	18	$9.085 \cdot 10^{7}$	50	$2.989 \cdot 10^{23}$		
7	$5.354 \cdot 10^{2}$	20	$8.314 \cdot 10^{8}$				

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Primjer 2. Ekvidistantna mreža s n podintervala na segmentu $[0, 1]$,

$$x_i^{(n)} = \frac{i}{n}, \quad i = 0, \ldots, n.$$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
1	$2.618 \cdot 10^{0}$
2	$1.510 \cdot 10^{1}$
3	$9.887 \cdot 10^{1}$
4	$6.864 \cdot 10^{2}$
5	$4.924 \cdot 10^{3}$
6	$3.606 \cdot 10^{4}$
7	$2.678 \cdot 10^{5}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
8	$2.009 \cdot 10^{6}$
10	$1.156 \cdot 10^{8}$
12	$6.781 \cdot 10^{9}$
14	$4.032 \cdot 10^{11}$
16	$2.421 \cdot 10^{13}$
18	$1.465 \cdot 10^{15}$
20	$8.920 \cdot 10^{16}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
25	$2.628 \cdot 10^{21}$
30	$7.896 \cdot 10^{25}$
35	$2.404 \cdot 10^{30}$
40	$7.391 \cdot 10^{34}$
45	$2.289 \cdot 10^{39}$
50	$7.132 \cdot 10^{43}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
60	$7.018 \cdot 10^{52}$
70	$6.998 \cdot 10^{61}$
80	$7.048 \cdot 10^{70}$
90	$7.151 \cdot 10^{79}$
100	ne ide

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Primjer 3. Neekvidistantna "harmonijska" mreža s n podintervala na segmentu $[0, 1]$,

$$x_i^{(n)} = \frac{1}{n+1-i}, \quad i = 0, \ldots, n.$$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
1	$6.342 \cdot 10^{0}$
2	$5.965 \cdot 10^{1}$
3	$7.532 \cdot 10^{2}$
4	$1.217 \cdot 10^{4}$
5	$2.404 \cdot 10^{5}$
6	$5.620 \cdot 10^{6}$
7	$1.518 \cdot 10^{8}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
8	$4.650 \cdot 10^{9}$
10	$6.033 \cdot 10^{12}$
12	$1.129 \cdot 10^{16}$
14	$2.878 \cdot 10^{19}$
16	$9.586 \cdot 10^{22}$
18	$4.041 \cdot 10^{26}$
20	$2.102 \cdot 10^{30}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
25	$9.112 \cdot 10^{39}$
30	$1.037 \cdot 10^{50}$
35	$2.649 \cdot 10^{60}$
40	$1.356 \cdot 10^{71}$
45	$1.277 \cdot 10^{82}$
50	$2.071 \cdot 10^{93}$

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Za dani n, čvorovi “harmonijske” mreže su, redom,

$$x_0^{(n)} = \frac{1}{n+1}, \quad x_1^{(n)} = \frac{1}{n}, \quad \dots, \quad x_{n-1}^{(n)} = \frac{1}{2}, \quad x_n^{(n)} = \frac{1}{1},$$

pa zato i naziv “harmonijska”. Prvi čvor teži prema 0, kad $n \to \infty$.

Može se pokazati da je

$$\kappa_2(V^{(n+1)}) > (n+1)^{n+1}.$$

“Dobre” Vandermondeove matrice

Primjer 4. Postoje i “dobre” mreže čvorova za interpolaciju, ali njih treba tražiti u $\mathbb{C}$, a ne u $\mathbb{R}$.

Najvažniji primjer u praksi su kompleksni korijeni iz jedinice (promjena indeksa $i \to k$, jer je i imaginarna jedinica),

$$x_k^{(n)} = e^{2\pi ki/(n+1)} = \cos \frac{2k\pi}{n+1} + i \cdot \sin \frac{2k\pi}{n+1}, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Vandermondeova matrica je skalarni višekratnik unitarne matrice $U^{(n+1)}$

$$V^{(n+1)} = \sqrt{n+1} \cdot U^{(n+1)},$$

a za njezinu uvjetovanost vrijedi $\kappa_2(V^{(n+1)}) = 1$.

Ovo je podloga za tzv. brzu Fourierovu transformaciju (FFT), “najkorisniji” algoritam u povijesti!

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma

Da bismo našli koeficijente interpolacijskog polinoma, nije potrebno (ni dobro) rješavati linearni sustav za koeficijente.

Interpolacijski polinom p_n treba zapisati u nekoj drugoj bazi.

Po definiciji, Lagrangeova baza $\{\ell_k, k = 0, \ldots, n\}$ u prostoru polinoma $\mathcal{P}_n$ je ona baza za koju je

- matrica sustava za interpolaciju baš jedinična matrica, tj.
- za koeficijente interpolacijskog polinoma vrijedi $a_k = f_k$.

Dakle, Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma p_n je

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k \ell_k(x).$$

Koeficijenti su zadani podaci f_k, a problem je izračunati bazu!

Lagrangeova baza — kardinalna interpolacija

U Lagrangeovoj bazi, elementi matrice A sustava interpolacije su $A_{ik} = \ell_k(x_i)$, za $i, k = 0, \ldots, n$. Iz uvjeta $A = I$ dobivamo:

Polinomi ℓ_k Lagrangeove baze su rješenja posebnih problema interpolacije

$$\ell_k(x_i) = \delta_{ik} = \begin{cases} 0, & \text{za } i \neq k, \\ 1, & \text{za } i = k, \end{cases}$$

u kojima su desne strane (zadane vrijednosti) upravo jedinični vektori e_{k+1} standardne baze u $\mathbb{R}^{n+1}$, za $k = 0, \ldots, n$.

Raniji teorem $\Longrightarrow$ postoje jedinstveni polinomi $\ell_k \in \mathcal{P}_n$ koji zadovoljavaju ove — tzv. kardinalne uvjete interpolacije.

- Iz njih odmah slijedi da je $\{\ell_k, k = 0, \ldots, n\}$ baza u $\mathcal{P}_n$ (katkad se zove i kardinalna baza). Dokažite to!

Lagrangeova baza — eksplicitni oblik polinoma

Kardinalni uvjeti interpolacije za polinom ℓ_k

$$\ell_k(x_i) = \begin{cases} 0, & \text{za } i \neq k, \\ 1, & \text{za } i = k, \end{cases}$$

zadaju sve nultočke i još jednu vrijednost za ℓ_k. Odavde slijedi

$$\begin{aligned} \ell_k(x) &= \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})\,(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})\,(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)} \\ &= \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} := \frac{\omega_k(x)}{\omega_k(x_k)}, \quad k = 0, \ldots, n. \end{aligned}$$

Iz ovog oblika vidimo da je za računanje vrijednosti polinoma $p_n(x)$ u Lagrangeovoj formi potrebno $O(n^2)$ operacija.

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma

To je ubrzanje obzirom na $O(n^3)$ iz sustava, ali može još brže.

Polinom

$$\omega(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)$$

zovemo polinom čvorova.

Polinome $\ell_k(x)$ Lagrangeove baze možemo napisati preko $\omega(x)$,

$$\ell_k(x) = \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\,\omega_k(x_k)}.$$

Nadalje, derivacijom ω kao produkta izlazi $\omega_k(x_k) = \omega'(x_k)$, pa je

$$p_n(x) = \omega(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{f_k}{(x - x_k)\,\omega'(x_k)}.$$

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma

Forma

$$p_n(x) = \omega(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{f_k}{(x - x_k)\, \omega'(x_k)}$$

se može koristiti za računanje vrijednosti polinoma u točki $x \neq x_k$, za $k = 0, \ldots, n$ (za $x = x_k$ znamo da je $p_n(x_k) = f_k$).

Ipak, svrha Lagrangeovog oblika interpolacijskog polinoma

- nije računanje vrijednosti u točki, već se uglavnom koristi za teoretske svrhe (dokaze).
- Oblik Lagrangeove baze izražen preko polinoma čvorova koristi se kod numeričke integracije.

Ako znamo neke informacije o funkciji f, možemo napraviti i ocjenu greške interpolacijskog polinoma. Razumno u praksi:

- f je “malo više” netrivijalno glatka od polinoma p_n.

Greška interpolacijskog polinoma

Teorem. Pretpostavimo da

- funkcija f ima $(n+1)$-u derivaciju na segmentu $[a, b]$ za neki $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$;
- $x_k \in [a, b]$, za $k = 0, \ldots, n$, su međusobno različiti čvorovi interpolacije, tj. $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$;
- p_n je interpolacijski polinom za f u tim čvorovima.

Za bilo koju točku $x \in [a, b]$, postoji točka ξ

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

takva da za grešku interpolacijskog polinoma vrijedi

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

Greška interpolacijskog polinoma

Dokaz. 1. slučaj — ako je $x = x_k$, tj. x je čvor interpolacije.

Tada je $e(x_k) = \omega(x_k) = 0$, pa su obje strane posljednje relacije jednake 0, a ξ je proizvoljan. Dakle, tvrdnja vrijedi!

2. slučaj — pretpostavimo da x nije čvor interpolacije.

Tada je $\omega(x) \neq 0$ i grešku interpolacije prikazujemo u obliku

$$e(x) = f(x) - p_n(x) = \omega(x)s(x),$$

s time da je $s(x)$ korektno definiran (broj), čim x nije čvor.

Fiksirajmo x, a zatim definiramo funkciju $g = g_x$ u varijabli t

$$g(t) = e(t) - \omega(t)s(x) = e(t) - \omega(t)\,\frac{e(x)}{\omega(x)}, \qquad t \in [a, b].$$

Greška interpolacijskog polinoma

Gledamo derivabilnost od g po t, s tim da su p_n i ω polinomi.
Zaključci:

- funkcija pogreške e ima točno onoliko derivacija (po t) koliko i f, i one su neprekidne kad su to i derivacije od f;
- x nije čvor, pa je $g^{(n+1)}$ korektno definirana na $[a, b]$.

Nađimo koliko nultočaka ima funkcija g. Ako za t uvrstimo čvor x_k, dobivamo

$$g(x_k) = e(x_k) - \omega(x_k)\,\frac{e(x)}{\omega(x)} = 0, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Jednako tako je i

$$g(x) = e(x) - e(x) = 0.$$

Drugim riječima, g ima barem $n + 2$ nultočke na $[x_{\min}, x_{\max}]$.

Greška interpolacijskog polinoma

Sad iskoristimo da $g^{(n+1)}$ postoji na $[x_{\min}, x_{\max}] \subseteq [a, b]$.

Zbog $n \geq 0$, funkcija g je derivabilna na $[x_{\min}, x_{\max}]$, pa

- Rolleov teorem $\Longrightarrow$ g' ima barem $n + 1$ nultočku unutar $(x_{\min}, x_{\max})$.

Induktivnom primjenom Rolleovog teorema zaključujemo da

- $g^{(j)}$ ima barem $n + 2 - j$ nultočaka na $(x_{\min}, x_{\max})$, za $j = 0, \ldots, n + 1$;
- Na kraju, za $j = n + 1$ dobivamo da $g^{(n+1)}$ ima bar jednu nultočku $\xi \in (x_{\min}, x_{\max})$.

Ova nultočka ξ, naravno, ovisi o x, isto kao i funkcija g.

Za kraj dokaza, treba izračunati $g^{(n+1)}$ i uvrstiti nultočku ξ.

Greška interpolacijskog polinoma

Znamo da su p_n i ω polinomi odgovarajućih stupnjeva:

- p_n je polinom stupnja najviše n, pa je $p_n^{(n+1)} = 0$,
- ω je polinom stupnja točno $n+1$.

Onda je

$$e^{(n+1)}(t) = f^{(n+1)}(t), \quad \omega^{(n+1)}(t) = (n+1)!\,.$$

Uvrštavanjem ovih relacija u izraz za $g^{(n+1)}(t)$, dobivamo

$$\begin{aligned} g^{(n+1)}(t) &= e^{(n+1)}(t) - \omega^{(n+1)}(t)\,\frac{e(x)}{\omega(x)} \\ &= f^{(n+1)}(t) - (n+1)!\,\frac{e(x)}{\omega(x)}. \end{aligned}$$

Greška interpolacijskog polinoma

Kad uvažimo da je $g^{(n+1)}(\xi) = 0$, onda je

$$0 = g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - (n+1)!\,\frac{e(x)}{\omega(x)},$$

odnosno,

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

∎

Uočite sljedeće bitne stvari u tvrdnji i dokazu:

- Dovoljno je samo da $f^{(n+1)}(x)$ postoji, za svaki $x \in [a,b]$, bez daljnjih zahtjeva (ograničenost, neprekidnost, i sl.).
- Faktor $\omega(x)$ osigurava poništavanje greške u čvorovima. Lijepi oblik $\Rightarrow$ treba $n+1$-a derivacija. Zato nam treba prijelaz na t i "trik" s x, kao dodatnom nultočkom za g.

Za drugačije glatkoće od f postoje tzv. Jacksonovi teoremi.

Ocjena greške interpolacijskog polinoma

Pojačanje tvrdnje.

- Ako je $f^{(n+1)}$ ograničena na $[a, b]$, ili, jače,
- ako je $f \in C^{n+1}[a, b]$, tj. f ima neprekidnu $(n+1)$-u derivaciju na $[a, b]$,

onda vrijedi sljedeća "globalna" ocjena greške interpolacijskog polinoma p_n za funkciju f, u bilo kojoj točki $x \in [a, b]$

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{|\omega(x)|}{(n+1)!} M_{n+1}, \quad M_{n+1} := \max_{x \in [a,b]} |f^{(n+1)}(x)|.$$

Ova ocjena slijedi direktno iz prošlog teorema, a korisna je ako relativno jednostavno možemo

- izračunati ili odozgo ocijeniti vrijednost M_{n+1}.

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma (IP)

- nije pogodan za dodavanje čvorova, tj. za postupno povećanje stupnja interpolacijskog polinoma.

Postoji i Newtonova forma interpolacijskog polinoma (IP),

- koja se može izvesti tako da se interpolacijskom polinomu dodaju nove točke interpolacije (x_k, f_k), tj. povećava se stupanj interpolacijskog polinoma.

Početak konstrukcije = interpolacijski polinom stupnja 0:

Krećemo od čvora x_0 i konstante p_0 koja interpolira funkciju f u čvoru x_0

$$p_0(x) = f_0.$$

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Prvi korak = interpolacijski polinom stupnja 1:

- Dodajmo još jedan čvor interpolacije, x_1.

Polinom p_1 napišimo kao zbroj polinoma p_0 i korekcije r_1,

$$p_1(x) = p_0(x) + r_1(x).$$

Prvo uočimo:

- r_1 mora biti stupnja (najviše) 1.

Zatim, iz uvjeta interpolacije u ranijem čvoru x_0 imamo

$$f_0 = p_1(x_0) = p_0(x_0) + r_1(x_0) = f_0 + r_1(x_0),$$

tj. mora biti $r_1(x_0) = 0$. Dakle, r_1 mora imati oblik

$$r_1(x) = a_1(x - x_0).$$

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Na kraju, iz uvjeta interpolacije u novom čvoru x_1 imamo

$$f_1 = p_1(x_1) = p_0(x_1) + r_1(x_1) = f_0 + r_1(x_1),$$

tj. mora biti $r_1(x_1) = f_1 - f_0$. Iz $r_1(x_1) = a_1(x_1 - x_0)$ izlazi

$$a_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}.$$

Drugi korak = interpolacijski polinom stupnja 2:

- Dodajmo još jedan čvor interpolacije, x_2.

Polinom p_2 napišimo kao zbroj polinoma p_1 i korekcije r_2,

$$p_2(x) = p_1(x) + r_2(x).$$

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Opet, korekcija r_2 mora biti stupnja (najviše) 2.

Iz uvjeta interpolacije u ranijim čvorovima x_0 i x_1 imamo

$$f_k = p_2(x_k) = p_1(x_k) + r_2(x_k) = f_k + r_2(x_k), \quad k = 0, 1,$$

tj. mora biti $r_2(x_0) = r_2(x_1) = 0$. Dakle, r_2 mora imati oblik

$$r_2(x) = a_2(x - x_0)(x - x_1).$$

Na kraju, koeficijent a_2 računamo iz uvjeta interpolacije u novom čvoru x_2.

U nastavku konstrukcije, na isti način dobivamo iste zaključke:

- Korekcija mora imati nultočke u svim ranijim čvorovima,
- a koeficijent izlazi iz uvjeta interpolacije u novom čvoru.

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Nastavimo li postupak do čvora x_n, dobit ćemo interpolacijski polinom

$$p_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \cdots + a_n \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k),$$

zapisan u "donjoj trokutastoj" ili Newtonovoj bazi

$$1, \quad (x - x_0), \quad (x - x_0)(x - x_1), \quad \ldots, \quad \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k)$$

u prostoru $\mathcal{P}_n$ polinoma stupnja manjeg ili jednakog n.

Sada samo treba odrediti koeficijente a_k. Prethodni postupak odgovara supstituciji unaprijed (probajte). Međutim, može i elegantnije, što otkriva dodatna svojstva koeficijenata a_k!

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Već smo pokazali da je

$$a_0 = f_0, \quad a_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}.$$

Budući da dižemo stupanj interpolacijskog polinoma, onda a_k ovisi samo o funkciji f i "trenutnim" čvorovima $x_0, \ldots, x_k$.

Oznaka i definicija za koeficijente u Newtonovom obliku IP:

$$a_k = f[x_0, \ldots, x_k], \quad k = 0, \ldots, n,$$

a veličinu $f[x_0, \ldots, x_k]$ zovemo

- k-ta podijeljena razlika funkcije f s čvorovima $x_0, \ldots, x_k$.

Katkad se koristi "operatorska" oznaka $[x_0, \ldots, x_k]f$.

Podijeljene razlike

Lema. Za međusobno različite čvorove $x_0, \ldots, x_n$, podijeljena razlika $f[x_0, \ldots, x_n]$ ne ovisi o permutaciji čvorova σ, tj.

$$f[x_0, \ldots, x_n] = f[x_{\sigma(0)}, \ldots, x_{\sigma(n)}].$$

Dokaz. Označimo koeficijente interpolacijskog polinoma p_n

- s a_k — ako je poredak čvorova $x_0, \ldots, x_n$,
- s b_k — ako je poredak čvorova $x_{\sigma(0)}, \ldots, x_{\sigma(n)}$.

Dakle,

$$\begin{aligned} p_n(x) &= a_0 + a_1(x - x_0) + \cdots + a_n \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k) \\ &= b_0 + b_1(x - x_{\sigma(0)}) + \cdots + b_n \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_{\sigma(k)}). \end{aligned}$$

Podijeljene razlike

Oba zapisa predstavljaju isti polinom p_n, pa

- koeficijenti uz odgovarajuće potencije od x moraju biti jednaki.

Uspoređivanjem koeficijenata uz x^n vidimo da je $a_n = b_n$. ■

Kasnije ćemo vidjeti da čvorovi ne moraju biti različiti.

Ostaje još samo pitanje kako efikasno računati $f[x_0, \ldots, x_n]$.

Lema. Za podijeljene razlike vrijedi sljedeća rekurzija

$$f[x_0, \ldots, x_n] = \frac{f[x_1, \ldots, x_n] - f[x_0, \ldots, x_{n-1}]}{x_n - x_0},$$

s tim da je $f[x_k] = f_k$. Ovdje pretpostavljamo da je $x_0 \neq x_n$.

Podijeljene razlike

Dokaz. Označimo koeficijente interpolacijskog polinoma p_n u odgovarajućem Newtonovom obliku

- s a_k — ako je poredak čvorova $x_0, \ldots, x_n$,
- s b_k — ako je poredak čvorova $x_n, \ldots, x_0$.

Dakle,

$$\begin{aligned} p_n(x) &= a_0 + a_1(x - x_0) + \cdots + a_n \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k) \\ &= b_0 + b_1(x - x_n) + \cdots + b_n \prod_{k=1}^{n} (x - x_k). \end{aligned}$$

U prethodnoj lemi je dokazano da je $a_n = b_n$. Usporedimo sad koeficijente uz x^{n-1}.

Podijeljene razlike

Koeficijent uz x^{n-1} dobivamo kao zbroj dva koeficijenta:

- koeficijent uz pretposljednji član u p_n, što je a_{n-1} u jednom slučaju, a b_{n-1} u drugom,
- u posljednjem članu — u produktu faktora $\prod_{k=\cdots}^{\cdots}(x - x_k)$, uzmemo iz jedne zagrade $-x_k$, a iz svih ostalih x.

Izjednačavanjem koeficijenata dobivamo

$$a_{n-1} - a_n \sum_{k=0}^{n-1} x_k = b_{n-1} - b_n \sum_{k=1}^{n} x_k.$$

Uvažimo da je $a_n = b_n$

$$a_{n-1} - a_n \sum_{k=0}^{n-1} x_k = b_{n-1} - a_n \sum_{k=1}^{n} x_k.$$

Podijeljene razlike

Skratimo iste članove $x_1, \ldots, x_{n-1}$ u obje sume, pa ostaje

$$b_{n-1} - a_{n-1} = a_n(x_n - x_0),$$

ili

$$a_n = \frac{b_{n-1} - a_{n-1}}{x_n - x_0}.$$

Kad uvrstimo da je

$$\begin{aligned} a_n &= f[x_0, \ldots, x_n], \\ a_{n-1} &= f[x_0, \ldots, x_{n-1}], \\ b_{n-1} &= f[x_n, \ldots, x_1] = f[x_1, \ldots, x_n], \end{aligned}$$

odmah izlazi tražena rekurzija.

Start rekurzije je $f[x_k] = f_k$, što se vidi iz konstantnog interpolacijskog polinoma.

Tablica podijeljenih razlika

Tablica svih potrebnih podijeljenih razlika ima ovaj oblik:

x_k	$f[x_k]$	$f[x_k, x_{k+1}]$	$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}]$	$\cdots$	$f[x_0, \ldots, x_n]$
x_0	$f[x_0]$				
		$f[x_0, x_1]$			
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$		$\ddots$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$f[x_0, \ldots, x_n]$
		$f[x_{n-2}, x_{n-1}]$		$\iddots$	
x_{n-1}	$f[x_{n-1}]$		$f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n]$		
		$f[x_{n-1}, x_n]$			
x_n	$f[x_n]$				

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Konačni izgled Newtonovog interpolacijskog polinoma je

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

Od tablice podijeljenih razlika treba nam samo “gornji rub”. To se može izračunati u jednom jednodimenzionalnom polju.

Algoritam računanja podijeljenih razlika

```
za i = 1 do n radi {
  za j = n do i radi {
    f[j] = (f[j] - f[j-1])/(x[j] - x[j-i]);
  };
};
```

Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Nakon završetka algoritma za računanje podijeljenih razlika

- "gornji rub" $f[x_0, \ldots, x_i]$ se nalazi, redom, u polju `f`.

Algoritam izvrednjavanja interpolacijskog polinoma p_n u nekoj točki x ima oblik Hornerove sheme.

Algoritam izvrednjavanja interpolacijskog polinoma

```
sum = f[n];
za i = n - 1 do 0 radi {
  sum = sum * (x - x[i]) + f[i];
};
/* Na kraju je p_n(x) = sum. */
```

Složenost je $O(n)$ operacija po svakoj točki x.

Zapis greške interpolacijskog polinoma

Izraz za grešku interpolacijskog polinoma p_n na $[a, b]$ iz ranijeg teorema, možemo pisati korištenjem podijeljenih razlika.

Ideja. U Newtonov oblik polinoma p_n dodajmo još jedan čvor $x_{n+1} \in [a, b]$, s tim da x_{n+1} nije jednak ni jednom od polaznih čvorova $x_0, \ldots, x_n$. Dobivamo polinom p_{n+1} za kojeg vrijedi

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

gdje je ω polinom čvorova za polazne čvorove $x_0, \ldots, x_n$.

Zapis greške interpolacijskog polinoma

Uvjet interpolacije za polinom p_{n+1} u dodanom čvoru x_{n+1} je

$$p_{n+1}(x_{n+1}) = f(x_{n+1}).$$

On služi samo tome da dobijemo f, umjesto p_{n+1}, na lijevoj strani. A sad, zaboravimo na p_{n+1} i pogledajmo što to kaže o polinomu p_n od kojeg smo krenuli. Dobivamo

$$f(x_{n+1}) = p_n(x_{n+1}) + \omega(x_{n+1})\, f[x_0, \ldots, x_{n+1}],$$

odakle odmah slijedi izraz za grešku interpolacije u točki x_{n+1}

$$f(x_{n+1}) - p_n(x_{n+1}) = \omega(x_{n+1})\, f[x_0, \ldots, x_{n+1}].$$

Ovo je algebarski identitet — tu nema nikakvih “čudesa”!

Obično se piše x, umjesto x_{n+1}, zato da naglasimo da ta točka može varirati, a zadane čvorove $x_0, \ldots, x_n$ smatramo fiksnima.

Greška interpolacijskog polinoma

Teorem. Neka je f funkcija definirana na segmentu $[a, b]$. Neka je $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ i

- neka su $x_k \in [a, b]$, za $k = 0, \ldots, n$, međusobno različiti čvorovi interpolacije, tj. $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$,
- i neka je p_n interpolacijski polinom za f u tim čvorovima.

Za bilo koju točku $x \in [a, b]$, takvu da je $x \neq x_0, \ldots, x_n$, tj. čim x nije čvor interpolacije, za grešku interpolacije vrijedi

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

■

Bitno: Ovo vrijedi bez ikakvih dodatnih pretpostavki na f.

- Faktor $f[x_0, \ldots, x_n, x]$ ovisi samo o zadanim podacima (x_k, f_k), za $k = 0, \ldots, n$, i točki $(x, f(x))$ — gdje gledamo grešku.

Podijeljena razlika s dvostrukim čvorom

Ako želimo da prethodna formula vrijedi i kad je x jednak nekom od čvorova interpolacije, onda treba osigurati da je

- izraz $f[x_0, \ldots, x_n, x]$ korektno definiran, kad je $x = x_i$.

Pitanje: Što je podijeljena razlika u dvostrukom čvoru?

Definicija ide proširenjem po neprekidnosti. Neka su x_0 i $x_1 = x_0 + h$ dva čvora i pustimo da $h \to 0$. Tada je

$$f[x_0, x_0] = \lim_{h\to 0} f[x_0, x_0 + h] = \lim_{h\to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f'(x_0).$$

Dakle, podijeljena razlika $f[x_0, x_0]$ je korektno definirana ako i samo ako prva derivacija f' postoji u x_0.

Uz to proširenje, podijeljene razlike višeg reda računaju se na uobičajeni način — vrijedi rekurzija.

Proširenje — greška interpolacije u čvorovima

Proširenje. Ako f' postoji u svim čvorovima interpolacije, onda prethodna formula za grešku interpolacije polinomom p_n

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

vrijedi za sve $x \in [a, b]$, tj. i kad je x jednak nekom čvoru. ■

Velika prednost ovog oblika = može se derivirati i integrirati kao funkcija od x, uz odgovarajuću glatkoću funkcije f.
Osim toga, ova formula vrijedi i kad čvorovi nisu međusobno različiti (v. Hermiteova interpolacija).

Usporedimo to s izrazom za grešku iz ranijeg teorema

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

za neki $\xi \in (x_{\min}, x_{\max})$, pazeći na pretpostavke i tvrdnju!

Veza podijeljene razlike i derivacije istog reda

Teorem. Neka su zadani čvorovi $x_k \in [a, b]$, za $k = 0, \ldots, n$, i pretpostavimo da $f^{(n+1)}$ postoji na cijelom $[a, b]$. Onda za svaku točku $x \in [a, b]$, postoji točka $\xi \in (x_{\min}, x_{\max})$, takva da za podijeljenu razliku vrijedi

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}.$$

Tvrdnja vrijedi i kad čvorovi nisu međusobno različiti. ∎

Kad stavimo $x = x_{n+1}$, dobijemo

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}.$$

Za $n = 0$, usporedite ovo s Lagrangeovim teoremom srednje vrijednosti, ili odnosom "sekanta" $\leftrightarrow$ "tangenta"!
Gornja formula je generalizacija za $n \geq 1$ (za više derivacije).

Podijeljene razlike visokog reda za polinome

Iz formule

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

direktno izlazi još i ovaj rezultat.

Korolar. Ako je $f \in \mathcal{P}_n$ polinom stupnja najviše n, onda je

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = 0, \quad \text{za} \quad k \geq n+1,$$

za bilo koji izbor čvorova $x_0, \ldots, x_k$.

Dokaz. Za $k \geq n+1$ vrijedi $f^{(k)}(\xi) = 0$ u svakoj točki ξ.

∎

Podijeljena razlika — kao funkcija argumenata

Za ilustraciju, pogledajmo kako se ponaša podijeljena razlika

$$f[x, y] = \begin{cases} \frac{f(y)-f(x)}{y-x}, & \text{za } x \neq y \\ f'(x), & \text{za } x = y, \text{ ako } f'(x) \text{ postoji,} \end{cases}$$

kao funkcija dvije varijable $x, y \in [a, b]$, na kvadratu $S = [a, b] \times [a, b] \subseteq \mathbb{R}^2$, s dijagonalom $D = \{ (x, x) \mid x \in [a, b] \}$.

Ovisno o svojstvima funkcije f na $[a, b]$, za $f[x, y]$ vrijedi:

- f definirana na $[a, b] \implies f[x, y]$ definirana na $S \setminus D$,
- f neprekidna na $[a, b] \implies f[x, y]$ neprekidna na $S \setminus D$,
- f derivabilna na $[a, b] \implies f[x, y]$ definirana na cijelom S,
- f neprekidno derivabilna na $[a, b] \implies f[x, y]$ neprekidna na cijelom S.