Numerička matematika
6. predavanje

Saša Singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Interpolacija splajnovima:
  - Uvod u polinomnu spline interpolaciju.
  - Linearni splajn i ocjena greške.
  - 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.

Interpolacija splajnovima

Interpolacija polinomima — zaključci

Polinomna interpolacija visokog stupnja

- može imati vrlo loša svojstva — između čvorova,
- i u praksi se ne smije koristiti.

Umjesto toga, koristi se

- po dijelovima polinomna interpolacija, tj. na svakom podintervalu koristi se polinom fiksnog, niskog stupnja.

Pretpostavka: čvorovi interpolacije su uzlazno numerirani,

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b.$$

i baš u njima su rubovi podintervala za pojedine polinome. Može i drugačije (čvorovi su različiti od rubova). Međutim, ovo je zgodno za neparne stupnjeve polinoma.

Po dijelovima polinomna interpolacija

Na svakom podintervalu $[x_{k-1}, x_k]$ koristimo polinom fiksnog stupnja m, tj. tražimo da je

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

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

Svaki polinom p_k (stupnja najviše m)

- određen je s $m + 1$ koeficijenata, i
- moramo odrediti koeficijente n takvih polinoma — na svakom intervalu po jedan.

Dakle, ukupan broj koeficijenata koje treba odrediti je

$$(m + 1) \cdot n.$$

Po dijelovima polinomna interpolacija

Interpolacijski uvjeti su

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

Gledano na $[x_{k-1}, x_k]$, za svaki polinom p_k imamo po 2 uvjeta

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

Dakle, ukupno imamo $2n$ uvjeta interpolacije (ne samo $n + 1$).

Digresija. Ovi uvjeti interpolacije osiguravaju neprekidnost funkcije φ u svim "unutarnjim" čvorovima mreže $x_1, \ldots, x_{n-1}$, jer je

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

Po dijelovima polinomna interpolacija

Zaključak.

- Uvjeta interpolacije je $2n$, a
- treba naći $(m+1) \cdot n$ koeficijenata.

Bez dodatnih uvjeta, to je moguće jedinstveno napraviti

- samo za $m = 1$,
- tj. za po dijelovima linearnu interpolaciju.

Za $m > 1$,

- dodaju se uvjeti na glatkoću interpolacijske funkcije φ u (unutarnjim) čvorovima mreže za podintervale.

Uz naš dogovor, to su upravo i čvorovi interpolacije.

Po dijelovima linearna interpolacija

Osnovna ideja po dijelovima linearne interpolacije je:

- umjesto jednog polinoma visokog stupnja,
- koristi se više polinoma, ali stupnja 1.

Na svakom podintervalu $[x_{k-1}, x_k]$, polinom p_k je stupnja 1

- i jedinstveno je određen iz uvjeta interpolacije.

Zapisujemo ga relativno obzirom na početnu točku intervala (stabilnost) u obliku

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

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

Po dijelovima linearna interpolacija

Interpolacijski polinom p_k zapisujemo u Newtonovoj formi

$$p_k(x) = f[x_{k-1}] + f[x_{k-1}, x_k] \cdot (x - x_{k-1}),$$

pa je očito

$$\left.\begin{aligned} c_{0,k} &= f[x_{k-1}] = f_{k-1}, \\ c_{1,k} &= f[x_{k-1}, x_k] = \frac{f_k - f_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}, \end{aligned}\right. \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Za aproksimaciju vrijednosti funkcije f u jednoj točki $x \in [a, b]$, treba

- prvo pronaći indeks k takav da vrijedi $x \in [x_{k-1}, x_k]$,
- a onda izračunati vrijednost $p_k(x)$ pripadnog linearnog polinoma p_k na tom podintervalu.

Po dijelovima linearna interpolacija

Za traženje tog intervala koristimo binarno pretraživanje.

Binarno pretraživanje

```
low = 0;
high = n;
dok je (high - low) > 1 radi {
  /* U sljedećoj liniji cjelobrojno dijeljenje */
  mid = (low + high) / 2;
  ako je x < x[mid] onda
    high = mid;
  inače
    low = mid;
};
```

Trajanje ovog algoritma je proporcionalno s $\log_2(n)$.

Greška po dijelovima linearne interpolacije

Ako je funkcija f klase $C^2[a, b]$, onda je pogreška takve interpolacije, zapravo,

- maksimalna pogreška od n linearnih interpolacija.

Na svakom podintervalu $[x_{k-1}, x_k]$, pogreška je

- greška linearne interpolacije polinomom p_k.

Ocjena lokalne pogreške, ovisna o točki x, je

$$|f(x) - p_k(x)| \leq |\omega_k(x)| \, \frac{M_2^k}{2!},$$

pri čemu je

$$\omega_k(x) = (x - x_{k-1})(x - x_k), \qquad M_2^k = \max_{x \in [x_{k-1}, x_k]} |f''(x)|.$$

Greška po dijelovima linearne interpolacije

Nađimo maksimum po apsolutnoj vrijednosti za $\omega_k(x)$, na zatvorenom intervalu $[x_{k-1}, x_k]$.

Funkcija $|\omega_k|$ može imati maksimum samo na otvorenom intervalu (x_{k-1}, x_k) — u rubovima je vrijednost 0 (minimum).

Deriviranjem dobivamo da se lokalni ekstrem funkcije

$$\omega_k(x) = (x - x_{k-1})(x - x_k),$$

postiže u polovištu $x_e = (x_{k-1} + x_k)/2$ (tjeme parabole).

Vrijednost funkcije ω_k u lokalnom ekstremu je

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

Greška po dijelovima linearne interpolacije

Za bilo koji $x \in (x_{k-1}, x_k)$ je $\omega_k(x) < 0$, pa je x_e

- točka lokalnog minimuma za ω_k, odnosno,
- točka lokalnog maksimuma za $|\omega_k|$, tj. vrijedi

$$|\omega_k(x)| \leq |\omega_k(x_e)| = \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{4}, \quad \forall x \in [x_{k-1}, x_k].$$

Neka je h maksimalni razmak čvorova po svim podintervalima

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

i neka je M_2 maksimum apsolutne vrijednosti f'' na cijelom intervalu $[a, b]$

$$M_2 := \max_{k=1,\dots,n} \{M_2^k\} = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|.$$

Greška po dijelovima linearne interpolacije

Na cijelom intervalu $[a, b]$, onda možemo pisati

$$|f(x) - \varphi(x)| \leq \frac{h^2}{4} \cdot \frac{M_2}{2!} = \frac{1}{8} h^2 M_2.$$

Zaključak. Ako ravnomjerno povećavamo broj čvorova n, tako da maksimalni razmak čvorova $h \to 0$ (kad $n \to \infty$),

- onda i maksimalna greška teži u 0, tj.
- dobivamo uniformnu konvergenciju!

Na primjer, za ekvidistantne mreže, za koje je

$$x_k = a + kh, \quad h = \frac{b-a}{n},$$

pogreška je reda veličine h^2, odnosno, n^{-2}.

Komentar na po dijelovima linearnu interpolaciju

Mane po dijelovima linearne interpolacije:

- Potrebno je dosta podintervala da se dobije umjerena točnost aproksimacije.
- Na primjer, za $h = 0.01$, tj. za $n = 100$, greška aproksimacije je reda veličine 10^{-4}, do na faktor $M_2/8$.
- Funkcija φ nije dovoljno glatka — samo je neprekidna.

Primjer za linearnu splajn interpolaciju

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

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

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

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

Odatle odmah slijedi da mora biti

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

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 nalazi točka $x_* = 2$.

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

U našem slučaju je $x_* = 2$. 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_j	$f[x_j]$	$f[x_j, x_{j+1}]$
1.9897172240	0.6879925301	
		0.4990461264
2.0179948590	0.7021043744	

Interpolacijski polinom na tom podintervalu onda glasi:

$$p_{36}(x) = 0.6879925301 + 0.4990461264(x - 1.9897172240),$$

pa je

$$p_{36}(2) = 0.6931241097, \quad |\ln(2) - p_{36}(2)| = 0.0000230709.$$

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

pa je $n_1 = 36$.

Na intervalu $[2, 7]$ je $M_2 = \dfrac{1}{4}$, odakle dobivamo

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

pa je $n_2 = 89$.

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

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

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

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 $\ln 2 \approx 0.6931471806$.

Po dijelovima kubična interpolacija

Po dijelovima kubična interpolacija

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

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

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

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

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

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

Broj nepoznatih parametara i broj uvjeta

Ukupno imamo n kubičnih polinoma.

- Za svakog od njih treba odrediti po 4 koeficijenta,
- dakle, ukupno moramo odrediti $4n$ koeficijenata.

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

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

tj. mora vrijediti

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

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

Dodatni uvjeti interpolacije na derivaciju

Obično želimo da interpolacijska funkcija φ bude glađa:

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

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

- za svaki kubični polinom p_k dodajemo još po dva uvjeta

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

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

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

Neprekidnost derivacije interpolacijske funkcije

Zasad, možemo zamišljati da su brojevi s_k

- neke aproksimacije derivacije funkcije f u čvorovima.

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

Primijetite da je takvim izborom dodatnih uvjeta

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

jer je

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

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

Nađimo koeficijente interpolacijskog polinoma p_k.

Zapis po dijelovima kubične interpolacije

Za ovaj problem Hermiteove interpolacije

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

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

- vrijednost funkcije i derivacije.

Razmak susjednih različitih čvorova označavamo kao i prije

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

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

Dvostruki čvorovi u podijeljenim razlikama

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

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

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

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

U našem slučaju, ako u točki x_k

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

onda je zadano

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

Tablica podijeljenih razlika za polinom p_k

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

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

Newtonov oblik polinoma p_k

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

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

s tim da je

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

Newtonov oblik polinoma p_k

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

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

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

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

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

Standardni oblik polinoma p_k

Posljednji član Newtonovog oblika polinoma p_k možemo napisati kao

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

Zapis polinoma p_k onda glasi

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

Standardni oblik polinoma p_k

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

$$
\begin{aligned}
c_{0,k} &= p_k(x_{k-1}) = f_{k-1}, \\
c_{1,k} &= p_k'(x_{k-1}) = s_{k-1}, \\
c_{2,k} &= \frac{p_k''(x_{k-1})}{2} = f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k] - h_k\, f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k, x_k], \\
c_{3,k} &= \frac{p_k'''(x_{k-1})}{6} = f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k, x_k].
\end{aligned}
$$

Promotrimo li posljednje dvije relacije, vidimo da se isplati

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

Standardni oblik polinoma p_k

Na kraju, dobivamo sljedeće relacije

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

napisane redom kako se računaju iz zadanih podataka:

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

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

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

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

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

Po dijelovima kubična interpolacija — komentar

Drugim riječima, ako znamo s_k, onda

- nije problem naći koeficijente po dijelovima kubične interpolacije.

Ostaje nam samo pokazati kako bismo mogli birati brojeve s_k.

Tu postoje dva bitno različita načina.

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

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

Po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija

Po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija

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

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

U tom slučaju, svaki kubični polinom p_k je

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

Takva se interpolacija zove po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija.

Naziv "Hermiteova" znači: $s_k = f'_k$ su zadani ulazni podaci.

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

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

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

pri čemu je

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

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

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

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

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

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

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

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

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

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

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Kao i prije, neka je h maksimalni razmak susjednih čvorova

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

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

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

pri čemu je

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

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

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

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

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

Tada je

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

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

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

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

Primjer — po dij. kubična Hermiteova interp.

Primjer. Nađite po dijelovima kubičnu Hermiteovu interpolaciju za sljedeće podatke

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

.

Očito, treba naći dva kubična polinoma

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

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

Primjer — po dij. kubična Hermiteova interp.

Za polinom p_1 imamo sljedeću tablicu podijeljenih razlika

$$
\begin{array}{c|ccccccc}
t_j & f[t_j] & f[t_j, t_{j+1}] & f[t_j, t_{j+1}, t_{j+2}] & f[t_j, \ldots, t_{j+3}] \\
\hline
0 & 1 & & & \\
 & & 0 & & \\
0 & 1 & & 1 & \\
 & & 1 & & -1 \\
1 & 2 & & 0 & \\
 & & 1 & & \\
1 & 2 & & &
\end{array}
$$

Iz nje dobivamo

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

Primjer — po dij. kubična Hermiteova interp.

Na sličan način, za p_2 dobivamo tablicu podijeljenih razlika

t_j	$f[t_j]$	$f[t_j, t_{j+1}]$	$f[t_j, t_{j+1}, t_{j+2}]$	$f[t_j, \ldots, t_{j+3}]$
1	2			
		1		
1	2		−3	
		−2		6
2	0		3	
		1		
2	0			

pa je

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

Demo — po dij. kubična Hermiteova interp.

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

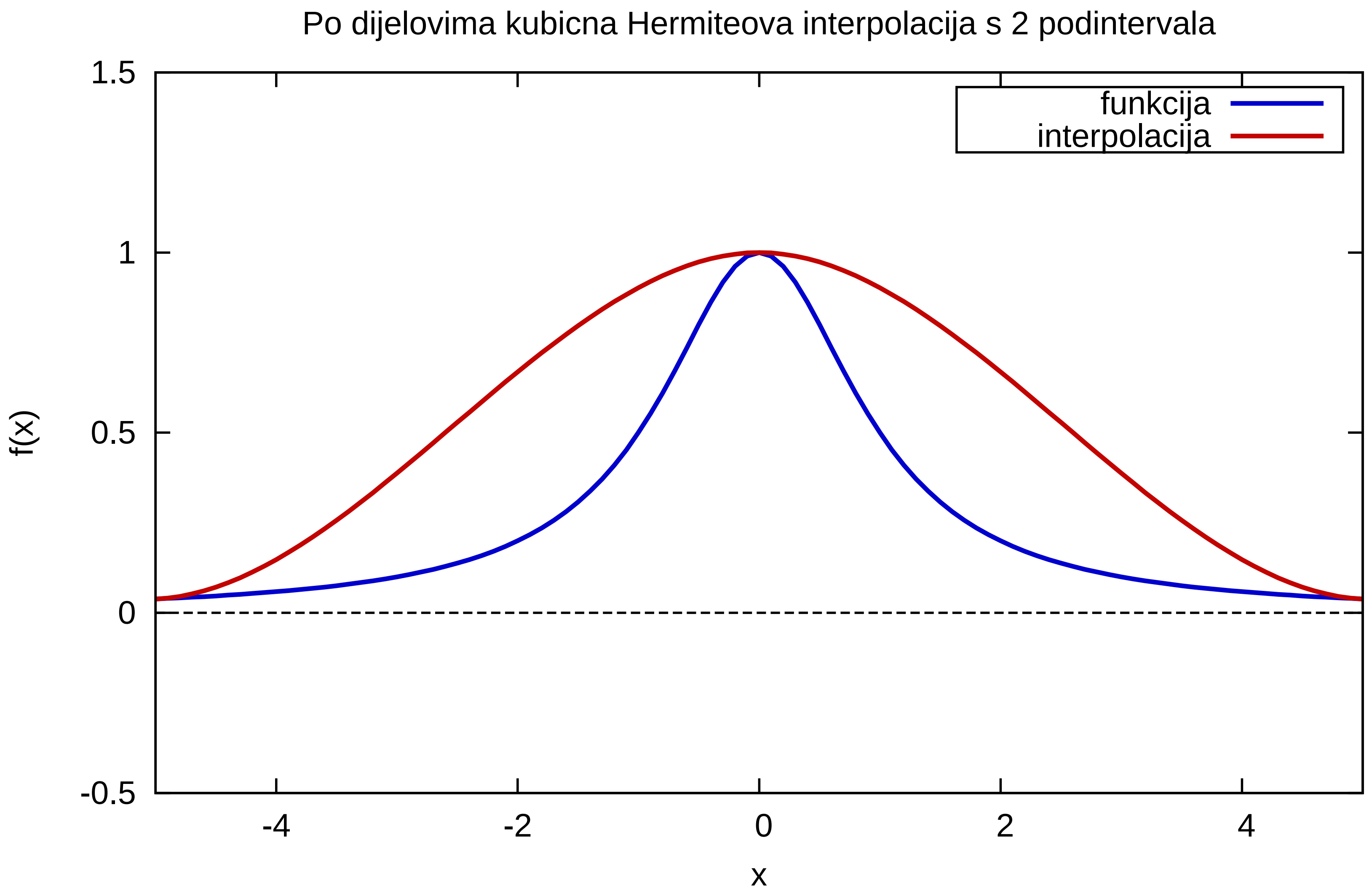
$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, \qquad x \in [-5, 5],$$

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

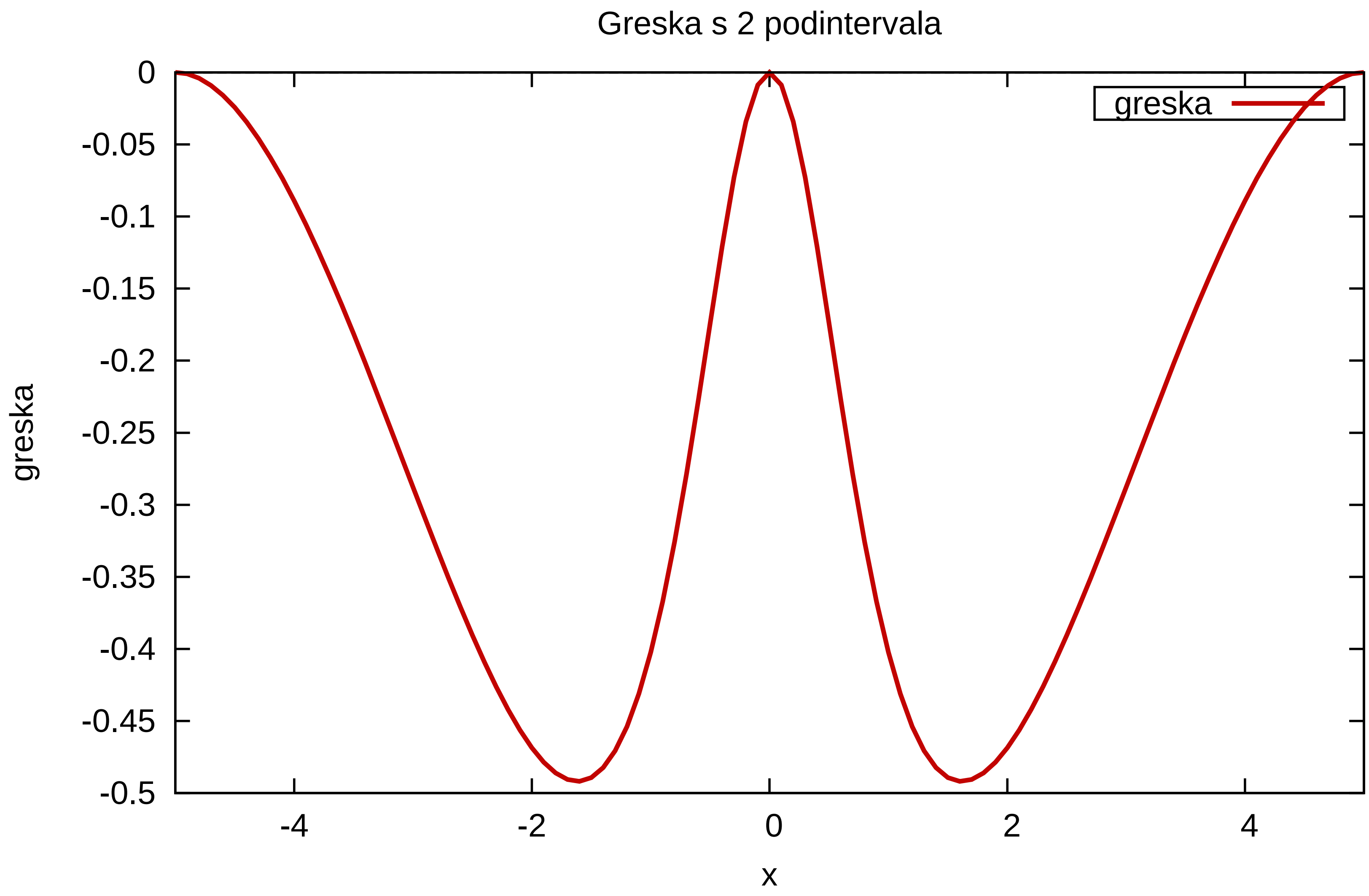
- `NM\06_F\06_GPT\PC_HERM\00_hrung.plt`

Slike interpolacija i grešaka su na sljedećim stranicama.

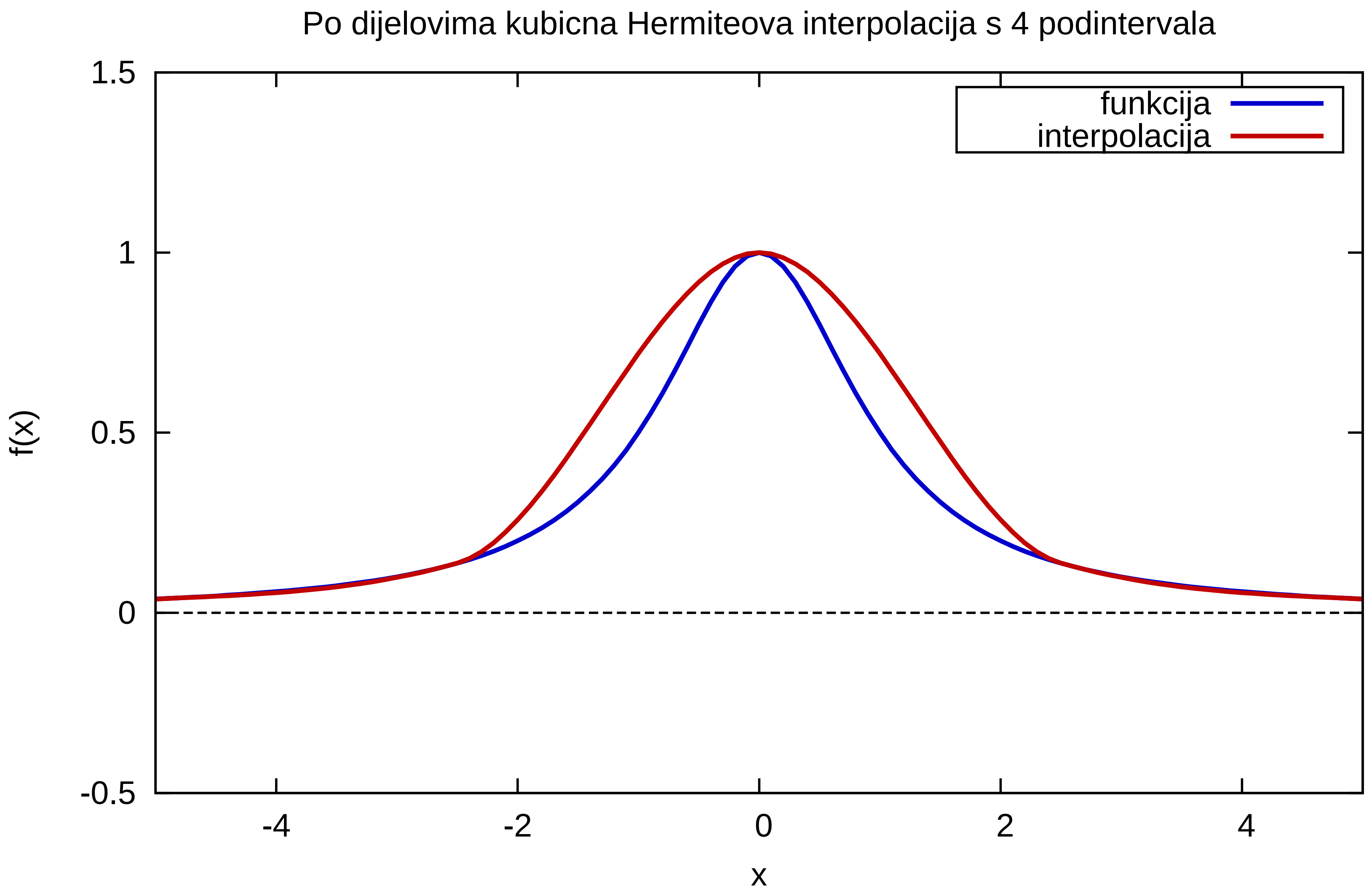
Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



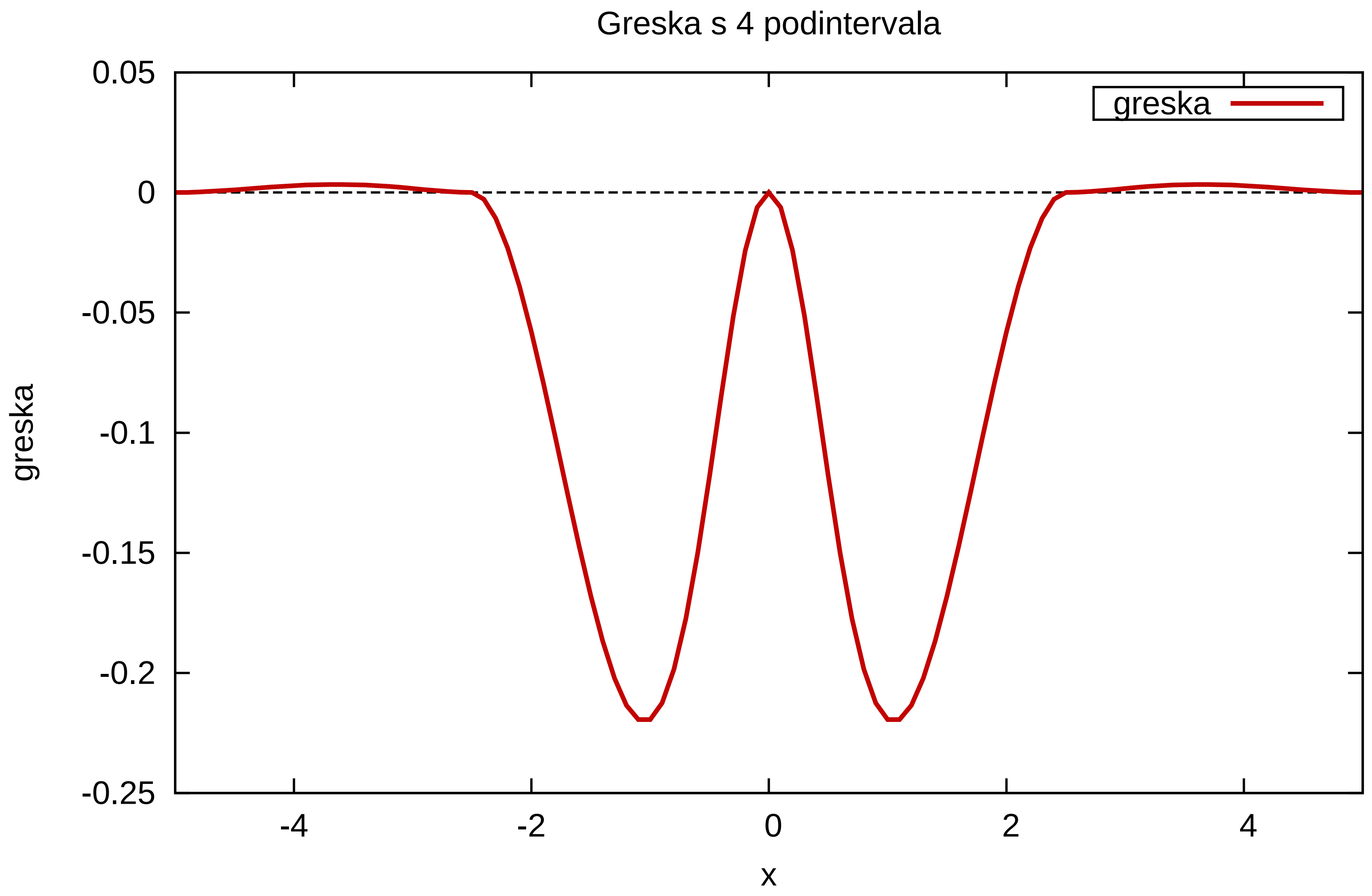
Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



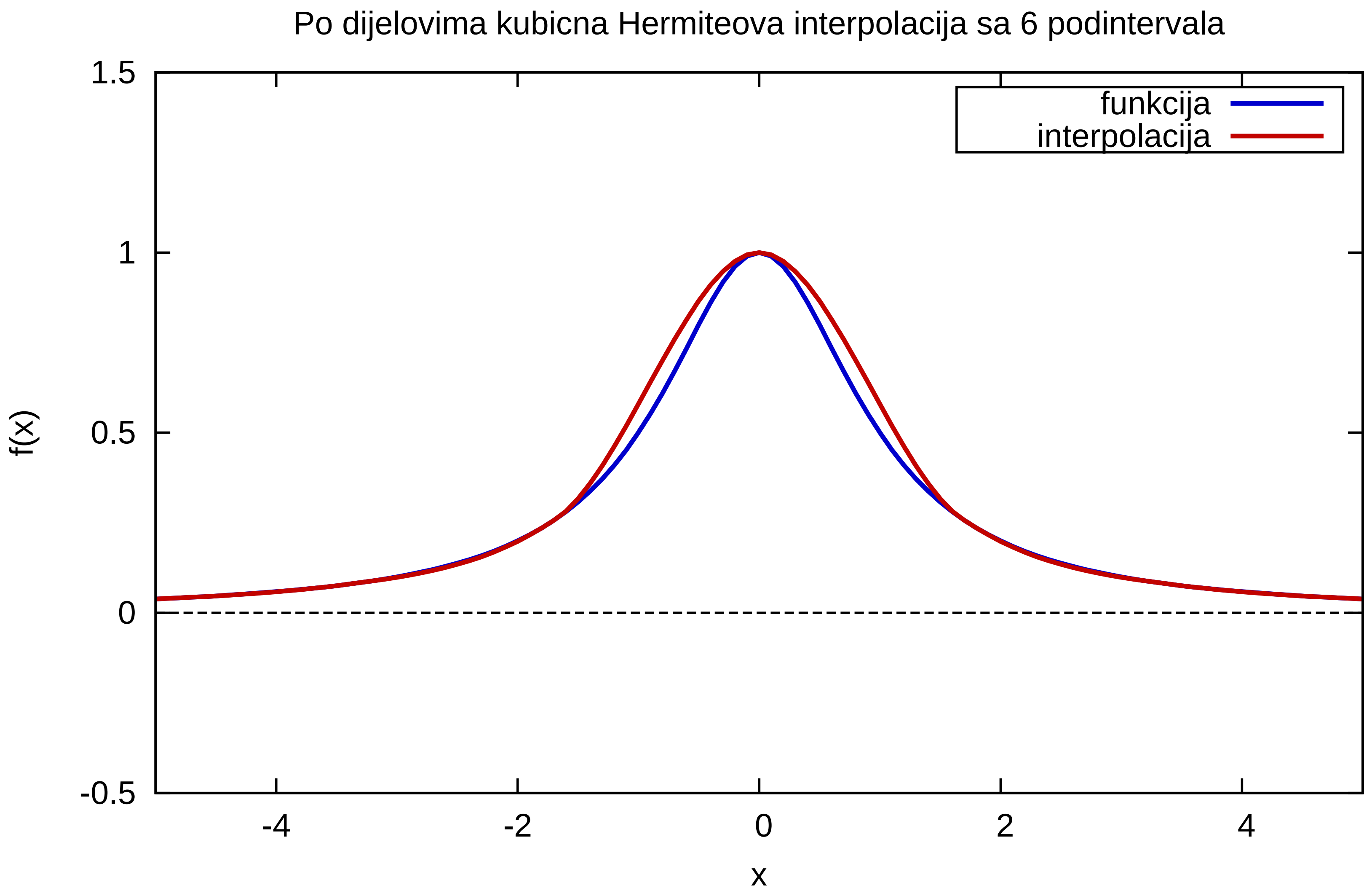
Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



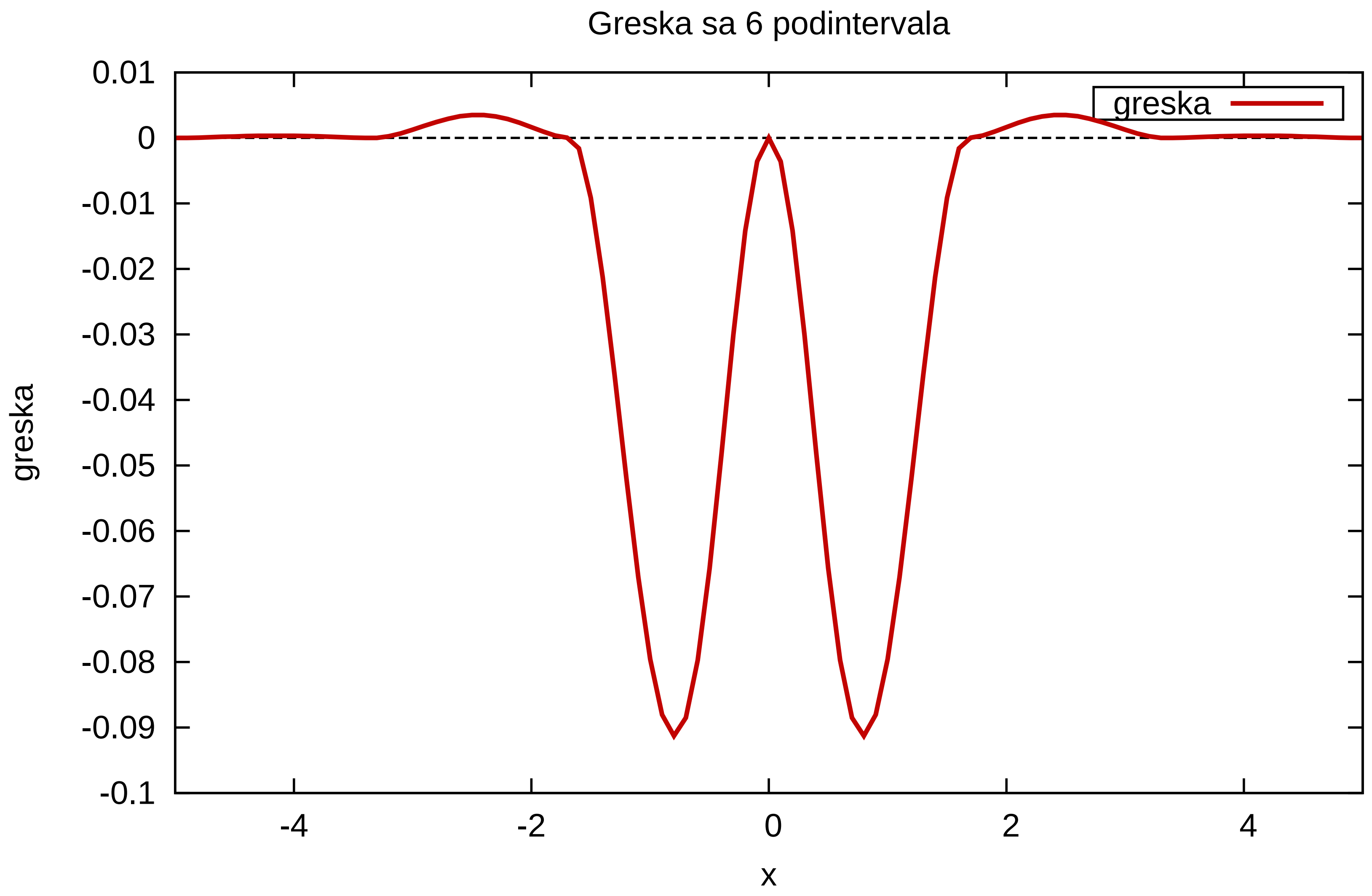
Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



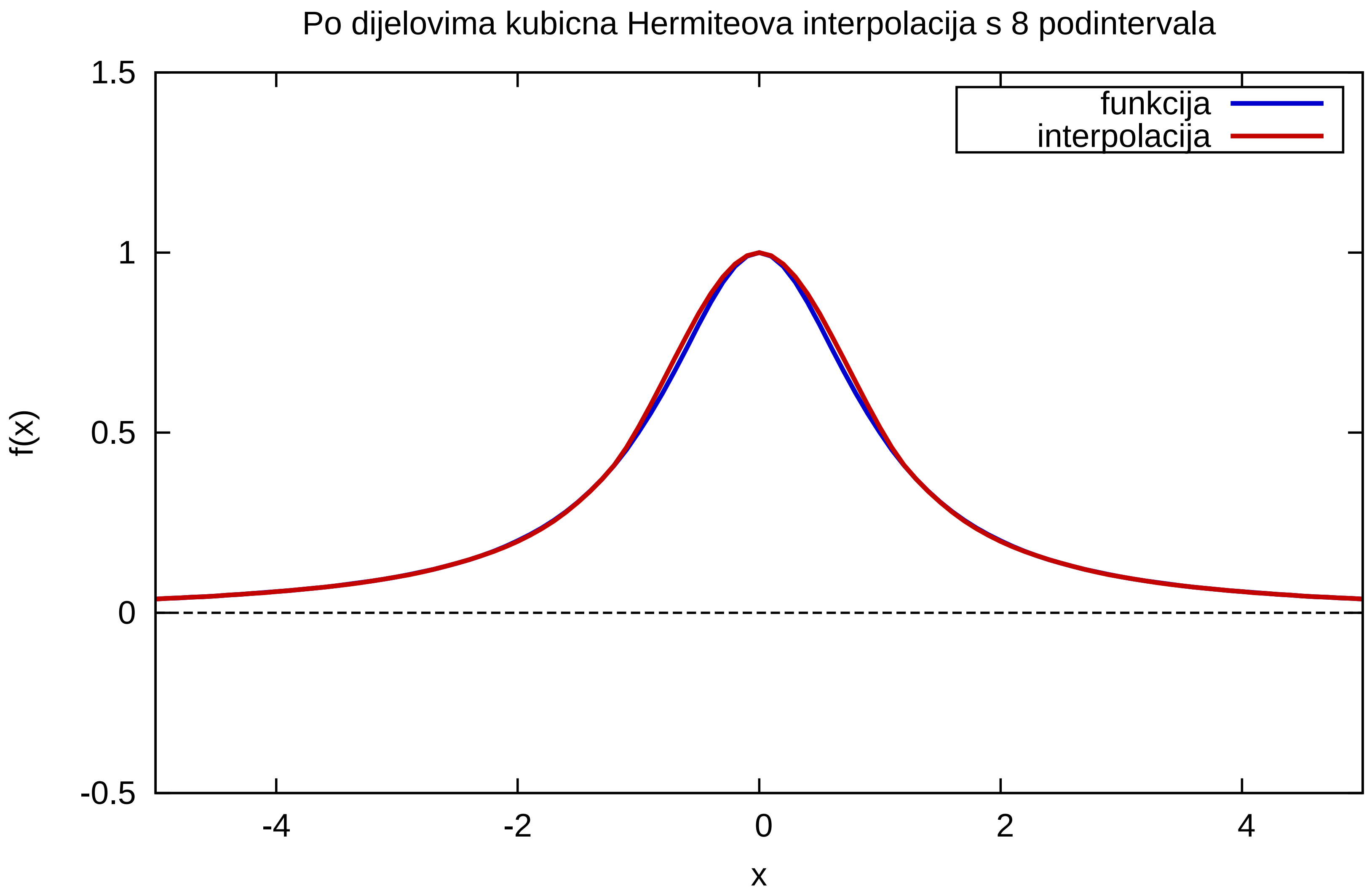
Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



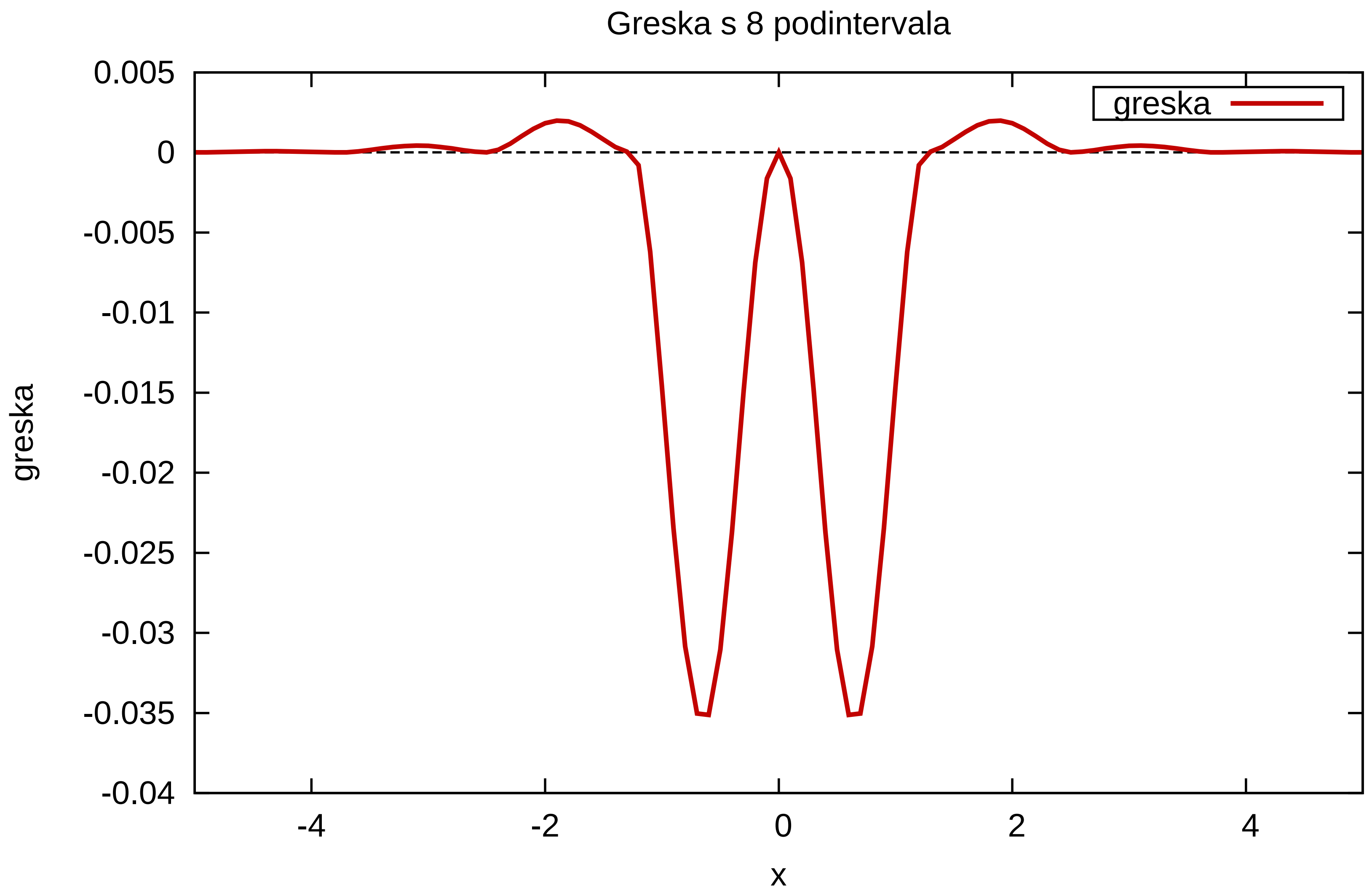
Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



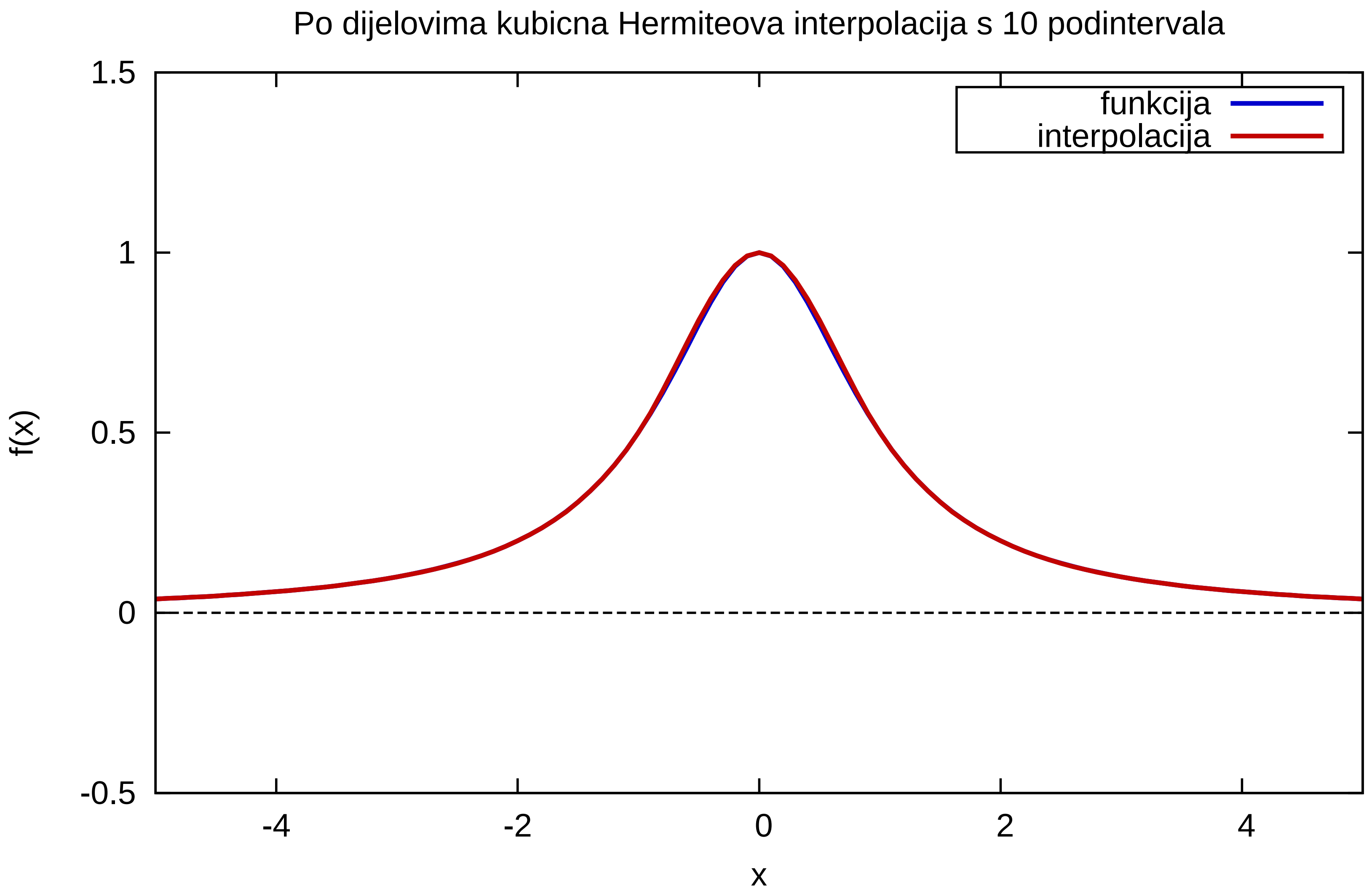
Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



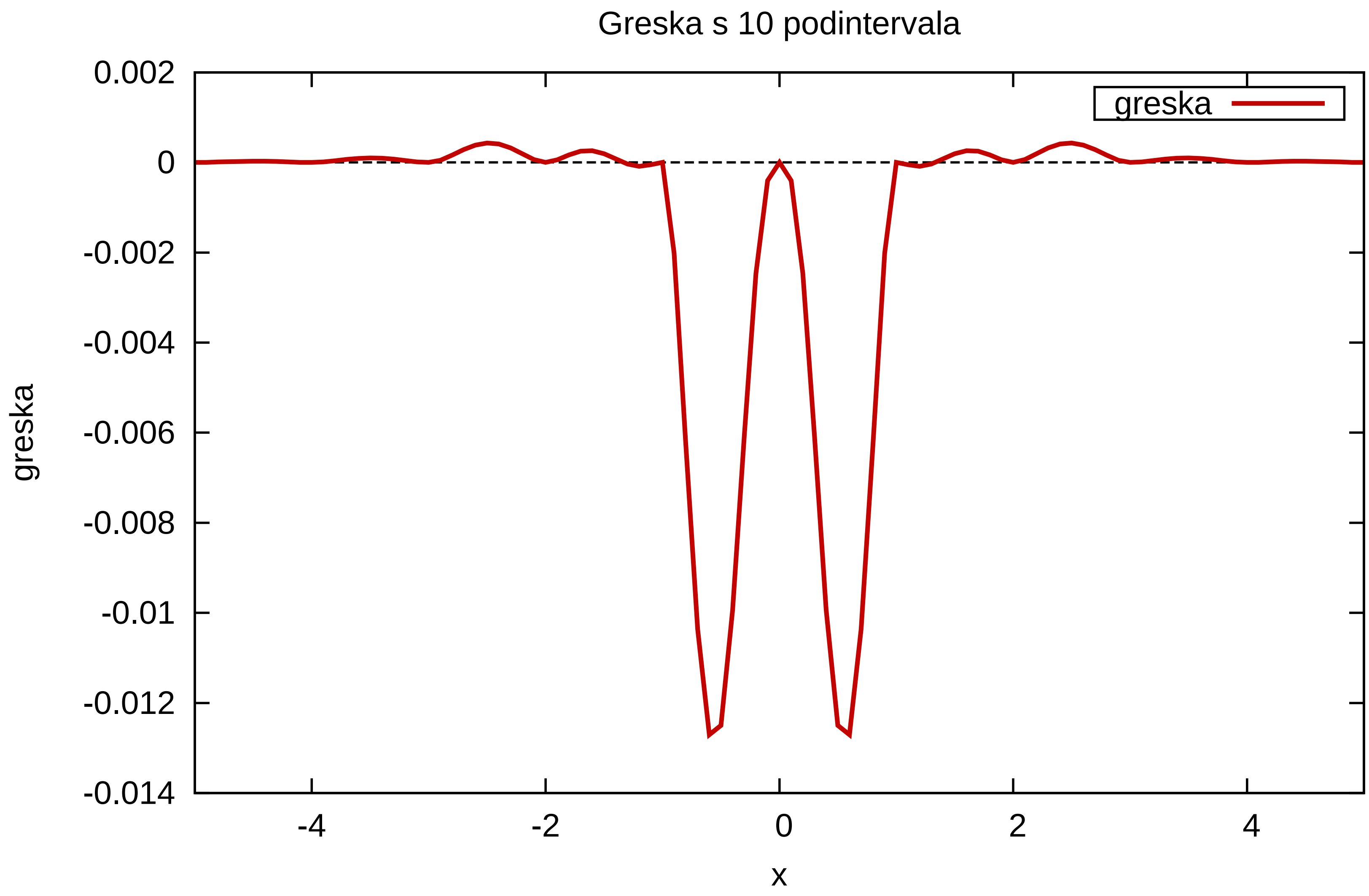
Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



Po dij. kubična Hermiteova interp. — Runge



Numeričko deriviranje

Numeričko deriviranje — problem i nestabilnost

U praksi, derivacije funkcije često nisu dostupne, već treba

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

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

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

Oprez! Numeričko deriviranje je nestabilan problem.

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

Numeričko deriviranje — primjena i ideja

Formule za numeričko deriviranje imaju dvostruku primjenu.

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

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

aproksimacija derivacije = derivacija aproksimacije (interpolacije).

Naime, jedina aproksimacija koju (zasad) znamo je

- interpolacijski polinom za funkciju f u zadanim točkama.

Usput, baš te formule se najčešće koriste.

Derivacija funkcije ≈ derivacija interp. polinoma

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

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

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

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

$$f'(x) \approx p_n'(x).$$

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

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

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

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

Greška numeričkog deriviranja iz interpolacije

Naravno, zanima nas greška ove aproksimacije

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

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

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

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

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

Greška numeričkog deriviranja iz interpolacije

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

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

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

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

  i tim točkama vrijedi da je

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

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

Greška numeričkog deriviranja iz interpolacije

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

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

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

takva da za grešku aproksimacije k-te derivacije vrijedi

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

Dokaz. Obje tvrdnje izlaze primjenom Rolleovog teorema. Dokaz druge ide isto kao za grešku interpolacije (v. skripta). ■

Greška numeričkog deriviranja — komentari

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

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

Samo točka η_k iz druge tvrdnje ovisi o x.

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

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

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

- On reprezentira ili osigurava poništavanje greške.

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

Greška numeričkog deriviranja — sažetak

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

Neka je H maksimalna udaljenost do nekog čvora

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

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

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

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

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

Greška numeričkog deriviranja — sažetak

Ako su čvorovi uzlazno poredani, kao kod splajnova,

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

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

- onda, umjesto konstante H, možemo pisati i h,

gdje je h maksimalni razmak čvorova ili tzv. dijametar mreže

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

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

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

Numeričko deriviranje — praksa

Primjena numeričkog deriviranja u praksi:

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

Dodatno, vrlo rijetko se koristi u proizvoljnoj točki x.

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

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

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

Numeričko deriviranje — u posebnim točkama

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

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

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

Kako se dobivaju posebne točke s boljom greškom?

Prvo, krećemo od jačih pretpostavki na glatkoću funkcije f.
U formulama za k-tu derivaciju, standardna pretpostavka je:

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

Numeričko deriviranje — tehnike izvoda

Tehnike za nalaženje formula, posebnih točaka i greške:

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

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

Nastavak: Formule za numeričko deriviranje i pripadnu grešku

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

Numeričko deriviranje — polinom prvog stupnja

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

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

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

Uočimo da je p_1' konstantni polinom. Prema tome,

- aproksimacija prve derivacije f' u bilo kojoj točki x

je podijeljena razlika

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

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

Podijeljene razlike "unaprijed" i "unatrag"

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

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

Za $x = x_0$, aproksimaciju prve derivacije

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

zovemo podijeljena razlika unaprijed.

Za $x = x_1$, aproksimaciju prve derivacije

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

zovemo podijeljena razlika unatrag.

"Centralna" ili "simetrična" podijeljena razlika

Ako se točka x nalazi između čvorova interpolacije x_0 i x_1, ova razlika (opet isti broj) se obično zove

- centralna ili simetrična podijeljena razlika.

Tada se čvorovi interpolacije obično označavaju s x_{-1} i x_1 (indeks sugerira relativni položaj čvorova, obzirom na x).

Dakle, za $x_{-1} < x < x_1$, aproksimaciju prve derivacije

$$f'(x) \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{x_1 - x_{-1}}$$

zovemo centralna ili simetrična podijeljena razlika.

Potpuno opravdanje naziva i stvarnu "korist" dobivamo u

- specijalnom slučaju, kad je x polovište intervala $[x_{-1}, x_1]$.

Greška podijeljene razlike

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

$$e_1'(x) = (x - \xi_{1,0})\, f''(\eta_1),$$

gdje je

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

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

$$|e_1'(x)| \leq h\, |f''(\eta_1)|.$$

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

Greška polinomne interpolacije — ponavljanje

Put do boljeg izraza za grešku ide preko greške interpolacije.

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

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

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

takva da za grešku interpolacijskog polinoma vrijedi

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

■

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

Derivacija greške interpolacije — pogrešan izvod

Probajmo! Derivacijom po x (derivacija produkta) dobivamo

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

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

Sasvim općenito, $\xi(x)$ uopće ne mora biti funkcija, a kamo li neprekidna, ili još i derivabilna funkcija! Dakle, ne tako.

Nažalost, često se nađe ovakav pogrešan/nepotpun "izvod":

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

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

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

Greška polinomne interpolacije — ponavljanje

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

Teorem. Pretpostavimo da f' postoji na segmentu $[a, b]$. Neka je p_n interpolacijski polinom za funkciju f s međusobno različitim čvorovima interpolacije $x_k \in [a, b]$, za $k = 0, \ldots, n$.

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

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

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

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

Treba nam derivacija podijeljene razlike.

Derivacija podijeljene razlike po argumentu

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

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

Ako je x višestruki čvor, multipliciteta k, onda vrijedi

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

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

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

Derivacija greške interpolacije — korektan izvod

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

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

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

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

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

Derivacija greške interpolacijskog polinoma

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

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

takve da za derivaciju greške interpolacijskog polinoma vrijedi

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

■

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

Greška derivacije interpolacijskog polinoma

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

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

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

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

za "male" H, odnosno, za $H \to 0$.

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

Greška derivacije — posebni slučajevi

U općem izrazu za grešku aproksimacije prve derivacije

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

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

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

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

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

Polinom prvog stupnja — posebna točka

Neka je p_1 interpolacijski polinom za f, s čvorovima x_0 i x_1. Ako f''' postoji na $[x_0, x_1]$, u točki $x \in [x_0, x_1]$, za grešku aproksimacije $f'(x)$ podijeljenom razlikom onda vrijedi

$$e_1'(x) = f'(x) - f[x_0, x_1] = \frac{\omega'(x)}{2!} f''(\xi) + \frac{\omega(x)}{3!} f'''(\xi_1).$$

Derivacija polinoma čvorova $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)$ je

$$\omega'(x) = 2x - (x_0 + x_1) = 2\left(x - \frac{x_0 + x_1}{2}\right).$$

Ako je točka x polovište intervala $[x_0, x_1]$, onda je $\omega'(x) = 0$ i tada nema prvog člana

$$\omega'(x) \frac{f''(\xi)}{2!}.$$

Greška podijeljene razlike i simetrične razlike

Neka je $h = x_1 - x_0$ dijametar mreže. U "općoj" točki $x \in [x_0, x_1]$, iz $|\omega'(x)| \leq h$ i $|\omega(x)| \leq h^2/4$, dobivamo ocjenu

$$\big|\, f'(x) - f[x_0, x_1] \,\big| \leq \frac{h}{2}\, |f''(\xi)| + \frac{h^2}{24}\, |f'''(\xi_1)|.$$

Ako je $x = x_0$ ili $x = x_1$ (čvor), onda nema drugog člana.

U polovištu $x_e = (x_0 + x_1)/2$, ostaje samo drugi član, pa je

$$\big|\, f'(x_e) - f[x_0, x_1] \,\big| \leq \frac{h^2}{24}\, |f'''(\xi_1)|.$$

Dakle, greška u polovištu je reda veličine $O(h^2)$, a u svim ostalim točkama je $O(h)$. Tu se vidi prava "korist"

- simetrične ili centralne razlike — kad je zaista simetrična!

Numeričko deriviranje u čvorovima interpolacije

Numeričko deriviranje u čvoru interpolacije

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

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

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

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

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

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

Numeričko deriviranje u čvoru interpolacije

Za derivaciju produkta linearnih faktora u točki x_0 vrijedi

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

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

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

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

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

Numeričko deriviranje — linearni polinom

Pokažimo kako se ta formula ponaša za niske stupnjeve n.

Stupanj $n = 1$. (Ponavljanje.)

Aproksimacija derivacije u čvoru x_0 je podijeljena razlika (unaprijed ili unatrag, ovisno o tome gdje je čvor x_1)

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

Uz pretpostavku da je $f \in C^3[x_0, x_1]$, pripadna greška je

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

Greška je reda veličine $O(h)$ za $h \to 0$.

Numeričko deriviranje — kvadratni polinom

Stupanj $n = 2$. Ovdje gledamo samo ekvidistantne mreže, za ilustraciju ponašanja greške (opći slučaj je kasnije, v. Bessel).

Točke x_1, x_2 možemo uzeti na više raznih načina, obzirom na čvor x_0 — simetrično oko x_0 ili s iste strane x_0.

1. Simetrični izbor točaka

Izaberemo x_1 i x_2 simetrično oko x_0 (desno i lijevo), tako da je

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

Sugestivnija oznaka je

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

jer se točke pišu u prirodnom redosljedu: x_{-1}, x_0, x_1. Onda je

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

Numeričko deriviranje — simetrične točke

Izračunajmo potrebne podijeljene razlike.

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

Aproksimacija derivacije u srednjem čvoru x_0 je

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

Uočiti: U ovoj formuli se ne pojavljuje f_0 (koef. uz f_0 je nula).

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

Rezultat je simetrična ili centralna podijeljena razlika, tj.

- ista aproksimacija kao iz linearne interpolacije p_1, s čvorovima x_{-1} i x_1 (udaljenost je ovdje $2h$, a ne h).

Ovdje deriviramo kvadratni polinom p_2 u čvoru x_0, pa u izrazu za grešku simetrične razlike ostaje samo prvi član

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

Dobivamo isti izraz za grešku kao iz p_1 (ovaj h je pola ranijeg)!

Simetrična razlika u polovištu x_0 i manja greška, obzirom na "obične" podijeljene razlike, može se gledati na dva načina:

- x_0 je posebna točka za p_1 ili čvor kvadratnog polinoma p_2.

Numeričko deriviranje — točke s iste strane

2. Točke x_1 i x_2 s iste strane x_0

Stavimo x_1 i x_2 (na primjer) desno od x_0, tako da je

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

I ovdje su točke ekvidistantne, ali deriviramo u najljevijoj, a ne u srednjoj točki. Tablica potrebnih podijeljenih razlika je

t_j	$f[t_j]$	$f[t_j, t_{j+1}]$	$f[t_j, t_{j+1}, t_{j+2}]$
x_0	f_0		
		$\dfrac{f_1 - f_0}{h}$	
x_1	f_1		$\dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}$
		$\dfrac{f_2 - f_1}{h}$	
x_2	f_2		

Numeričko deriviranje — točke s iste strane

Aproksimacija derivacije u lijevom čvoru x_0 je

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

Pripadna greška je

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

Greška je istog reda veličine $O(h^2)$, kao u simetričnom slučaju. Međutim, konstanta je ovdje dvostruko veća ($-1/6 \mapsto 1/3$).

Numeričko deriviranje — druga derivacija

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

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

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

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

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

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

Numeričko deriviranje — zaključci

Formula za derivaciju postaje sve točnija,

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

Međutim, to vrijedi samo u teoriji.

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

Osnovu numeričkog deriviranja čine podijeljene razlike.

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

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

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

Numeričko deriviranje — ilustracija problema

Ilustrirajmo to analizom simetrične (ili centralne) razlike,

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

Pretpostavimo da smo, umjesto vrijednosti f_{-1} i f_1, uzeli malo perturbirane vrijednosti (u apsolutnom smislu, da bude lakše)

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

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

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

Koliko malen smije biti h?

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

Radi jednostavnosti analize, pretpostavimo da je

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

U tom je slučaju napravljena ukupna greška

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

Ogradimo err_2 po apsolutnoj vrijednosti. Greška u prvom članu je najveća, ako su ε_1 i ε_{-1} suprotnih predznaka i maksimalne apsolutne vrijednosti ε — dobijemo $\pm(2\varepsilon)/(2h)$.

Koliko malen smije biti h?

Za drugi član koristimo ocjenu za $e_2'(x_0)$, uz pretpostavku da je f''' neprekidna na $[a, b]$. Zbrajanjem ovih ocjena dobivamo

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

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

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

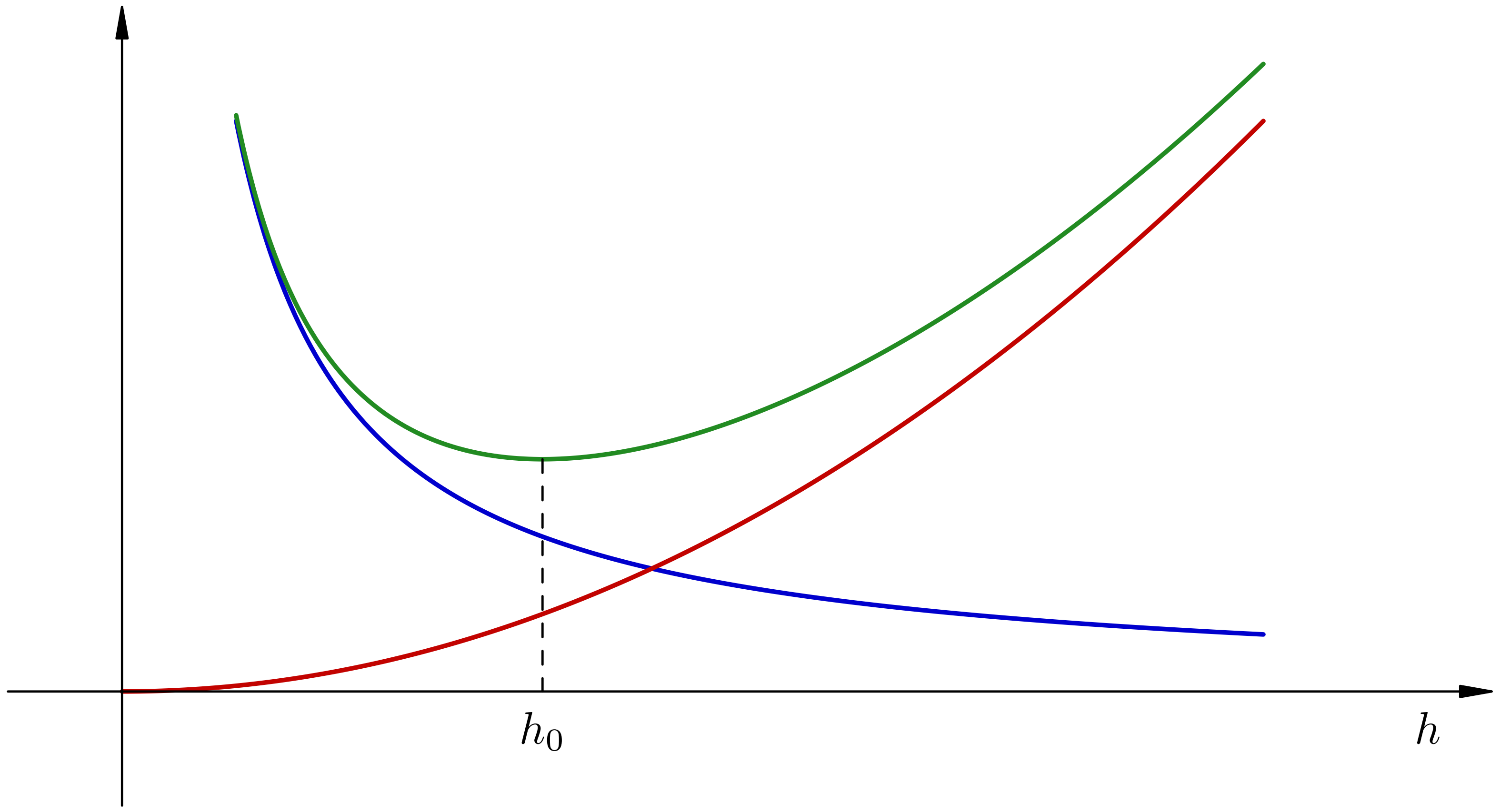
Ponašanje ove ocjene i njezina dva člana, u ovisnosti o h, možemo prikazati sljedećim grafom.

Koliko malen smije biti h?

Legenda:

- plava boja — prvi član ε/h, oblika hiperbole, koji dolazi od greške u podacima,
- crvena boja — drugi član $(M_3/6)h^2$, oblika parabole, koji predstavlja maksimalnu grešku aproksimacije derivacije simetričnom podijeljenom razlikom,
- zelena boja — označava zbroj grešaka $e(h)$.

Optimalni h_0



Optimalni h_0 i minimum ukupne greške

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

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

izlazi da se lokalni minimum postiže za

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

Zbog $e''(h) > 0$ za $h > 0$, to je, ujedno, i globalni minimum. Najmanja vrijednost funkcije ukupne greške je

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

Ukupna greška koju ne očekujemo

Vidimo da, i u najboljem slučaju,

- kad je ukupna greška najmanja (za $h = h_0$), ta je greška reda veličine $O(\varepsilon^{2/3})$, a ne $O(\varepsilon)$, kao što bismo željeli.

To predstavlja značajni gubitak točnosti. Posebno,

- daljnje smanjivanje koraka h samo povećava grešku!

Isti problem se javlja, u još ozbiljnijem obliku, kod formula za aproksimaciju derivacija višeg reda.

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

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

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

Po dijelovima kubična kvazihermiteova interpolacija

Po dijelovima kubična kvazihermiteova interp.

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

- nemamo zadane prve derivacije ($s_k = f_k'$),

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

U tom slučaju,

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

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

- koliko je "dobra" aproksimacija derivacije.

Podijeljene razlike unaprijed

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

- unaprijed (do na posljednju, koja je unatrag), ili
- unazad (do na prvu, koja je unaprijed),

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

Ako koristimo podijeljene razlike unaprijed, onda je

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

Podijeljene razlike unazad

Ako koristimo podijeljene razlike unazad, onda je

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

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

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

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

Simetrične razlike kao aproksimacije derivacije

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

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

Greška, obzirom na obične podijeljene razlike,

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

Besselova aproksimacija derivacija

Postoje i bolje aproksimacije derivacija, a pripadne po dijelovima kubične kvazihermiteove interpolacije obično dobivaju ime po načinu aproksimacije derivacija.

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

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

Pripadna kvazihermiteova interpolacija zove se

- Besselova po dijelovima kubična interpolacija.

U prvoj i posljednjoj točki ne možemo postupiti tako,

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

Besselova aproksimacija derivacija (nastavak)

Derivaciju u x_0 aproksimiramo tako da povučemo

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

Slično, derivaciju u x_n aproksimiramo tako da povučemo

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

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

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

Besselova aproksimacija derivacija — sredina

Deriviranjem i uvrštavanjem x_k dobivamo

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

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

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

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

tj. s_k je težinska srednja vrijednost podijeljene razlike unatrag i unaprijed, s pozitivnim težinama h_{k+1} i h_k.
Za $h_k = h_{k+1}$ dobivamo simetričnu razliku $s_k = f[x_{k-1}, x_{k+1}]$.

Besselova aproksimacija derivacija — početak

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

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

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_0 dobivamo

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

Ovdje, težine uz podijeljene razlike imaju suprotne predznake.

Besselova aproksimacija derivacija — kraj

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

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

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_n dobivamo

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

Besselova aproksimacija derivacija — greška

Dakle, za Besselovu po dijelovima kubičnu interpolaciju stavljamo

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

Greška je reda veličine

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

Akimina aproksimacija derivacija — sredina

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

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

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

uz

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

i

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

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

Akimina aproksimacija derivacija — rubovi

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

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

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

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

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

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

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

Akimina aproksimacija derivacija — rubovi

Odatle slijedi da je

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

odnosno

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

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

Slično dobivamo i relaciju za s_n na desnom rubu

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

Akimina aproksimacija derivacija — greška

Akimin algoritam (CACM ili TOMS Algorithm 433)

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

Za neekvidistantne točke, greška

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

Ako su točke ekvidistantne, onda je greška

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

Akimina aproksimacija derivacija — osnovni cilj

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

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

Ostaje još pitanje kako postići vizuelnu "glatkoću"?

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

Druge aproksimacije derivacija

Aproksimacija derivacije može se napraviti još i bolje, tako da

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

Na rubovima postupamo kao kod Besselove aproksimacije.

Takvim postupkom možemo dobiti grešku

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

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

Zaključak — lokalnost interpolacije

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

- tj. promjenom jedne točke (x_k, f_k) ili podatka f_k,
- promijenit će se samo nekoliko susjednih kubičnih polinoma.

Točno koliko, ovisi o tome

- koju smo aproksimaciju derivacije izabrali.