

Numerička matematika

7. predavanje

Saša Singer

`singer@math.hr`

`web.math.hr/~singer`

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

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

Informacije

Termin prvog kolokvija — nažalost, još uvijek nije poznat!

- Pratite obavijesti na vježbama, oglasnoj ploči, web stranicama faksa!

Prvi dio skripte i jučerašnje predavanje imaju “tipfeler”:

- fali π u formuli za opću Čebiševljevu mrežu.

Popravljeno!

Kolegij “Numerička matematika” ima demonstratora!

- Sonja Šimpraga — termin je četvrtkom, od 16–18.

Pogledajte oglas na oglasnoj ploči za dogovor.

Informacije — nastavak

Bitno: “Oživile” su i **domaće zadaće** iz **NM**.

- Realizacija ide “automatski” — preko **web** aplikacije, slično kao na **Prog1**.

Pogledajte na **službeni** web kolegija, pod “**zadaće**”.

- Tamo su **početne upute**.

Skraćeni link je

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

Direktni link na **aplikaciju** za **zadaće** je

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

Informacije — nastavak

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

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

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

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

Skraćena je — za okruglo 30 stranica!

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 7 tjedana):

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

Informacije — nastavak

Na molbu Sanje Singer i Vedrana Novakovića, za goste je otvorena i web stranica kolegija Matematika 3 i 4 na FSB-u.

Tamo možete naći dodatne materijale za neke dijelove NM,

• posebno — vježbe i riješene zadatke.

Predavanja su “malo nježnija” od naših. Početna stranica je

<http://e-ucenje.fsb.hr/>

Zatim potražite “Katedra za matematiku” i onda:

• odete (kliknete) na kolegije Matematika 3 i 4,

• kliknete na gumb “Prijava kao gost”,

• na stranici potražite blok 3 “Numerička matematika”.

Iskoristite! Naravno, smijete pogledati i ostalo!

Interpolacija splajnovima (nastavak)

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Primjer. Funkciju

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

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

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

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

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

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

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

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

pri čemu je n **broj** podintervala interpolacije.

Tražimo li **točnost** ε , onda mora biti

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

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Da bi se to postiglo, **dovoljno** je zatražiti da je

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

Odatle odmah slijedi da mora biti

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

Sada još samo treba izračunati M_2 . Deriviranjem dobivamo

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

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

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

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

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

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

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

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

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

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

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

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

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

Interpolacijski polinom na tom **podintervalu** onda glasi:

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

pa je

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

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

pa je $n_1 = 36$.

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

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

pa je $n_2 = 89$.

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

pa je $n_3 = 470$.

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

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

Po dijelovima kubična interpolacija

Po dijelovima kubična interpolacija

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

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

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

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

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

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

Broj nepoznatih parametara i broj uvjeta

Ukupno imamo n kubičnih polinoma,

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

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

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

tj. mora vrijediti

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

Ovi uvjeti automatski **osiguravaju neprekidnost** funkcije φ .

Dodatni uvjeti interpolacije na derivaciju

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

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

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

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

pri čemu su s_k neki brojevi.

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

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

Neprekidnost derivacije interpolacijske funkcije

Zasad, možemo zamišljati da su brojevi s_k

- neke **aproksimacije derivacije** funkcije f u čvorovima.

Oznaka s_k dolazi od engleske riječi “**slope**” = **nagib**.

Primijetite da je takvim izborom **dodatnih** uvjeta

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

jer je

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

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

Nađimo **koeficijente** interpolacijskog polinoma p_k .

Zapis po dijelovima kubične interpolacije

Za ovaj problem Hermiteove interpolacije

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

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

- vrijednost funkcije i derivacije.

Razmak susjednih različitih čvorova označavamo ovako:

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

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

Dvostruki čvorovi u podijeljenim razlikama

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

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

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

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

U našem slučaju, ako u točki x_k

• derivaciju $f'(x_k)$ zadajemo ili aproksimiramo sa s_k ,
onda je

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

Tablica podijeljenih razlika za polinom p_k

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

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

Newtonov oblik polinoma p_k

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

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

uz uvažavanje da je

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

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

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

Newtonov oblik polinoma p_k

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

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

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

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

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

Standardni oblik polinoma p_k

Posljednji član **Newtonovog** oblika polinoma p_k možemo napisati kao

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

Zapis polinoma p_k sada glasi

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

Standardni oblik polinoma p_k

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

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

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

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

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

Promotrimo li posljednje **dvije** relacije, otkrivamo da se **isplati**

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

Standardni oblik polinoma p_k

Na kraju, dobivamo sljedeće relacije

• za koeficijente $c_{i,k}$ u standardnom zapisu polinoma p_k , napisane redom kako se računaju:

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

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

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

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

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

Po dijelovima kubična interpolacija — komentar

Drugim riječima, ako znamo s_k , onda

- nije problem naći koeficijente po dijelovima kubične interpolacije.

Ostaje nam samo pokazati kako bismo mogli birati brojeve s_k .

Tu postoje dva bitno različita načina.

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

Po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija

Po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija

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

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

U tom slučaju je **kubični polinom**

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

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

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

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

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

pri čemu je

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

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

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

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

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

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

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

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

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

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Definiramo li, ponovno, maksimalni razmak čvorova

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

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

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

pri čemu je

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

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

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 podatke

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

Očito, treba povući dva kubična polinoma

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

Primjer — po dijelovima Hermiteova interp.

Za polinom p_1 imamo sljedeću tablicu podijeljenih razlika

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

Iz nje dobivamo

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

Primjer — po dijelovima Hermiteova interp.

Na sličan način, za p_2 dobivamo tablicu podijeljenih razlika

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

pa je

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

Demo — po dijelovima kub. Hermiteova interp.

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

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

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

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

Numeričko deriviranje

Numeričko deriviranje

U praksi, često derivacije funkcije **nisu dostupne**, već

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

Ideja. Aproksimacija derivacije = derivacija aproksimacije.

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

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

gdje je $p_n(x)$ **interpolacijski** polinom

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

Derivacija funkcije = derivacija interp. polinoma

a $e_n(x)$ greška interpolacijskog polinoma

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

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

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

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

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

Greška = derivacija greške interp. polinoma

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

$$f'(x_0) = p'_n(x_0) + e'_n(x_0).$$

Ako označimo s

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

onda je, za $H \rightarrow 0$, greška $e'_n(x_0)$ **reda veličine**

$$e'_n(x_0) = O(H^n).$$

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

Numeričko deriviranje — linearni polinom

Pokažimo kako se ta formula ponaša za **niske** n .

$n = 1$.

Aproksimacija derivacije je

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

pri čemu smo napravili **grešku**

$$e'_1(x_0) = \frac{f^{(2)}(\xi)}{2!} (x_0 - x_1) = -\frac{f^{(2)}(\xi)}{2} h,$$

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

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

$n = 2$.

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

1. Simetričan izbor točaka

Izaberemo x_1 i x_2 simetrično oko x_0

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

Sugestivnija oznaka je

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

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

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

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

Izračunajmo potrebne **podijeljene** razlike.

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

Uvrštavanjem dobivamo

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

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

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

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

$$e'_2(x_0) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{6} (x_0 - x_1)(x_0 - x_{-1}) = -h^2 \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}.$$

2. Slučaj x_1 i x_2 s iste strane x_0

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

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

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka

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

Pripadna tablica podijeljenih razlika je

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

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka

Konačno, aproksimacija derivacije u x_0 je

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

dok je greška jednaka

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

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

Numeričko deriviranje — zaključci

Formula za derivaciju

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

To vrijedi samo **teoretski**.

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

Osnovu numeričkog deriviranja čine **podijeljene razlike**,

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

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

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

Numeričko deriviranje — ilustracija problema

Ilustrirajmo to analizom simetrične razlike,

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

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

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

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

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

Koliko malen smije biti h ?

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

Zbog **jednostavnosti** analize pretpostavimo da je

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

U tom je slučaju napravljena **ukupna greška**

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

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

Koliko malen smije biti h ?

Za drugi član koristimo ocjenu za $e'_2(x_0)$, pa zajedno dobivamo

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

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

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

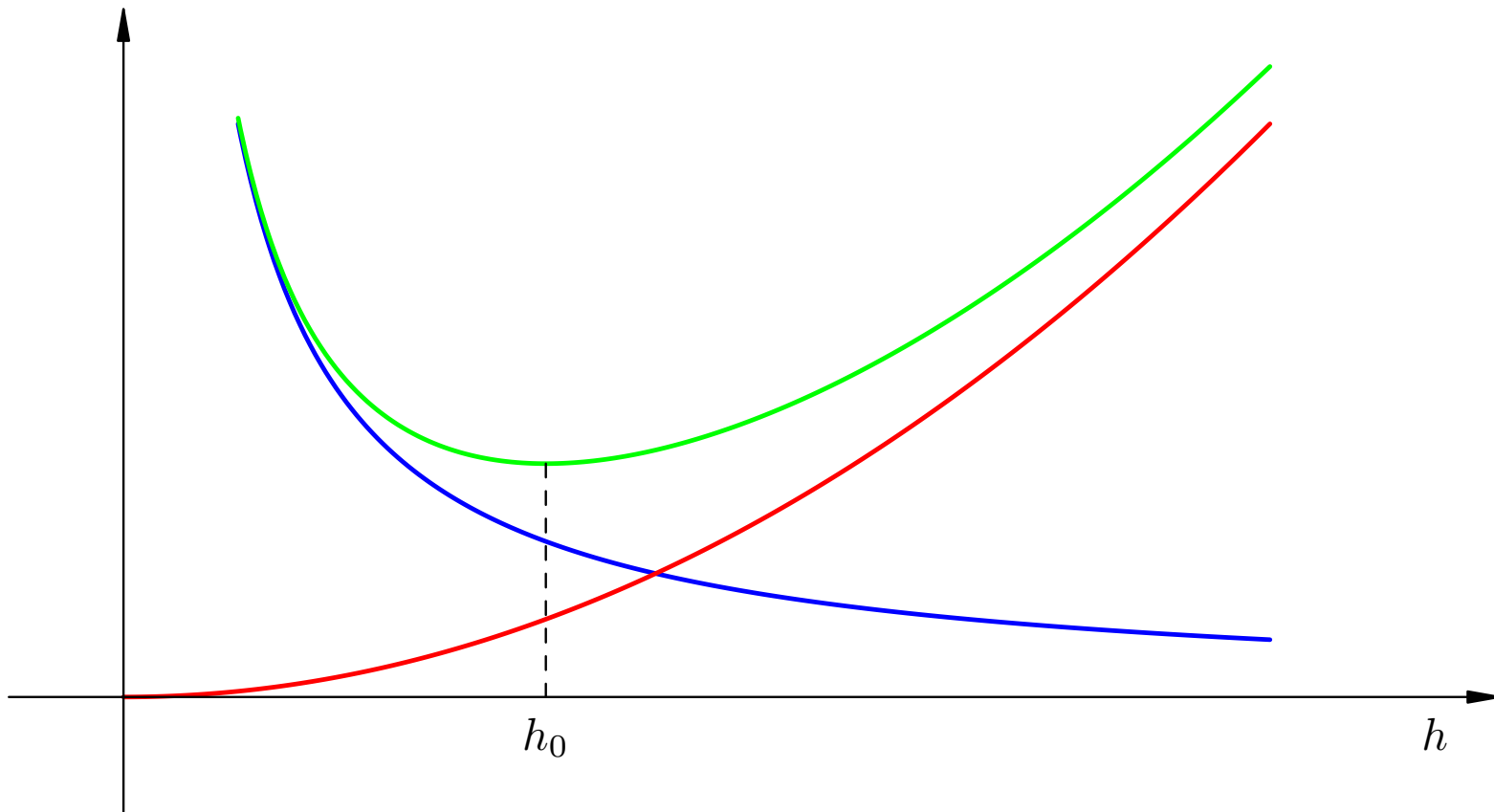
Ponašanje ove ocjene i njezina dva člana u ovisnosti od h možemo prikazati sljedećim grafom.

Koliko malen smije biti h ?

Legenda:

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

Optimalni h_0



Optimalni h_0

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

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

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

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

Najmanja vrijednost funkcije je

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

Ukupna greška koju ne očekujemo

To pokazuje da je čak i u **najboljem** slučaju,

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

To predstavlja **značajni gubitak točnosti**.

Posebno, **daljnje** smanjivanje koraka h samo **povećava** grešku!

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

Po dijelovima kubična kvazihermiteova interpolacija

Po dijelovima kubična kvazihermiteova interp.

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

U tom slučaju

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

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

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

Podijeljene razlike unaprijed

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

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

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

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

Podijeljene razlike unazad

a ako koristimo podijeljene razlike unazad, onda je

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

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

• $O(h)$ u derivaciji,

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

što je dosta loše.

Simetrične razlike kao aproksimacije derivacije

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

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

Greška obzirom na obične podijeljene razlike

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

Besselova aproksimacija derivacija

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

Ako derivaciju u točki x_k **aproksimiramo** tako da povučemo

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

Pripadna kvazihermiteova interpolacija zove se **Besselova** po dijelovima kubična interpolacija.

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

Besselova aproksimacija derivacija — sredina

Derivaciju u x_0 aproksimiramo tako da povučemo

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

Slično, derivaciju u x_n aproksimiramo tako da povučemo

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

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

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

Besselova aproksimacija derivacija — sredina

a zatim, deriviranjem i uvrštavanjem x_k

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

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

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

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

Besselova aproksimacija derivacija — početak

Za $k = 0$ pripadni polinom je

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

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_0 dobivamo

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

Besselova aproksimacija derivacija — kraj

Za $k = n$ pripadni polinom je

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

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_n dobivamo

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

Besselova aproksimacija derivacija — greška

Dakle, za Besselovu po dijelovima kubičnu interpolaciju stavljamo

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

Greška

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

Akimina aproksimacija derivacija — sredina

Još jedna varijanta aproksimacije derivacija “s imenom”.

Akima je 1970. godine dao sljedeću aproksimaciju koja

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

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

uz

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

i

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

Akimina aproksimacija derivacija — početak

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

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

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

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

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

Akimina aproksimacija derivacija — kraj

Odatle slijedi da je

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

odnosno

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

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

Na sličan način, možemo dobiti i relaciju za s_n

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

Akimina aproksimacija derivacija — greška

Akimin algoritam je

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

Za neekvidistantne točke, greška

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

Ako su točke ekvidistantne, onda je greška

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

Akimina aproksimacija derivacija — osnovni cilj

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

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

Ostaje još pitanje kako postići vizuelnu “**glatkoću**”?

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

Druge aproksimacije derivacija

Aproksimacija derivacije mogla bi se napraviti još i **bolje**, ako

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

Takvim postupkom možemo dobiti **grešku**

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

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

Zaključak

Kvazihermiteova po dijelovima kubična interpolacija je, također,

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

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

Kubična splajn interpolacija

Kubična splajn interpolacija

Brojeve s_0, \dots, s_n možemo odrediti i iz zahtjeva da

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

Takva se interpolacija zove kubična splajn interpolacija.

Iz tih uvjeta ne možemo jednoznačno izračunati splajn, jer

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

Broj nepoznatih parametara i broj uvjeta

Zaključak. Ukupno imamo

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

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

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

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

Ljepljenje druge derivacije

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

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

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

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

onda je

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

Ljepljenje druge derivacije

Uvrštavanjem x_k i dijeljenjem s 2 izlazi uvjet ljepljenja

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

Ostaje samo ispisati koeficijente $c_{i,k}$ u terminima f_k i s_k .

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

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

Sada još treba uvrstiti ove dvije relacije u uvjet ljepljenja druge derivacije.

Linearni sustav za kubičnu splajn interpolaciju

Sređivanjem izlazi

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

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

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

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

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

Linearni sustav za kubičnu splajn interpolaciju

Ovo je linearni sustav

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

Ako zadamo nagibe s_0 i s_n , ostaje točno $n - 1$ nepoznanica.

Matrica tako dobivenog linearnog sustava je **trodijagonalna**

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

i **strogo dijagonalno dominantna** po recima, jer je

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

pa je i **regularna**.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

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

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

Za trodijagonalnu matricu

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

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

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Tada nije teško pokazati da su matrice L i R oblika

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

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

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Ostale elemente matrica L i R računamo po sljedećim rekurzijama

$$r_1 = d_1,$$

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

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

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

Primijetite, sada s_k

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

Dva dodatna uvjeta

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

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

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

Potpuni (kompletni) splajn

(a) Potpuni (kompletni) splajn

Poznato:

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

Zadaje se:

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

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

Zadana druga derivacija u rubovima

(b) Zadana druga derivacija u rubovima

Poznato:

• druga derivacija funkcije f u rubovima.

Zadaje se:

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

Treba još izraziti

• $p_1''(x_0)$ preko s_0, s_1 ,

• $p_n''(x_n)$ preko s_{n-1} i s_n .

Zadana druga derivacija u rubovima — početak

Znamo da je

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

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

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

ili, ako sredimo, dobivamo

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

Ovu jednadžbu treba dodati kao **prvu** u linearni sustav.

Zadana druga derivacija u rubovima — kraj

Slično, korištenjem da je

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

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

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

Tu jednadžbu dodajemo kao **zadnju** u linearni sustav.

Dobiveni linearni sustav

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

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

Prirodni splajn

(c) Prirodni splajn

Poznato: tzv. slobodni krajevi,

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

Dodatne jednađbe: kao u (b), samo se stavi

$$f''(x_0) = f''(x_n) = 0$$

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

Greška aproksimacije:

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

Numerička aproksimacija derivacija

(d) Numerička aproksimacija derivacija

Nepoznato: ponašanje derivacije funkcije f na rubovima.

Preostala dva parametra mogu se odrediti tako da

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

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

Not-a-knot (nije čvor) splajn

(e) Not-a-knot (nije čvor) splajn

Nepoznato: ponašanje derivacije funkcije f na rubovima.

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

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

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

To znači da se u čvoru

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

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

Te zahtjeve možemo pisati kao

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

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

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

Pridružimo li taj zahtjev zahtjevu ljepljenja druge derivacije,

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

dobivamo ...

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

... prvu jednadžbu

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

Sređivanjem, izlazi

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

Not-a-knot (nije čvor) splajn — kraj

Na sličan način dobivamo i **zadnju** jednažbu

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

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

Porijeklo naziva “not-a-knot”:

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

Ostali rubni uvjeti

(f) Ostali rubni uvjeti

Svi dosad opisani načini zadavanja rubnih uvjeta “čuvaju”

- trodijagonalnu strukturu linearnog sustava za nepoznate parametre s_k .

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

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

što vodi na jednadžbe

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

Dobiveni linearni sustav više nije trodijagonalan.

Greška kubične splajn interpolacije

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

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

Tada je

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

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

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

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

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

Greška kubičnog splajna i rubni uvjeti

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

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

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

Napomena.

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

Postoji cijela teorija **splajn** funkcija — ne samo polinomnih.

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

Demo — Not-a-knot kubična splajn interp.

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

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

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

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

Primjer — prirodni splajn

Primjer. Neka je

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

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

Izračunajte vrijednost tog splajna u točki 0.55 .

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

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

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

Primjer — prirodni splajn

Dodatne jednadžbe (prva i zadnja) za prirodni splajn su

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

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

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

Primjer — prirodni splajn

Iz svih ovih podataka dobivamo linearni sustav

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

Rješenje tog linearnog sustava za “nagibe” je

$$s_0 = -s_5 = 3.1387417029,$$

$$s_1 = -s_4 = 2.5392953786,$$

$$s_2 = -s_3 = 0.9699245271.$$

Primjer — prirodni splajn

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

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

Oдавde odmah slijedi da je p_3 , zapravo, **kvadratni** polinom

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

Primjer — prirodni splajn

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

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

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

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

Usporedba raznih vrsta interpolacije

Demo — Interpolacija izmjerenih podataka

Pokazati kako izgleda **usporedba** raznih vrsta interpolacije:

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

na skupu **izmjerenih** podataka u **praksi**,

- s **raznim** izborima **čvorova** interpolacije.

Ovo je poznato “**težak**” primjer za interpolaciju!

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