

8. előadás

Lineáris algebra numerikus módszerei

Tegyük fel, hogy az $x_0, x_1, \dots, x_k \in [a, b]$ különböző alappontok ($k \leq n$), továbbá $m_0, m_1, \dots, m_k \in \mathbb{N}$ multiplicitások úgy, hogy

$$\sum_{i=0}^k m_i = n + 1.$$

Legyenek adottak

$$f^{(j)}(x_i) = y_{ij}, (i = 0, \dots, k \text{ és } j = 0, \dots, m_i - 1)$$

értékek. Egy olyan n -edfokú P polinomot keresünk, melyre

$$P^{(j)}(x_i) = y_{ij}, (i = 0, \dots, k \text{ és } j = 0, \dots, m_i - 1)$$

Tétel

Egyértelműen létezik egy olyan n -edfokú P polinom, melyre

$$P^{(j)}(x_i) = y_{ij}, (i = 0, \dots, k \text{ és } j = 0, \dots, m_i - 1)$$

A Hermite interpolációs polinom hibájára vonatkozik a következő tétel:

Tétel

Ha $f \in C^{n+1}[a, b]$, és jelölje $I \subset [a, b]$ az x_1, x_2, \dots, x_k alappontok által kifeszített intervallumot, ekkor minden $x^* \in [a, b]$ esetén létezik $\xi = \xi(x^*) \in I$, hogy

$$f(x^*) - P(x^*) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \omega(x^*)$$

ahol

$$\omega(x^*) = \prod_{i=0}^k (x^* - x_i)^{m_i}.$$

Ha $\sup_{x \in [a, b]} |f^{(n)}(x)| =: M_{n+1} < \infty$, akkor

$$f(x^*) - P(x^*) \leq \frac{M_{n+1}}{n!} \omega(x^*)$$

Megjegyzések

- Ha $m_i = 1$ minden i -re, akkor a Lagrange-féle interpolációt kapjuk.
- Ha $m_i = 2$ minden i -re, akkor a Fejér-Hermite interpolációt kapjuk, melynek ismert az explicit alakja és az a Lagrange-alappolinomok segítségével is felírható.

Definíció (elsőrendű osztott differenciák)

Legyenek x_1, x_2, \dots, x_n különböző pontok. Ekkor

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \quad (i = 1, \dots, n - 1),$$

Definíció (k-adrendű osztott differenciák)

Legyenek x_1, x_2, \dots, x_n különböző pontok. Ekkor

$$f[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] - f[x_i, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

$$(k = 1, \dots, n, i = 1, \dots, n - k).$$

A Lagrange-féle interpoláció Newton-alakja

$$P(x) = f(x_1) + \sum_{k=2}^n f[x_1, \dots, x_k] \prod_{j=1}^{k-1} (x - x_j)$$

Azonos alappontok esetén az osztott differencia nem definiálható a szokásos formulával. A forgalom kiterjesztése határátmenettel történik.

Definíció (Osztott differenciák ismétlődő argumentumokkal)

$$f[x, x] = \lim_{y \rightarrow x} \frac{f(x) - f(y)}{x - y} = f'$$

Hasonlóan a $k - 1$ -edrendű osztott differenciára adódik, hogy

$$f[x, x, \dots, x] = \frac{f^k(x)}{k!}$$

A többi, azonos alappontokat is tartalmazó osztott differencia a fentiekből a szokásos definícióval számolható.

Hermite-interpolációs polinom előállítás Newton alakkal

Az osztott differencia táblázat felépítése:

- Minden alappontot annyiszor veszünk fel egymás után, amennyi a multiplicitása, pl. az x_i -t $m_i + 1$ -szer egymás után.
- Beírjuk az $f(x_i)$ értékeket és a megfelelő $\frac{f^{(j)}(x_i)}{j!}$ értékeket az x_i alappontra támaszkodó $j - 1$ -edrendű osztott differenciák helyére ($f^{(j)}(x_i)$ ismeretében).
- A táblázat többi részét az osztott differencia fogalom definíciója alapján töltjük ki.
- Az interpolációs polinom felírása a táblázatból a szokásos módon történik, a táblázat átlójában szereplő elemek, mint együtthatók segítségével.

Hermite-interpolációs polinom előállítása Lagrange alakkal:

Felírjuk a megfelelő alappolinomokat, majd mindegyiket a megfelelő $f^{(j)}(x_i)$ -vel szorozva az interpolációs polinomot. Az alappolinomok előállítása bonyolult, az alappontok illetve a multiplicitás értékektől függ az alakjuk.

Példa:

Mi lesz az f -et közelítő Hermite-interpolációs polinom, ha $f(0) = -1$, $f(2) = -1$, $f'(0) = -4$, $f'(2) = 4$ és $f''(2) = 12$

Megoldás

Elkészítjük az osztott differencia táblázatot.

| x_i | $f(x_i)$ | | | | | |
|-------|----------|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|--|--|
| 0 | -1 | | | | | |
| 0 | -1 | $f'(0) = -4$ | | | | |
| 2 | -1 | $\frac{-1 - (-1)}{2 - 0} = 0$ | $\frac{0 - (-4)}{2 - 0} = 2$ | | | |
| 2 | -1 | $f'(2) = 4$ | $\frac{4 - 0}{2 - 0} = 2$ | $\frac{2 - 2}{2 - 0} = 0$ | | |
| 2 | -1 | $f''(2) = 6$ | $\frac{6 - 2}{2 - 0} = 2$ | $\frac{2 - 0}{2 - 0} = 1$ | | |
| 2 | -1 | | | | | |

$$\begin{aligned}
 P(x) &= -1 + (-4)(x - 0) + 2(x - 0)^2 + 0(x - 0)^2(x - 2) \\
 &\quad + 1(x - 0)^2(x - 2)^2 = -1 - 4x + 2x^2 + x^2(x - 2)^2 \\
 &= x^4 - 4x^3 + 6x^2 - 4x - 1
 \end{aligned}$$

A Spline interpoláció is a lineáris interpolációk közé tartozik alkalmasan megválasztott $\{\phi_i\}_{i=1}^n$ bázisfüggvény-rendszerrel.

Definíció

A $h(x)$ interpoláló függvényt szakaszonként adjuk meg speciális csatlakozási feltételekkel. Az $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$ alappontokhoz, illetve az $y_i = f(x_i)$ ($i = 1, \dots, n$) függvényértékekhez olyan $S(x)$ függvényt keresünk, amely kielégíti a következő feltételeket:

- (1) $S(x) = S_i(x) \quad (x \in [x_i, x_{i+1}])$
- (2) $S(x_i) = y_i \quad (i = 1, \dots, n),$
- (3) $S_i(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1}) \quad (i = 1, \dots, n-2)$

Megjegyzések

- Az (1) feltétel tulajdonképpen csak megfogalmazza, hogy szakaszokból áll az interpolációs függvényünk, azaz részintervallumonként más-más előírással definiáljuk.
- A (2) feltétel azt jelenti, hogy az $S(x)$ valóban interpoláló függvény.
- A (3)-mal a folytonosságot biztosítjuk az $[a, b]$ intervallumon (Ezért nincs ellentmondás (1)-ben: a közbülső osztópontok két szakaszhoz is tartoznak, de ott mindkét szakasz ugyanolyan értékű.)

Megjegyzések

- Ez a három feltétel tulajdonképpen a Spline általános definíciója. Az egyes S_i függvényeket akár más-más H_i osztályból választhatjuk, azonban rendszerint egyetlen H halmazt írunk elő: $S_i \in H$. A H -tól függően további feltételeket is előírhatunk (gyakran kötelező is, hogy egyértelmű megoldást kapjunk).
- A H lehet például az $y = \alpha + \beta x$ elsőfokú polinomok (az egyenesek) osztálya. Ez esetben nem is kell további feltétel; a megoldást az (1)-(3) feltételek egyértelműen biztosítják.
- Magasabb fokszámú polinomok esetén a közbülső pontokban bizonyos rendig a csatlakozó ágak deriváltjainak megegyezését is megkövetelhetjük. Azt mondjuk, hogy egy **Spline k -ad fokú és m -ed rendű**, ha szakaszonként legfeljebb k -adfokú polinomokból áll, és a közbülső pontokban a jobb- és baloldali szakasz deriváltjai m rendig megegyeznek.

A spline meghatározásakor n db k -adfokú polinomot kell felírunk, azaz az ismeretlenek száma: $n(k + 1)$.

Az (1), (3) feltételekből a feltételek száma : $(k + 1)n - (k - 1)$, ugyanis $k - 1$ db simasági feltétel az $n - 1$ belső pontban, azaz $(n - 1)(k - 1)$ és $2n$ db interpolációs feltétel (n db intervallum két végpontja).

Összesen $(n - 1)(k - 1) + 2n = (k + 1)n - (k - 1)$. Innen látszik, hogy $k - 1$ db feltétel hiányzik a Spline egyértelműségéhez. Ezeket a feltételeket általában a végpontokra adják meg.

Lineáris spline ($k=1$)

Az (1), (2) és (3) egyértelműen meghatározza. Minden $[x_k, x_{k+1}]$ intervallumon

$$\begin{aligned} S_k(x_k) &= a_k x_k + b_k = y_k \\ S_k(x_{k+1}) &= a_k x_{k+1} + b_k = y_{k+1} \end{aligned}$$

Ebből az két ismeretlenes egyenletrendszerből a_k és b_k meghatározható.

Úgy is meghatározhatjuk a P_k polinomot, hogy az $[x_k, x_{k+1}]$ intervallum végpontjaira felírjuk a lineáris interpolációs polinom Lagrange-féle alakját. Az interpoláció miatt $S \in C[a, b]$.

Kvadratus spline ($k=2$)

A $k - 1 = 1$ feltétel hiányzik a spline egyértelmű felírásához. Ezt általában az intervallum elején vagy végén a derivált megadásával szokás teljesíteni. Ebben az esetben az egymás melletti intervallumokra Hermite interpolációt alkalmazva meghatározható a spline.

Harmadfokú, másodrendű Spline

A gyakorlatban túlnyomórészt harmadfokú, másodrendű Spline interpolációt használunk, és röviden csak **harmadfokú Spline-ról** beszélünk. Ekkor a további feltételek, amelyeket megkövetelünk:

$$(4) \quad S'_i(x_{i+1}) = S'_{i+1}(x_{i+1}) \quad (i = 1, \dots, n-2),$$

$$(5) \quad S''_i(x_{i+1}) = S''_{i+1}(x_{i+1}) \quad (i = 1, \dots, n-2),$$

$$(6) \quad S''(x_1) = A_n, \text{ és } S''(x_n) = B_n$$

Ha $A_n = B_n = 0$, akkor az $S(x)$ függvényt **természetes Spline-nak** nevezzük.

Az $S(x)$ Spline-t az $[x_i, x_{i+1}]$ intervallumon a

$$S(x) = S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

alakban keressük ($i = 1, \dots, n - 1$). Leszámlálhatjuk, hogy a $4(n - 1)$ darab ismeretlenhez a (2) – (6) feltételek pontosan ugyanannyi egyenletet szolgáltatnak, és az egész együtt egy lineáris egyenletrendszer. Az x^k hatványok helyett az $(x - x_i)^k$ használatának praktikus okai vannak.

Jelöljük h_i -vel az i -edik szakasz hosszát, azaz legyen $h_i = x_{i+1} - x_i$ ($i = 1, \dots, n - 1$). A (2) – (6) feltételek felhasználásával az ismeretlen a_i , b_i , c_i és d_i együtthatókat a következőképpen határozhatjuk meg.

A (2), azaz az $S(x_i) = S_i(x_i) = y_i$ interpolációs feltétel miatt

$$a_i = y_i \quad (i = 1, \dots, n - 1)$$

(ebből látszik, hogy mi az $(x - x_i)$ eltolás értelme),

valamint:

$$S_{n-1}(x_n) = a_{n-1} + b_{n-1}h_{n-1} + c_{n-1}h_{n-1}^2 + d_{n-1}h_{n-1}^3 = y_n.$$

A (3)-as csatlakozási feltétel alakja:

$$S_i(x_{i+1}) = y_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_{i+1} \quad (i = 1, \dots, n-2),$$

A (4)-es csatlakozási feltétel:

$$S'_i(x_{i+1}) = b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1} = S'_{i+1}(x_{i+1}) \quad (i = 1, \dots, n-2).$$

Hasonlóképpen kapjuk, hogy az (5)-ös feltétel alakja:

$$S''_i(x_{i+1}) = 2c_i + 6d_i h_i = 2c_{i+1} = S''_{i+1}(x_{i+1}) \quad (i = 1, \dots, n-2).$$

Végül a (6)-os végpont-feltétel:

$$S''(x_1) = 2c_1 = A_n, \quad S''(x_n) = 2c_{n-1} + 6d_{n-1}h_{n-1} = B_n.$$

Így $4n - 4$ darab egyenlet kapunk, ahonnan az a_i és a c_1 értékei azonnal adódtak. A többiből a b_i és d_i ismeretleneket ($i = 1, \dots, n - 1$) fokozatosan ki lehet fejezni és a többibe behelyettesíteni. Végül a következőhöz jutunk:

$$b_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{2c_i + c_{i+1}}{3} h_i \quad (i = 1, \dots, n - 2)$$

$$b_{n-1} = \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{4c_{n-1} - B_n}{6} h_{n-1},$$

továbbá

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i} \quad (i = 1, \dots, n - 2)$$

$$d_{n-1} = \frac{B_n - 2c_{n-1}}{6h_{n-1}}.$$

A c_i együtthatók ismeretében tehát valamennyi ismeretlen közvetlenül számolható. Minthogy $c_1 = A_n$ már ismert, így egy $n - 2$ ismeretlenes egyenletrendszer kell megoldani, ami a

$$\Delta_i = (y_{i+1} - y_i) / h_i, \lambda_i = h_{i+1} / (h_i + h_{i+1}), \mu_i = 1 - \lambda_i$$

($i = 1, \dots, n - 2$) bevezetésével a következő:

$$2c_2 + \lambda_1 c_3 = \frac{3}{h_1 + h_2} \left(\Delta_2 - \Delta_1 - \frac{h_1}{2} A_n \right), \quad (1)$$

$$\mu_i c_i + 2c_{i+1} + \lambda_i c_{i+2} = \frac{3}{h_i + h_{i+1}} (\Delta_{i+1} - \Delta_i), \quad (2)$$

($i = 2, \dots, n - 3$) és

$$\mu_{n-2} c_{n-2} + 2c_{n-1} = \frac{3}{h_{n-2} + h_{n-1}} \left(\Delta_{n-1} - \Delta_{n-2} + \frac{h_{n-1}}{6} B_n \right).$$



Ez egy $n - 2$ ismeretlenes lineáris egyenletrendszer a c_2, c_3, \dots, c_{n-1} ismeretlenekre. (mivel az a_i ($i = 1, \dots, n - 1$) és a c_1 együtthatók közvetlenül adódnak).

Az $n = 3$ esetén (1) és (2) nincs értelmezve, c_2 ekkor (3)-ból számolható.

Az $n = 4$ esetén pedig (2) nem értelmezett, a c_2 és c_3 a másik két egyenletből határozható meg. Ekkor az együttható mátrix:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 \\ \mu_2 & 2 \end{bmatrix}.$$

Az egyenletrendszer mátrixa $n > 4$ esetén pedig

$$A = \begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \mu_{n-3} & 2 & \lambda_{n-3} \\ 0 & \dots & 0 & \mu_{n-2} & 2 \end{bmatrix},$$

egy három átlóból álló sávmátrix. Ez a mátrix nemszinguláris (ez bizonyítani például a Gersgorin tétel segítségével lehet).

Mint ahogy az A mátrix diagonálisan domináns is, ezért az egyenletrendszer főelemkiválasztás nélkül Gauss-eliminációval megoldható $O(n)$ régi flop művelettel.

Példa

Tegyük fel, hogy az f függvényről a következő táblázat áll rendelkezésünkre:

| | | | |
|------------|------|-----|-----|
| x | -1 | 0 | 1 |
| $y = f(x)$ | 1 | 0 | 1 |

Adjuk meg hozzá a természetes Spline-t!

Megoldás. Természetes Spline esetén $A = B = 0$. Ekkor $a_i = y_i$ miatt $a_1 = 1$ és $a_2 = 0$.

A (6)-os végpont-feltételből pedig $c_1 = 0$ adódik.

Mivel $h_1 = h_2 = 1$ és $\Delta_1 = -1, \Delta_2 = 1$, továbbá μ_1 -et a $c_1 = 0$ miatt ki sem kell számolni (egyébként $\mu_1 = 1 - \lambda_1 = 1 - 1/2 = 1/2$).

A (3) miatt

$$2c_2 = \frac{3}{1+1} \left(1 - (-1) + \frac{1}{6} \cdot 0 \right) = 3 \rightarrow c_2 = \frac{3}{2}$$

Továbbá a b -re vonatkozó egyenletekből $b_1 = -3/2$ és $b_2 = 0$ adódik; a d -re vonatkozóakból pedig $d_1 = 1/2$ és $d_2 = -1/2$.

A Spline két tagja tehát

$$S_1(x) = 1 - \frac{3}{2}(x+1) + \frac{1}{2}(x+1)^3 = \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x^3$$

$$S_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}x^3$$

Tétel

Az (1) – (6) feltételekkel meghatározott Spline létezik és egyértelmű.

Ha $f \in C^2[x_1, x_n]$, akkor létezik $K > 0$ konstans, amellyel fennáll a következő:

$$|f(x) - S(x)| \leq K \left(\max_{1 \leq i \leq n-1} h_i \right)^2 \quad (x \in [x_1, x_n]).$$

Ha pedig $f \in C^3[x_1, x_n]$, $A_n = f'''(x_1)$ és $B_n = f'''(x_n)$, akkor létezik $\tilde{K} > 0$ konstans, hogy

$$|f(x) - S(x)| \leq \tilde{K} \left(\max_{1 \leq i \leq n-1} h_i \right)^3 \quad (x \in [x_1, x_n]).$$

Megjegyzések

Ha az $f''(x_1)$ és $f''(x_n)$ információk nem állnak rendelkezésre, akkor a természetes Spline-t definiáló $A_n = B_n = 0$ választással élünk. A közelítés hibájára ekkor az első becslés érvényes. A természetes Spline az

$$\int_a^b [s''(x)]^2 dx \rightarrow \min \quad (s(x_i) = y_i, i = 1, \dots, n)$$

feltételes szélsőértékfeladat megoldása. A természetes elnevezés pedig a mechanikai tartalmára utal. Ugyanis, ha tekintünk egy ideálisan rugalmas rudat (Spline-t), amely átmegy az (x_i, y_i) pontokon (gömbcsúszkákon, surlódás nélkül), akkor a legkisebb alakváltozási energia mechanikai elve miatt a Spline azt az alakot veszi fel, amely az előző kifejezést minimalizálja.

Megjegyzések

A (6) végpont-feltétel helyett más kikötések is lehetségesek.

A Spline függvények előnyei: gyors és numerikusan stabil kiszámítás, nagyon jó közelítési tulajdonságok. Hátrányuk a bonyolult megadás, de ez számítógépek használata esetén nem jelent komoly problémát.