Numerička analiza

15. predavanje

Autor: Tina Bosner & Saša Singer

Predavač: Tina Bosner

tinab@math.hr

web.math.hr/~nela/nad.html

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Polinomna splajn interpolacija
  - B-splajn.
  - Interpolacija splajnom.
  - Primjeri interpolacije B-splajnom.
- Aproksimacije derivacija i numeričko deriviranje.

Demo primjeri

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 demo primjere.

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!

Polinomna splajn interpolacija

Po djelovima polinomna interpolacija

Polinomna interpolacija visokog stupnja

- može imati vrlo loša svojstva,
- u praksi se ne smije koristiti.

Umjesto toga, koristi se

- po djelovima polinomna interpolacija, tj. na svakom podintervalu koristi se polinom fiksnog, niskog stupnja.
- Funkcija je jednostavnija koja daje
- dobru aproksimaciju, a
- točnost se povečava ne povečavanjem stupnja polinoma.

B-splajn

Po djelovima polinomna funkcija

Neka je dan strogo rastući niz točaka (čvorova) $\mathbf{X} := (x_i)_{i=0}^{\ell}$:

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_\ell = b$$

i neka je $k \in \mathbb{N}$. Ako je $p_0, \ldots, p_{\ell-1}$ bilo koji niz od ℓ polinoma reda k (stupnja $k-1$), tada definiramo odgovarajuću po djelovima polinomnu (polinomnu splajn) funkciju f sa

$$f(x) := p_i(x) \text{ za } x \in [x_i, x_{i+1}\rangle, \ i = 0, \ldots, \ell - 1.$$

Dakle, po dogovoru

- f je neprekidna s desna,
- a obično se zadnji podinterval proširi i na x_ℓ, pa imamo

$$f(x) := p_{\ell-1}(x) \text{ za } x \in [x_{\ell-1}, x_\ell].$$

Prostor polinomnih splajnova

Prostor ovakvih funkcija označavamo sa $\mathcal{P}_{k,\mathbf{x}}$, on je linearan i dimenzija mu je $k \cdot \ell$. Ipak se još traži i neka glatkoća splajna, i to tako da se definiraju uvjeti glatkoće u čvorovima:

$$f^{(j)}(x_i^+) = f^{(j)}(x_i^-) \text{ za } j = 0, \ldots, \nu_i - 1, \; i = 1, \ldots, \ell - 1.$$

ν_i zovemo broj uvjeta neprekidnosti u x_i i $\boldsymbol{\nu} = (\nu_i)_{i=1}^{\ell-1}$. Prostor takvih splajnova označavamo sa $\mathcal{P}_{k,\mathbf{x},\boldsymbol{\nu}}$, a

$$\dim \mathcal{P}_{k,\mathbf{x},\boldsymbol{\nu}} = k \cdot \ell - \sum_{i=1}^{\ell-1} \nu_i, \quad \nu_i \leqslant k.$$

Postavlja se pitanje odabira dobre baze za taj prostor.

B-splajn

Definicija. Neka je $\mathbf{T} := (t_i)_{i=1}^{n+k}$ nepadajući niz čorova, tada i-ti (normalizirani) B-splajn reda k za niz čvorova $\mathbf{T}$ označavamo s $B_{i,k,\mathbf{T}}$ i definiramo sa

$$B_{i,k,\mathbf{T}}(x) := (-1)^k (t_{i+k} - t_i)(x - t)_+^{k-1}[t_i, \ldots, t_{i+k}],$$

za $\forall x \in \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, n$, gdje se odsječena potencija $(\cdot)_+^r$ definira sa

$$(x)_+^r := \begin{cases} 0 & x < 0 \\ x^r & x \geqslant 0 \end{cases}$$

za $r = 1, 2, \ldots,$ a za $r = 0$ sa

$$(x)_+^0 := \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x \geqslant 0 \end{cases}.$$

Proširena particija

Neka je $\mathbf{T}$ dan sa:

$$
\begin{aligned}
t_1 \leqslant \cdots \leqslant t_k = x_0 = a, \\
t_{k+1} \leqslant \cdots \leqslant t_{k+M} = \underbrace{x_1, \ldots, x_1}_{m_1}, \ldots, \underbrace{x_{\ell-1}, \ldots, x_{\ell-1}}_{m_{\ell-1}}, \\
b = x_\ell = t_{k+M+1} \leqslant \cdots \leqslant t_{2k+M},
\end{aligned}
$$

gdje su m_i, $0 < m_i \leqslant k$, multipliciteti čvorova, $\mathbf{m} = (m_1, \ldots, m_{\ell-1})$, i $M := \sum_{i=1}^{\ell-1} m_i$. Nadalje, neka je $\nu_i = k - m_i$ i $n = k + M$, tada se prostor razapet B-splajnovima označava sa $\mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}$, dimenzija mu je n, i može se pokazati da je

$$
\mathcal{S}_{k,\mathbf{T}} = \mathcal{P}_{k,\mathbf{x},\boldsymbol{\nu}}.
$$

Proširena particija (nastavak)

Niz čvorova $\mathbf{T}$ zove se proširena particija particije $\mathbf{X}$. Najčešće se uzima

$$t_1 = \cdots = t_k = a \text{ i } t_{n+1} = \cdots = t_{n+k} = b.$$

Može se još proširiti definicija B-splajnova na slučaj kada je $t_i = \cdots = t_{i+k}$, tada je

$$B_{i,k,\mathbf{T}} :\equiv 0.$$

Kada je jasno na koju se proširenu particiju B-splajnovi odnose, možemo skratiti oznaku:

$$B_{i,k} := B_{i,k,\mathbf{T}}.$$

B-splajnovi se računaju pomoću rekurzije, koja koji put služi kao alternativna definicija B-splajnova:

de Boor–Cox-ova rekurzija

Teorem (de Boor–Cox-ova rekurzija).

a) Za $t_i < t_{i+1}$ je

$$B_{i,1}(x) = \begin{cases} 1, & \text{ako je } t_i \leqslant x < t_{i+1} \\ 0, & \text{inače}, \end{cases} \tag{1}$$

b) Neka je $k \geqslant 2$ i $t_i < t_{i+k}$, tada za svaki $x \in \mathbb{R}$ vrijedi

$$B_{i,k} = \omega_{i,k} B_{i,k-1} + (1 - \omega_{i+1,k}) B_{i+1,k-1}, \tag{2}$$

$$\omega_{i,k}(x) = \begin{cases} \frac{x - t_i}{t_{i+k-1} - t_i}, & \text{ako je } t_i \neq t_{i+k-1} \\ 0, & \text{inače}, \end{cases}$$

de Boor–Cox-ova rekurzija (nastavak)

Dokaz. Dio a) slijedi direktno iz definicije. Za $k = 1$, uz $t_i < t_{i+1}$, ona daje

$$\begin{aligned} B_{i,1}(x) &= -(t_{i+1} - t_i)(x - t)_+^0[t_i, t_{i+1}] \\ &= -(x - t_{i+1})_+^0 + (x - t_i)_+^0, \end{aligned}$$

pa za $x < t_i$ imamo

$$B_{i,1}(x) = -0 + 0 = 0,$$

za $t_i \leqslant x < t_{i+1}$ imamo

$$B_{i,1}(x) = -0 + 1 = 1,$$

dok je za $x \geqslant t_{i+1}$

$$B_{i,1}(x) = -1 + 1 = 0.$$

de Boor–Cox-ova rekurzija (nastavak)

Za b) primjetimo da je

$$(x-t)_+^{k-1} = (x-t)\cdot(x-t)_+^{k-2},$$

pa ako primjenimo Leibnizovu formulu za podijeljenu razliku produkta funkcija dobivamo

$$\begin{aligned}
(x-t)_+^{k-1}[t_i,\ldots,t_{i+k}] &= \left((x-t)(x-t)_+^{k-2}\right)[t_i,\ldots,t_{i+k}] \\
&= \sum_{r=i}^{i+k}(x-t)[t_i,\ldots,t_r]\cdot(x-t)_+^{k-2}[t_r,\ldots,t_{i+k}] \\
&= (x-t)[t_i]\cdot(x-t)_+^{k-2}[t_i,\ldots,t_{i+k}] \\
&\quad +(x-t)[t_i,t_{i+1}]\cdot(x-t)_+^{k-2}[t_{i+1},\ldots,t_{i+k}],
\end{aligned}$$

de Boor–Cox-ova rekurzija (nastavak)

jer je $(x-t)$ polinom prvog stupnja pa je $(x-t)[t_i,\ldots,t_r]=0$ za $r \geqslant i+2$. Odatle, uz pomoć rekurzije za podijeljene razlike, slijedi:

$$\begin{aligned}
B_{i,k}(x) &= (-1)^k (t_{i+k}-t_i)(x-t)_+^{k-1}[t_i,\ldots,t_{i+k}] \\
&= (-1)^k (t_{i+k}-t_i)\Big((x-t_i)\cdot(x-t)_+^{k-2}[t_i,\ldots,t_{i+k}] \\
&\quad -(x-t)_+^{k-2}[t_{i+1},\ldots,t_{i+k}]\Big) \\
&= (-1)^k (t_{i+k}-t_i)\left(\frac{x-t_i}{t_{i+k}-t_i}\big((x-t)_+^{k-2}[t_{i+1},\ldots,t_{i+k}]\right. \\
&\quad \left. -(x-t)_+^{k-2}[t_i,\ldots,t_{i+k-1}]\big) - (x-t)_+^{k-2}[t_{i+1},\ldots,t_{i+k}]\right)
\end{aligned}$$

de Boor–Cox-ova rekurzija (nastavak)

$$= (-1)^{k-1}\Big((x-t_i)(x-t)_+^{k-2}[t_i,\ldots,t_{i+k-1}]$$

$$+(t_{i+k-1}-x)(x-t)_+^{k-2}[t_{i+1},\ldots,t_{i+k}]\Big)$$

$$= \frac{x-t_i}{t_{i+k-1}-t_i}B_{i,k-1}(x) + \frac{t_{i+k}-x}{t_{i+k}-t_{i+1}}B_{i+1,k-1}(x).$$

U zadnjem redu zapravo pretpostavljamo $t_i < t_{i+k-1}$ i $t_{i+1} < t_{i+k}$. Ako jedna od nejednakosti ne vrijedi, onda je jedan od $B_{i,k-1}$ ili $B_{i+1,k-1}$ jednak nul funkciji pa se koristi "de Boor-ova maksima" koja kaže da bilo što pomnoženo s nulom daje nulu.

Svojstva B-splajnova

Neka važna svojstva:

Teorem. B-splajnovi za $t_i < t_{i+k}$ su nenegativni, malog nosača i čine particiju jedinice, tj.

a) $B_{i,k}(x) = 0$, za $x < t_i$ i $x > t_{i+k}$,

b) $B_{i,k}(x) > 0$, za $t_i < x < t_{i+k}$, iz čega slijedi

$$\operatorname{supp} B_{i,k} \subseteq [t_i, t_{i+k}].$$

c) $\sum_{i=1}^{n} B_{i,k}(x) = 1$, za svaki $x \in [a, b]$.

Dokaz. Prvo ćemo dokazati a).

- Iz definicija "plus" funkcije i podijeljenih razlika, jasno je da je $B_{i,k} = 0$ za $x < t_i$, jer je $(x - t)_+^{k-1} = 0$, što vrijedi i za njegove derivacije, za svaki $t = t_j$, $j = i, \ldots, i + k$.

Svojstva B-splajnova (nastavak)

- Sa druge strane, za $x > t_{i+k}$ imamo k-tu podijeljenu razliku polinoma $(x-t)^{k-1}$, koja je jednaka nuli.

Dokaz za b) ide indukcijom po k.

- Za $k = 1$ i $t_i < t_{i+1}$ imamo (1).
- Pretpostavimo da tvrdnja vrijedi za B-splajnove reda $k-1$. Tada za $t_i < x < t_{i+k}$ iz rekurzije (2) $B_{i,k}$ se dobiva linearnom kombinacijom s pozitivnim koeficijentima (u slučaju kada je $t_i < t_{i+k-1}$ i $t_{i+1} < t_{i+k}$) dvaju nenegativnih $B_{i,k-1}$ i $B_{i+1,k-1}$, od kojih je barem jedan pozitivan. Dakle, tvrdnja vrijedi i za $B_{i,k}$.

Dokaz za c) također ide indukcijom po k.

- Tvrdnja je trivijalna za $k = 1$.

Svojstva B-splajnova (nastavak)

- Pretpostavimo da tvrdnja vrijedi za B-splajnove reda $k-1$. Tada iz rekurzije (2) i a) za $x \in [t_j, t_{j+1}\rangle$ imamo

$$\begin{aligned}
\sum_i B_{i,k}(x) &= \sum_{i=j+1-k}^{j} B_{i,k}(x) \\
&= \sum_{i=j+1-k}^{j} \frac{x-t_i}{t_{i+k-1}-t_i} B_{i,k-1}(x) + \sum_{i=j+1-k}^{j} \frac{t_{i+k}-x}{t_{i+k}-t_{i+1}} B_{i+1,k-1}(x) \\
&= \sum_{i=j+1-k}^{j} \frac{x-t_i}{t_{i+k-1}-t_i} B_{i,k-1}(x) + \sum_{i=j+2-k}^{j+1} \frac{t_{i+k-1}-x}{t_{i+k-1}-t_i} B_{i,k-1}(x) \\
&= \sum_{i=j+2-k}^{j} B_{i,k-1}(x) = 1.
\end{aligned}$$

Svojstva B-splajnova (nastavak)

- B-splajn za koji vrijedi $B_{i,k}(t_i) > 0$ ili $B_{i,k}(t_{i+k}) > 0$ je onaj kojem je prvi ili zadnji čvor maksimalnog multipliciteta, tj. multipliciteta k. U najčešćem slučaju, kada je $t_1 = \cdots = t_k$ i $t_{n+1} = \cdots = t_{n+k}$, to će vrijediti za prvi i zadnji B-splajn.
- Tada, iz de Boor–Cox-ove rekurzije, ili iz vrijednosti B-splajna i njegovih derivacija u krajnjim točkama, imamo

$$B_{1,k} = \frac{(t_{k+1} - x)^{k-1}}{(t_{k+1} - t_k)^{k-1}},$$

i za njega vrijedi

$$B_{1,k}(t_k) = 1, \quad B_{1,k}^{(i)}(t_{k+1}) = 0, \text{ za } i = 0, \ldots, k-2.$$

Svojstva B-splajnova (nastavak)

- Analogno je
$$B_{n,k} = \frac{(x - t_n)^{k-1}}{(t_{n+1} - t_n)^{k-1}},$$
te
$$B^{(i)}_{n,k}(t_n) = 0, \text{ za } i = 0, \ldots, k-2, \quad B_{n,k}(t_{n+1}) = 1.$$

Teorem. Ako niti jedan od čvorova iz nosača B-splajna $B_{i,k}$ nije multipliciteta k, $B_{i,k}$ je unimodalan, tj. postoji točno jedan ekstrem, na $\langle t_i, t_{i+k} \rangle$.

B-splajnovi reda 4

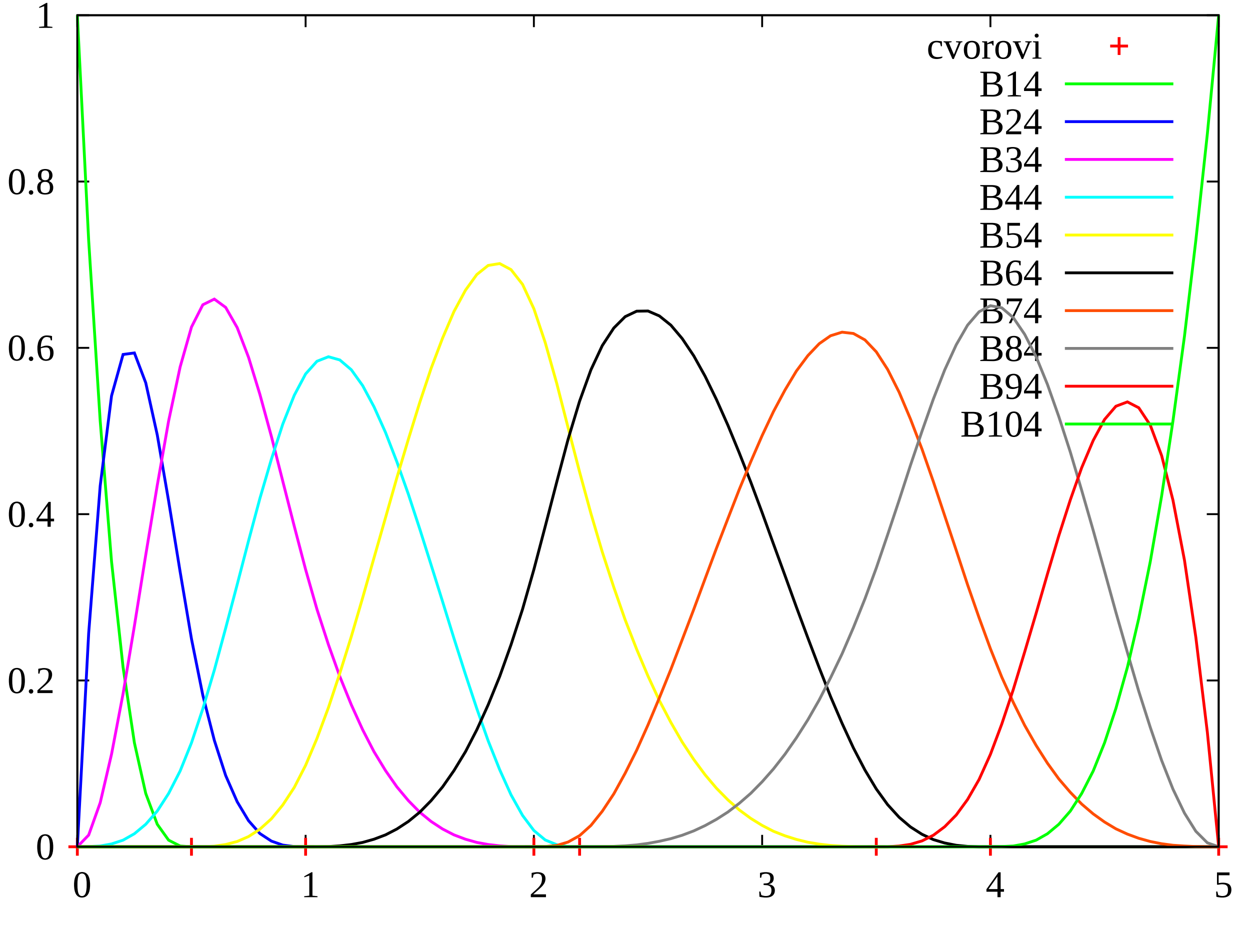


Figure 1: B-splajnovi reda 4

Svojstva B-splajnova (nastavak)

Korolar. Ako je

a) $t \in \langle t_j, t_{j+1} \rangle$, tada je $B_{i,k}(t) > 0$ za $i = j - k + 1, \ldots, j$;

b) t_j multipliciteta $m < k$, tj.

$$t_{j-1} < t_j = \cdots = t_{j+m-1} < t_{j+m},$$

tada je $B_{i,k}(t_j) > 0$ za $i = j - k + m, \ldots, j - 1$.

Dokaz. Iz prethodna teorema znamo da je nosač od $B_{i,k}$ sadržan u $[t_i, t_{i+k}]$.

a) Ako je $t_j \in \{t_i, t_{i+1}, \ldots, t_{i+k-1}\}$ i $t_j < t_{j+1}$, tada je $B_{i,k}(t) > 0$ za $t \in \langle t_j, t_{j+1} \rangle$. Dakle $i = j, j - 1, \ldots, j - k + 1$.

b) Neka su l_i i r_i takvi da je

Svojstva B-splajnova (nastavak)

$$t_i = t_{i+1} = \cdots = t_{i+l_i-1}$$

$$t_{i+k+1-r_i} = \cdots = t_{i+k-1} = t_{i+k},$$

onda je

$$B_{i,k}(t_j) > 0 \quad \text{za } j = i + l_i, \ldots, i + k - r_i.$$

Ako krenemo od $i = 1$, povečavamo i za jedan i gledamo koji je prvi i za koji je $B_{i,k}(t_j) > 0$. Takav i mora zadovoljavati $t_{i+k} = t_{j+m}$, dakle $i = j - k + m$. Zadnji i za koji to vrijedi je $i = j - 1$.

Ekvidistantni čvorovi

Primjer. Neka je $(t_i)_{i=-\infty}^{\infty}$ definiran sa $t_i := x_0 + ih$ za neku točku $x_0 \in \mathbb{R}$ i korak $h > 0$, i neka je $k \in \mathbb{N}$.

- Tada je pridruženi prostor splajnova reda k translatorno invarijantan, pa je
$$B_{i+j,k}(x) = B_{i,k}(x - jh)$$
za sve $i, j \in \mathbb{Z}$.
- B-splajn $B_{i,k}$ je simetričan s obzirom na točku $\frac{t_i + t_{i+k}}{2} = x_0 + \left(i + \frac{k}{2}\right) h$, tj. s obzirom na polovište svog nosača, gdje postiže i maksimum, dakle, za svaki $x \in \mathbb{R}$ je
$$B_{i,k}(x) = B_{i,k}(t_i + t_{i+k} - x).$$
- Zbog toga dovoljno je znati izračunati jednu polovicu jednog B-splajna da bi mogli izračunati sve.

Marsdenov identitet

Pošto se i polinomi nalaze u prostoru splajnova, zanimljivo je vidjeti koji su koeficijenti u rastavu po B-splajnovima potencija, koji naravno čine bazu za polinome određenog stupnja:

Teorem (Marsdenov identitet). Za proizvoljan $\tau \in \mathbb{R}$ vrijedi

$$(x-\tau)^{k-1} = \sum_i \psi_{i,k}(\tau) B_{i,k}(x),$$

gdje je

$$\psi_{i,k}(\tau) := (t_{i+1}-\tau)\cdots(t_{i+k-1}-\tau).$$

Štoviše za $j = 1, 2, \ldots, k$ je

$$x^{j-1} = \sum_i \xi_i^{(j)} B_{i,k}(x),$$

Marsdenov identitet (nastavak)

gdje su

$$\xi_i^{(j)} = (-1)^{j-1} \frac{(j-1)!}{(k-1)!} \psi_{i,k}^{(k-j)}(0).$$

Dokaz. Promotrimo poseban niz

$$\sum_i a_i B_{i,k}, \text{ gdje je } a_i := \psi_{i,k}(\tau), \text{ za } \forall i.$$

Tada iz de Boor–Cox-ove rekurzije

$$B_{i,k} = \omega_{i,k} B_{i,k-1} + (1 - \omega_{i+1,k}) B_{i+1,k-1}$$

slijedi

$$\sum_i a_i B_{i,k} = \sum_i B_{i,k-1} \big((1 - \omega_{i,k}) a_{i-1} + \omega_{i,k} a_i \big).$$

Marsdenov identitet (nastavak)

Ako je $B_{i,k-1} \neq 0$, tj. $t_i < t_{i+k-1}$ onda je

$$\begin{aligned}(1-\omega_{i,k}(x))a_{i-1} + \omega_{i,k}(x)a_i &= \Big((1-\omega_{i,k}(x))(t_i-\tau) \\ &\quad +\omega_{i,k}(x)(t_{i+k-1}-\tau)\Big)\psi_{i,k-1}(\tau) \\ &= (x-\tau)\psi_{i,k-1}(\tau),\end{aligned}$$

pošto je

$$(1-\omega_{i,k})f(t_i) + \omega_{i,k}f(t_{i+k-1})$$

jedinstveni pravac koji prolazi kroz $f(t_i)$ i $f(t_{i+k-1})$, pa mora biti jednak f ako je i sam f pravac. Tada se indukcijom dobiva

Marsdenov identitet (nastavak)

$$\begin{aligned}\sum_i B_{i,k}(x)\psi_{i,k}(\tau) &= (x-\tau)\sum_i B_{i,k-1}(x)\psi_{i,k-1}(\tau)\\ &= \cdots\\ &= (x-\tau)^{k-1}\sum_i B_{i,1}(x)\underbrace{\psi_{i,1}(\tau)}_{=1} = (x-\tau)^{k-1}.\end{aligned}$$

Rastav za x^{j-1} se dobiva deriviranjem prethodne jednakosti $k-j$ puta s obzirom na τ i uvrštavanjem $\tau = 0$.

B-splajnovi se daju lagano derivirati:

Derivacijska formula

Teorem (Derivacijska formula). Neka je $t_i < t_{i+k}$, i neka je D_+ derivacija s desna. Tada je

$$D_+ B_{i,k}(x) = (k-1)\left(\frac{B_{i,k-1}(x)}{t_{i+k-1}-t_i} - \frac{B_{i+1,k-1}(x)}{t_{i+k}-t_{i+1}}\right). \qquad (3)$$

Dokaz. Opet se samo koristi rekurzija za podijeljene razlike:

$$\begin{aligned} D_+ B_{i,k}(x) &= (-1)^k (t_{i+k}-t_i)\left(D_+(x-t)_+^{k-1}\right)[t_i,\ldots,t_{i+k}] \\ &= (-1)^k (t_{i+k}-t_i)\left((k-1)(x-t)_+^{k-2}\right)[t_i,\ldots,t_{i+k}] \\ &= (-1)^k (k-1)(t_{i+k}-t_i) \\ &\quad \cdot \frac{(x-t)_+^{k-2}[t_{i+1},\ldots,t_{i+k}] - (x-t)_+^{k-2}[t_i,\ldots,t_{i+k-1}]}{t_{i+k}-t_i}, \end{aligned}$$

Derivacijska formula (nastavak)

što daje traženu jednakost. U slučaju da t_i ili t_{i+k} ima multiplicitet k, desnu stranu od (3) tretiramo kao i u dokazu za de Boor–Cox-ovu rekurziju.

■

Korolar. Neka je $f \in \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}$, $f(x) = \sum_{j=1}^{n} a_j B_{j,k}$, $x \in [a, b]$, i multipliciteti svih čvorova nisu veći od k. Tada je

$$D_+ f(x) = \sum_{j=2}^{n} a'_j B_{j,k-1}(x),$$

gdje je

$$a'_j = (k-1) \frac{a_j - a_{j-1}}{t_{j+k-1} - t_j}, \text{ ako je } t_j < t_{j+k-1},$$

za $j = 2, \ldots, n$.

Računanje vrijednosti splajna u točci

Dokaz. Koristi se derivacijska formula na $D_+ f(x)$, te činjenica da je $B_{1,k-1}(x) = B_{n+1,k-1}(x) = 0$ za $x \in [a, b]$. ∎

Nadalje, neka je

$$f = \sum_{i=1}^{n} a_i B_{i,k},$$

i želimo naći efikasan algoritam za računanje vrijednosti danog splajna u točci x. Primjetimo da, zahvaljujući de Boor–Cox-ovoj rekurziji, je

$$\sum_i a_i B_{i,k} = \sum_i ((1 - \omega_{i,k}) a_{i-1} + \omega_{i,k} a_i) B_{i,k-1}.$$

Računanje vrijednosti splajna u točci (nastavak)

Ako označimo

$$a_i^{[1]} := ((1 - \omega_{i,k})a_{i-1} + \omega_{i,k}a_i),$$

$a_i^{[1]}$ se računa kao konveksna kombinacija originalnih koeficijenata, što se, numerički gledano, računa vrlo stabilno. Nastavimo iteracije, pa nakon $k-1$ iteracija imamo

$$f = \sum_i a_i^{[k-1]} B_{i,1},$$

iz čega slijedi

$$f(x) = a_i^{[k-1]}(x) \text{ za svaki } x \in [t_i, t_{i+1}\rangle,$$

ako je $t_i < t_{i+1}$.

de Boor-ov algoritam

Preciznije:

Algoritam (de Boor-ov algoritam). Neka je $x \in [t_j, t_{j+1}\rangle$. Za dane konstantne polinome $a_i^{[0]} := a_i$, $i = j-k+1, \ldots, j$, koji određuju $f := \sum_{i=1}^n a_i B_{i,k}$ na intervalu $[t_j, t_{j+1}\rangle$, generiraju se polinomi $a_i^{[r]}$, $r = 1, \ldots, k-1$ rekurzijom

$$a_i^{[r+1]} := (1-\omega_{i,k-r})a_{i-1}^{[r]} + \omega_{i,k-r} a_i^{[r]}, \quad j-k+r+1 < i \leqslant j. \quad (4)$$

Tada je $f = a_j^{[k-1]}$ na $[t_j, t_{j+1}\rangle$. Što više, ako je $t_j \leqslant x \leqslant t_{j+1}$, za težine $\omega_{i,k-r}(x)$ u (4) vrijedi

$$0 \leqslant \omega_{i,k-r}(x) \leqslant 1,$$

pa se računanje $f(x) = a_j^{[k-1]}(x)$ pomoću rekurzije (4) sastoji od konveksnih kombinacija.

Interpolacija splajnom

Interpolacija splajnom

Ovdje ćemo pretpostavljati da je $\mathbf{T} = (t_i)_{i=1}^{n+k}$ nepadajući niz čvorova, kod kojeg je $t_i < t_{i+k}$ za svaki i. Problem koji želimo riješiti je slijedeći: za dane $\tau = (\tau_i)_{i=1}^{n}$ i funkciju f traži se splajn $s \in \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}$, takav da je

$$s(\tau_i) = f(\tau_i), \qquad i = 1, \ldots, n,$$

jer je, naravno, $\dim \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}} = n$. Ako je

$$s = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j B_{j,k} \quad \text{i} \quad f_i := f(\tau_i),$$

onda interpolacijski uvjeti kažu da zapravo tražimo $(\alpha_i)_{i=1}^{n}$ takve da je

Interpolacija splajnom (nastavak)

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j B_{j,k}(\tau_i) = f_i, \qquad i = 1, \ldots, n.$$

Uz oznake $\alpha := (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)^{\mathrm{T}}$, $A = (a_{i,j})_{i,j=1}^{n} := (B_{j,k}(\tau_i))_{i,j=1}^{n}$ i $f = (f_1, \ldots, f_n)^{\mathrm{T}}$, naš problem postaje rješavanje linearnog sustava

$$A\alpha = f.$$

Dakle, problem traženja jedinstvenog interpolacijskog splajna s sada je pretvoren u problem ispitivanja da li je matrica A regularna, na što nam odgovor daje slijedeći torem:

Regularnost interpolacijske matrice

Teorem (Schoenberg–Whitney). Neka je τ strogo rastući niz točaka za koji iz $a < t_i = \cdots = t_{i+r} = \tau_j < b$ slijedi da je $r < k - 1$. Tada je matrica $A := (B_{j,k}(\tau_i))$ regularna ako i samo ako je

$$B_{i,k}(\tau_i) \neq 0, \qquad i = 1, \ldots, n. \tag{5}$$

Napomena. To zapravo znaći da za regularnost treba biti $t_i < \tau_i < t_{i+k}$, osim što se još dozvoljava i $\tau_1 = t_1^+$ i $\tau_n = t_{n+k}^-$.

Napomena. Jedan smjer ekvivalencije iz teorema se lagano vidi. Neka je A regularna i pretpostavimo da ne vrijedi (5).

Interpolacijska matrica je vrpčasta

- Ako je za neki i, $t_{i+k} \leqslant \tau_i$, tada prvih i stupaca matrice A ima nenul elemente samo u prvih $i-1$ redova. Prema tome tih i stupaca je linearno zavisno, pa A ne može biti regularna.
- Ako je $\tau_i \leqslant t_i$, tada stupci $i, \ldots, n$ imaju nenul elemente samo u redovima $i+1, \ldots, n$, pa A opet ne može biti regularna.

Pretpostavimo sada da je $n \times n$ matrica $(B_{j,k}(\tau_i))$ regularna. Tada je glavna prednost korištenja B-splajnova činjenica da matrica $(B_{j,k}(\tau_i))$ mora biti vrpčasta (trakasta) matrica širine k, tj. matrica sa manje nego k dijagonala iznad i manje nego k dijagonala ispod glavne dijagonale.

Interpolacijska matrica je vrpčasta (nastavak)

Zbog malog nosača B-splajnova, i $B_{i,k}(\tau_i) \neq 0$, vrijedi

$$B_{j,k}(\tau_i) \neq 0 \Longrightarrow |j - i| < k,$$

odnosno

$$B_{j,k}(\tau_i) = 0 \text{ za } |j - i| \geqslant k.$$

- Posebnim odabirom (τ_i) širina vrpce može se još smanjiti.
- Kod programiranja sa vrpčastim matricama, za njihovo spremanje u memoriju računala može se korsititi tzv. "vrpčasto spremanje" matrice za koju treba spremiti onda maksimalno $(2k - 1) \cdot n$ elemenata matrice (nule se ne pamte) umjesto $n \times n$.

Totalna pozitivnost interpolacijske matrice

Slijedeće važno svojstvo interpolacijske matrice je totalna pozitivnost. Za danu matricu $A = (a_{ij})_{i,j=0}^{n}$ i za zadan niz $i_1, \ldots, i_r, j_1, \ldots, j_s$ sa

$$A \begin{bmatrix} i_1, \ldots, i_r \\ j_1, \ldots, j_s \end{bmatrix} := \left(a_{i_p j_q}\right)_{p=1}^{r}, {}_{q=1}^{s}$$

definirana je podmatrica dobivena od A odabirom određenih redova i stupaca.

Definicija. Matrica A reda n je totalno pozitivna ako su sve njezine minore nenegativne, tj.

Tot. pozitivnost interpolacijske matrice (nast.)

$$\det A \begin{bmatrix} i_1, \dots, i_r \\ j_1, \dots, j_r \end{bmatrix} \geqslant 0$$

za sve

$$1 \leqslant i_1 < i_2 < \cdots < i_r \leqslant n$$
$$j_1 < j_2 < \cdots < j_r \leqslant n$$

i $r = 1, 2, 3, \dots, n$.

Teorem (Karlin). Matrica $(B_{j,k}(\tau_i))$ je totalno pozitivna za sve $\tau_1 < \tau_2 < \cdots < \tau_n$.

Napomena. Linearni sustav sa regularnom totalno pozitivnom matricom može se rješavati pomoću Gaussovih eliminacija bez pivotiranja.

Hermiteova interpolacija splajnom

Postoji također i varijanta Schoenberg–Whitney-evog teorema za Hermiteovu interpolaciju:

Teorem (Karlin & Ziegler). Neka je dan nepadajući niz $\tau = (\tau_i)_{i=1}^n$ za koji je $\tau_i < \tau_{i+k}$ za svaki i. Pretpostavimo da je

$$t_k < \tau_{i+1} = \cdots = \tau_{i+r} = t_{j+1} = \cdots = t_{j+s} < t_{n+1} \Rightarrow r + s \leqslant k.$$

Tada za svaku glatku funkciju f postoji jedinstven $s \in \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}$ koji se slaže s f na τ ako i samo ako je $B_{i,k}(\tau_i) \neq 0$ za svaki i.

Ocjena greške interpolacijaskog splajna

Za Lagrangeovu interpolaciju navest ćemo i ocjenu greške. Neka je I (interpolacijski) projektor s nekog skupa glatkih funkcija G, $I : G \to \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}$,

$$s \in \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}} \Rightarrow Is = s,$$

i neka je

$$\|g\| := \max_{a \leqslant x \leqslant b} |g(x)|$$

za neki fiksni interval $[a, b]$.

Lema. Za svaku neprekidnu funkciju g na $[a, b]$ interpolacijska pogreška je ograničena s

$$\|g - Ig\| \leqslant (1 + \|I\|)\mathrm{dist}(g, \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}),$$

Ocjena greške interpolacijaskog splajna (nast.)

gdje je

$$\|I\| := \max_{g \in C[a,b] \setminus \{0\}} \frac{\|Ig\|}{\|g\|},$$

$$\operatorname{dist}(g, \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}) := \min_{s \in \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}} \|g - s\|.$$

Dokaz.

$$\begin{aligned} \|g - Ig\| &= \|g - s - I(g - s)\| \leqslant \|g - s\| + \|I\| \|g - s\| \\ &= (1 + \|I\|)\|g - s\| \end{aligned}$$

za svaki $s \in \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}$. Ako vrijedi za svaki, onda vrijedi i za onaj za koji se postiže minimum, tj.

$$\|g - Ig\| \leqslant (1 + \|I\|)\operatorname{dist}(g, \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}).$$

Ocjena greške interpolacijaskog splajna (nast.)

Nedostatak ove ocjene je da ne znamo $\|I\|$, a to ovisi o $|t|$ gdje je

$$|t| := \max_i \, (t_{i+1} - t_i),$$

ali i o τ. Može se pokazati:

Lema. Postoji pozitivna konstanta $const_k$ takva da je norma interpolacijskog procesa I ograničena odozdo sa

$$\|I\| \geqslant const_k \max_i \frac{\min \{t_{j+k-1} - t_j : \langle t_j, t_{j+k-1} \rangle \cap \langle \tau_i, \tau_{i+1} \rangle \neq \emptyset\}}{\tau_{i+1} - \tau_i}.$$

Iz ove leme se vidi da $\|I\|$ može biti proizvoljno velik ako dvije interpolacijske točke približimo.

Ocjena greške interpolacijaskog splajna (nast.)

Dakle, mora se posvetiti pažnja odabiru interpolacijskih točaka. Čak se može pokazati da veliki $\|I\|$ može uzrokovati i veće greške tijekom floating–point računanja.

O $\mathrm{dist}(g, \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}})$ pak možemo još nešto reći. Definirajmo još modul neprekidnosti:

$$\omega(g; h) := \max\{|g(x) - g(y)| : |x - y| \leqslant h, x, y \in [a, b]\}.$$

Teorem. Za $j = 0, \ldots, k-1$ postoji konstanta $const_{k,j}$ takva da za sve $\mathbf{T} = (t_i)_{i=1}^{n+k}$ uz

$$t_1 = \cdots = t_k = a < t_{k+1} \leqslant \cdots \leqslant t_n < b = t_{n+1} = \cdots = t_{n+k},$$

i za svaki $g \in C^j[a, b]$,

Ocjena greške interpolacijaskog splajna (nast.)

$$\mathrm{dist}(g, \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}) \leqslant const_{k,j}|t|^j\omega(g^{(j)}; |t|).$$

Posebno za $j = k$ imamo

$$\mathrm{dist}(g, \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}) \leqslant const_k|t|^k\|g^{(k)}\|,$$

ako g ima k neprekidnih derivacija.

Za kubični splajnove možemo biti još precizniji:

Teorem. Neka je s kubični splajn klase C^2 koji interpolira funkciju f u čvorovima i zadovoljava rubne uvjete

a) $s'(a) = f'(a)$, $s'(b) = f'(b)$,

b) $s''(a) = f''(a)$, $s''(b) = f''(b)$,

c) $s^{(r)}(a) = f^{(r)}(b)$, za $r = 0, 1$ (periodički rubni uvjeti).

Ocjena greške interpolacijaskog splajna (nast.)

Tada pogreška interpolacije zadovoljava

$$\|s^{(r)} - f^{(r)}\| \leqslant R_r$$

gdje je R_r dan u tablici:

klasa f-je	R_0	R_1	R_2	R_3
$C^1[a,b]$	$\frac{9}{8}h\omega(f';h)$	$4\omega(f';h)$	-	-
$C^2[a,b]$	$\frac{19}{96}h^2\omega(f'';h)$	$\frac{2}{3}h\omega(f'';h)$	$4\omega(f'';h)$	-
C^2, C^3_Δ	$\frac{41}{1728}h^3\omega(f''';h)$	$\frac{2}{27}h^2\omega(f''';h)$	$\left(\frac{1}{2}+\frac{2\sqrt{3}}{9}\right)h\omega(f''';h)$	$\left(1+\frac{4\sqrt{3}}{9}\beta\right)\omega(f''';h)$

Interpolacija u Greville-ovim točkama

gdje su

$$h := |t|, \quad h_i := t_{i+1} - t_i, \quad \beta := \frac{\max h_i}{\min h_i},$$

a X_Δ znači da je funkcija po djelovima klase X.

Ako postoji sloboda odabira interpolacijskih točaka (τ_i) za danu proširenu particiju $\mathbf{T}$, tada se preporučaju Greville-ove točke:

$$\tau_i = t_{i,k}^* := \frac{t_{i+1} + \cdots + t_{i+k-1}}{k-1}.$$

Za njih vrijedi

$$x = \sum_{i=1}^{n} t_{i,k}^* B_{i,k}(x).$$

Interpolacija u Greville-ovim točkama (nast.)

Ako sa I_k^* označimo interpolacijski operator koji interpolira splajnom reda k u Greville-ovim točkama, može s pokazati da je

$$\|I_2^*\| = 1, \quad \|I_3^*\| \leqslant 2, \quad \|I_4^*\| \leqslant 27$$

Pa, pošto je

$$\|g - I_k^* g\| \leqslant (1 + \|I_k^*\|)\mathrm{dist}(g, \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}),$$

po svoj prilici, za "umjeren" k (a sigurno za $k \leqslant 4$), I_k^* je skoro najbolja moguća aproksimacija funkcije g u prostoru $\mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}$.

Primjeri interpolacije B-splajnom

C^2 kubična interpolacija u čvorovima

- Želimo interpolirati C^2 kubičnim splajnom, pa unutarnji čvorovi moraju bit jednostruki.
- Dakle, proširena particija $\mathbf{T}$ je definirana sa

$$t_j = \begin{cases} x_0, & j = 1, 2, 3, 4 \\ x_{j-4}, & j = 5, \ldots, \ell + 3 \\ x_\ell, & j = \ell + 4, \ell + 5, \ell + 6, \ell + 7 \end{cases}$$

- Dimenzija prostora splajnova je $n = \ell + 3$.
- Splajn kojim interpoliramo je oblika

$$s(x) = \sum_{j=1}^{n} a_j B_{j,4}(x).$$

C^2 kubična interpolacija u čvorovima (nastavak)

- Za njega zahtjevamo da je

$$s(x_i) = p_i, \qquad i = 0, 1, \ldots, \ell.$$

- Budući da imamo $\ell + 1 = n - 2$ interpolacijskih točaka, a moramo odrediti n koeficijenta a_j, ostaje nam 2 stupnja slobode.
- Postoji nekoliko načina kako da postavimo uvjete na ta dva dodatna stupnja slobode.
  1. Zahtijevamo da je $s''(x_0) = 0$ i $s''(x_\ell) = 0$. Ova vrsta interpolanta zove se interpolant prirodnim splajnom.
  2. Zahtijevamo da je interpolant klase C^3 u x_1 i $x_{\ell-1}$. To se zove uvijet bez čvora, jer prva dva segmenta $[x_0, x_2]$ i zadnja dva segmenta $[x_{\ell-2}, x_\ell]$ čvorova

C^2 kubična interpolacija u čvorovima (nastavak)

specificiraju jedan kubični polinom kao da x_1 i $x_{\ell-1}$ i nisu čvorovi.

3. Zahtijevamo da su zadane tangente u krajnjim točkama krivulje, tj. $s'(x_0) = p'_0$ i $s'(x_\ell) = p'_\ell$. Ova vrsta interpolanta zove se kompletan interpolant kubičnim splajnom i on se najčešće koristi.

C^2 kubična interpolacija u čvorovima (nastavak)

- Mi ćemo tražiti kompletan interpolant kubičnim splajnom takav da vrijedi

$$
\begin{aligned}
p_j &= s(x_j) = \sum_{i=1}^{n} a_i B_{i,4}(x_j) && j = 0, \ldots, \ell \\
p_j' &= s'(x_j) = \sum_{i=1}^{n} a_i B_{i,4}'(x_j) && j = 0, \ell
\end{aligned}
$$

- Budući da su prvi i zadnji čvor maksimalnog multipliciteta, mora biti

$$a_0 = p_0, \qquad a_n = p_\ell.$$

C^2 kubična interpolacija u čvorovima (nastavak)

- Dalje, u $x_0 = t_1 = \cdots = t_4$ samo $B_{1,4}$ i $B_{2,4}$ imaju derivacije (s desna) različite od nule.
  - $B_{1,4}$ je klase $C^{(-1)}$ u x_0 (ima prekid u x_0).
  - $B_{2,4}$ je klase C^0 u x_0.
  - $B_{i,4}$ je barem klase C^1 u x_0 za $i \geq 3$ i $B_{i,4} \equiv 0$ za $x < x_0$, pa je $B'_{i,4}(x_0) = 0$.
- Budući da iz $\sum_{i=1}^n B_{i,4}(x) = 1$ slijedi $\sum_{i=1}^n B'_{i,4}(x) = 0$ za sve x, imamo

$$B'_{1,4}(x_0) = -B'_{2,4}(x_0).$$

- Slično

$$B'_{n-1,4}(x_\ell) = -B'_{n,4}(x_\ell).$$

C^2 kubična interpolacija u čvorovima (nastavak)

- Već smo prije odredili koji su sve B-splajnovi različiti od nule u nekom $x_i = t_{i+4}$, $i = 1, \ldots, \ell - 1$. Pošto je x_i jednostruki čvor, to je

$$B_{j,4}(x_i) = B_{j,4}(t_{i+4}) > 0 \quad \text{za } j = i+1, i+2, i+3.$$

- Dakle slijedi

$$p_i = \sum_{j=i+1}^{i+3} a_j B_{j,4}(x_i).$$

C^2 kubična interpolacija u čvorovima (nastavak)

- Dobivene zaključke možemo iskoristiti za dobivanje sustava

$$\mathbf{B} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_{n-2} \\ a_{n-1} \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_0 \\ p_0' \\ p_1 \\ \vdots \\ p_{\ell-1} \\ p_\ell' \\ p_\ell \end{bmatrix}.$$

C^2 kubična interpolacija u čvorovima (nastavak)

- Za $b_{i,j} = B_{i,4}(x_j)$ i $b'_{i,j} = B'_{i,4}(x_j)$, matrica $\mathbf{B}$ je oblika

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b'_{1,0} & b'_{2,0} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_{2,1} & b_{3,1} & b_{4,1} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{n-3,\ell-1} & b_{n-2,\ell-1} & b_{n-1,\ell-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & b'_{n-1,\ell} & b'_{n,\ell} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

- Rješenje ovog $n \times n$ sustava linearnih jednadžbi daje koeficijente B-splajnova.

C^2 kubična interpolacija u čvorovima (nastavak)

- Ova matrica može biti velikih dimenzija, ali je tridijagonalna pa za nju postoji mnogo efikasnih numeričkih metoda.

Po djelovima kubična Hermiteova interpolacija

- I dalje je $k = 4$ i pretpostavimo da je zadano $m + 1$ trojki koji se sastoje od interpolacijske točke, zadane funkcijske vrijednosti i derivacije $\{(x_i, p_i, q_i)\}_{i=0}^{m}$.
- Ponovo konstruiramo proširenu particiju $\mathbf{T}$ sa

$$t_i = \begin{cases} x_0, & i = 1, 2, 3, 4 \\ x_j, & i = 2j + 3, 2j + 4, \ \ j = 1, \ldots, m - 1 \\ x_m, & i = 2m + 3, 2m + 4, 2m + 5, 2m + 6 \end{cases}$$

- Prostor $S_{k,\mathbf{T}}$ je klase C^1 za svaku vrijednost čvora x_i, $i = 1, \ldots, m - 1$, jer je multiplicitet svakog unutarnjeg čvora jednak 2.

Po djelovima kubična Hermiteova interpolacija

- $\mathbf{T}$ ima $2m+6 = n+4$ elemenata, pa je dimenzija prostora jednaka $n = 2m+2$.
- S druge strane moramo riješiti sustav od $2m+2$ linearnih jednadžbi za nepoznate koeficijente:

$$\begin{aligned} p_j &= s(x_j) = \sum_{i=1}^{2m+2} a_i B_{i,4}(x_j) \qquad && j = 0, \ldots, m \\ q_j &= s'(x_j) = \sum_{i=1}^{2m+2} a_i B'_{i,4}(x_j) \qquad && j = 0, \ldots, m \end{aligned}$$

- Primijetimo da je $B_{i,4}(x_j) \neq 0$ i $B'_{i,4}(x_j) \neq 0$ za $i = 2j+1, 2j+2$.

Po djelovima kubična Hermiteova interpolacija

- $x_j = t_{2j+3} = t_{2j+4}$, pa su jedini B-splajnovi (klase C^1) za koje je x_j unutar nosača $B_{2j+1,4}$ i $B_{2j+2,4}$.
- Dakle slijedi

$$p_j = \sum_{i=2j+1}^{2j+2} a_i B_{i,4}(x_j),$$

$$q_j = \sum_{i=2j+1}^{2j+2} a_i B'_{i,4}(x_j).$$

za $j = 0, 1, \ldots, m$.

Po djelovima kubična Hermiteova interpolacija

- Dobivene zaključke možemo iskoristiti za dobivanje sustava

$$\mathbf{H} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_{n-2} \\ a_{n-1} \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_0 \\ q_0 \\ p_1 \\ q_1 \\ \vdots \\ p_m \\ q_m \end{bmatrix}.$$

Po djelovima kubična Hermiteova interpolacija

- Općenito, elementi matrice $\mathbf{H}$ su oblika

$$h_{\ell,i} = \begin{cases} B_{i,4}(x_j), & \ell = 2j+1 \\ B'_{i,4}(x_j), & \ell = 2j+2 \end{cases}, \qquad i = 1, \ldots, 2m+2,$$

i $j = 0, \ldots, m$, pri čemu je matrica $\mathbf{H}$ blok dijagonalna matrica, sa 2×2 blokovima na dijagonali

$$H_j = \begin{bmatrix} B_{2j+1,4}(x_j) & B_{2j+2,4}(x_j) \\ B'_{2j+1,4}(x_j) & B'_{2j+2,4}(x_j) \end{bmatrix}.$$

Po djelovima kubična Hermiteova interpolacija

- Dakle,

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} H_0 & 0 & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & 0 & H_m \end{bmatrix}.$$

Obje interpolacije

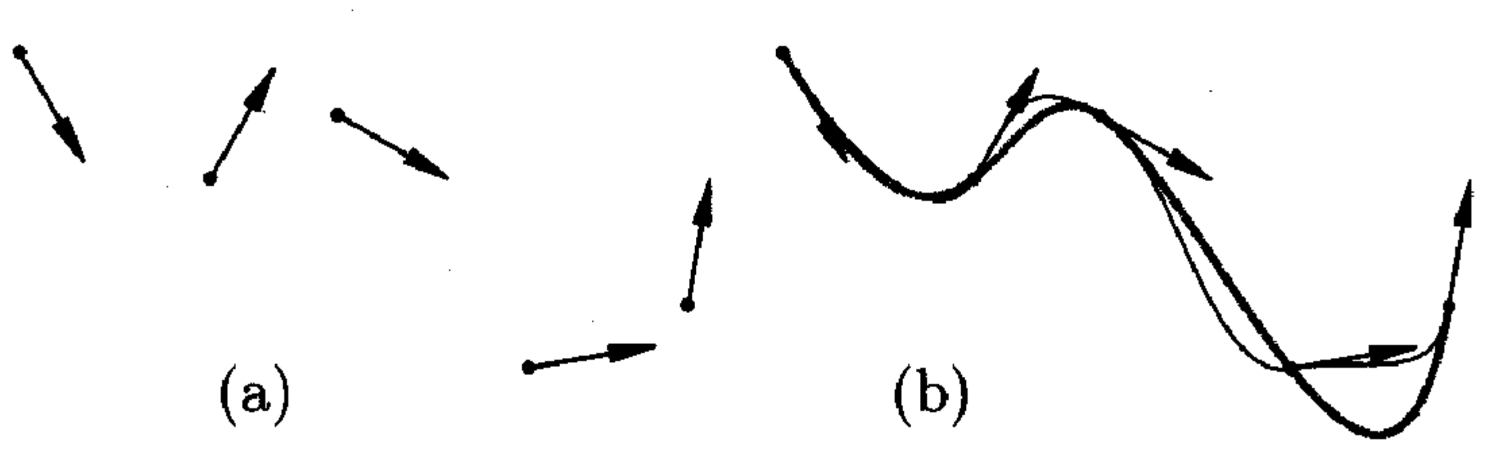


Figure 2: (a) Podaci; (b) podaci, po dijelovima Hermiteov interpolant i kompletan interpolant kubičnim splajnom.

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

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

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 $f'(x_0)$

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

Ako f ima još jednu 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 $H \to 0$, 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 $h \to 0$.

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

$n = 2.$

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

1. Simetričan izbor točaka

Izaberemo x_1 i x_2 simetrično oko x_0

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

Sugestivnija oznaka je

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

jer se točke pišu u prirodnom redosljedu: x_{-1}, x_0, x_1. 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 (n.)

Izračunajmo potrebne podijeljene razlike.

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

Uvrštavanjem dobivamo

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

Numeričko deriviranje — simetrična razlika (n.)

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,

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

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

$$
\begin{array}{c|cccc}
t_k & f[t_k] & f[t_k, t_{k+1}] & f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}] \\
\hline
x_0 & f_0 & & \\
 & & \dfrac{f_1 - f_0}{h} & \\
x_1 & f_1 & & \dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2} \\
 & & \dfrac{f_2 - f_1}{h} & \\
x_2 & f_2 & &
\end{array}
$$

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka (n.)

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,

$$f'(x_0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + e_2'(x_0), \qquad e_2'(x_0) = -h^2\,\frac{f^{(3)}(\xi)}{6}.$$

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

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

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

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

Koliko malen smije biti h?

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

Zbog jednostavnosti analize pretpostavimo da je

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

U tom je slučaju napravljena ukupna greška

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

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

Koliko malen smije biti h? (nastavak)

Za drugi član koristimo ocjenu za $e_2'(x_0)$, pa zajedno dobivamo

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

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

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

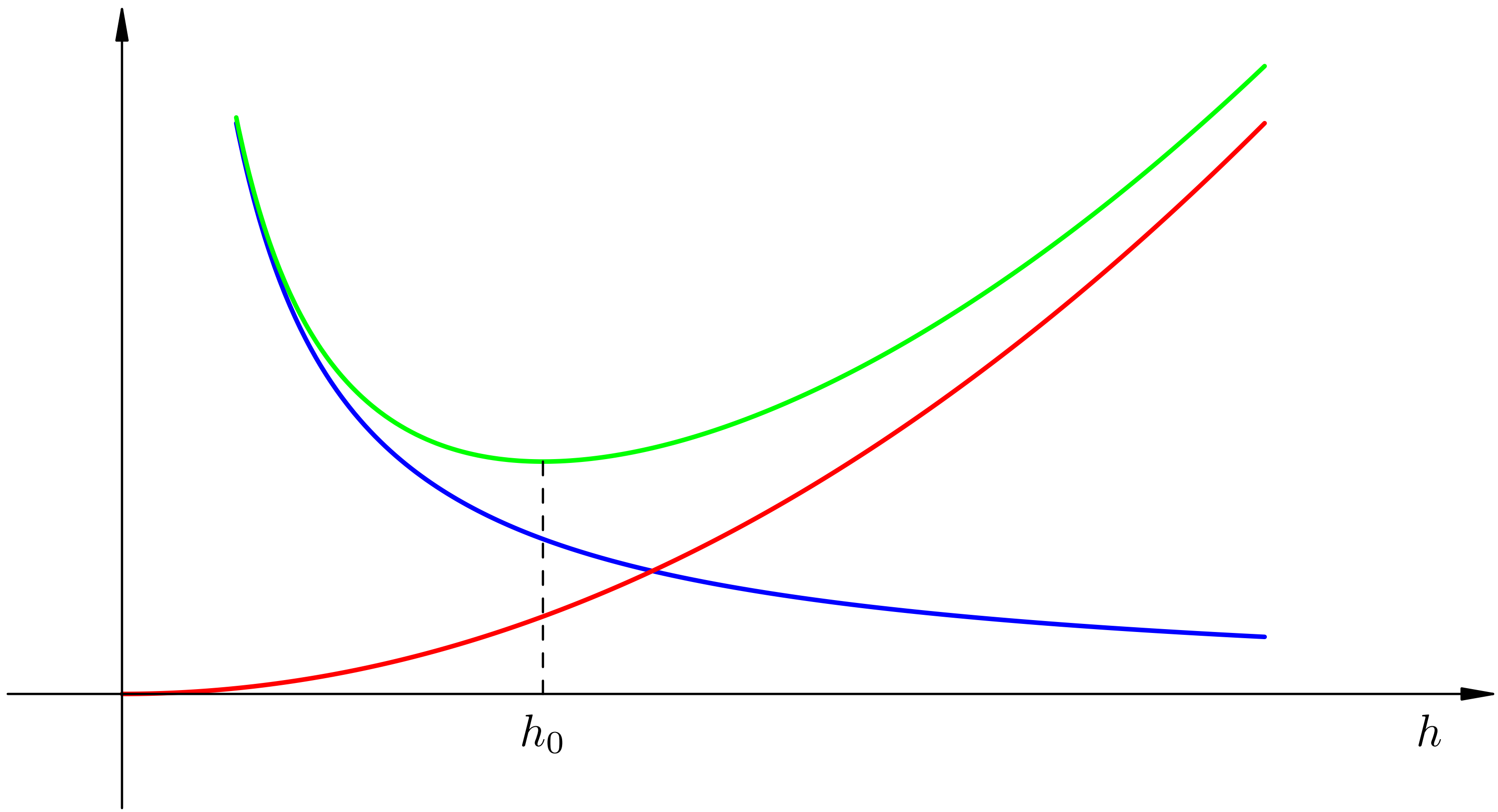
Ponašanje ove ocjene i njezina dva člana u ovisnosti od h možemo prikazati sljedećim grafom.

Koliko malen smije biti h? (nastavak)

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 (nastavak)

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.