24.5.09

אנליזה נומרית - שיעור 10

בשיעור שעבר למדנו על אינטרפולציה ע"י פולינומים. הבעיה היא, כזכור, בהינתן $N+1$ נקודות $(x_i,y_i),\ i=0,\dots,N$, למצוא פולינום P מדרגה לכל היותר N המקיים $\forall i\ P(x_i)=y_i$. כבר למדנו מספר שיטות לעשות זאת:

1. וונדרמונד
2. פולינומי לגרנז'
3. פולינומי ניוטון
4. פולינום למקטעין

השיטה האחרונה היא לא באמת שיטה בפני עצמה. פשוט לפעמים אינטרפולציה לא מצליחה עבור פונקציות שהנגזרת שלהן גדלה הרבה יותר מהפונקציה עצמה, כמו למשל $f(x)=\frac{1}{1+x^2}$. במקרים כאלה מחלקים את הקטע לתת-קטעים ומבצעים אינטרפולציה עבור כל אחד בנפרד. אך גם בשיטה זו יש בעייתיות, כי הנגזרת של הפונקציה שנקבל בסוף היא לא רציפה.

Splines

נאמר שהפונקציה $S(x)$ בקטע $[a,b]$ היא spline מדרגה k ביחס לנקודות x_i ($i=0,\dots,N$) אם $S|_{[x_i,x_{i+1}]}=P_k$, כאשר P_k של S בקטע $[x_i,x_{i+1}]$ היא פולינום ממעלה k ומתקיים $S_k\in C^{k-1}[a,b]$ (גזירה ברציפות k-1 פעמים בקטע).

דרגות חופש

בכל קטע יש k+1 פרמטרים לקביעת P_k (כל הפרמטרים לקביעת פולינום ממעלה k), ויש N קטעים. לכן, יש $N(k+1)$ דרגות חופש.

אך כעת לפני שידאגנו שהפונקציה מקיימת את כל התנאים ההכרחיים על מנת שתהיה spline. קודם כל, דרשנו חלקות של $N-1$ הנקודות הפנימיות (x_i). בכל אחת יש k אילוצי חלקות: $S^{(0)},S^{(1)},\dots,S^{(k-1)}$.
סה"כ $(N-1)k$

נשארנו עם $N(k+1)-(N-1)k = N+k$. לכן, מימד המרחב S_k הוא $N+k$.

עבור Spline שמקיים אינטרפולציה (כלומר שקיבלנו אותו מתוך $N+1$ נקודות אינטרפולציה $((x_i,y_i))$, ישנם $N+1$ תנאים נוספים מהצורה $S(x_i)=y_i$. נשארנו $N+k-(N+1)=k-1$ דרגות חופש.

קביעת דרגות החופש הנותרות

אנחנו רוצים להוסיף אילוצים מלבד נקודות אינטרפולציה לבניית Spline מסוים, לכן נרצה להגיע לאפס דרגות חופש.

1. אם נניח ש-$f(x)$ מחזורית על $[a,b]$ (המחזור הוא $b-a$) אז:

$f(x_0)=f(x_N)$ (תנאי שכבר היה קיים מאלו הנקודות הנתונות)

$$k-1 \text{ אילוצים} \begin{cases} f'(x_0)=f'(x_N) \\ \vdots \\ f^{(k-1)}(x_0)=f^{(k-1)}(x_N) \end{cases}$$

ולכן Spline מחזורי נקבע באופן חד-חד ערכי ע"י נקודות אינטרפולציה.

2. Natural Spline: במקרה בו f לא מחזורית ולא ידועות הנגזרות בנקודות a,b, פשוט נאפס את הנגזרות הגבוהות בקצוות:

$S^{(k)}(x_0)=0,\ S^{(k)}(x_N)=0$

$S^{(k-1)}(x_0)=0,\ S^{(k-1)}(x_N)=0$

...

נאפס כמספר האילוצים לו אנו זקוקים.

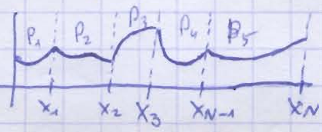
3. "Not a knot" Spline: השיטה האחרונה לקבוע את דרגות החופש שלנו היא דווקא לא בנקודות הקצה, אלא בנקודות לידן: x_1, x_{N-1}. עבור Spline מדרגה k, נדרוש שהנגזרת ה-k בנקודות אלה תהיה רציפה. ~~[illegible]~~

~~[illegible]~~

מכך שהנגזרת ה-k רציפה, נקבל שגם הנגזרת ה-$k-1$ רציפה ולמעשה כל הנגזרות בנקודות x_1, x_{N-1} עד הנגזרת ה-k רציפות.

אבל למה לעשות שנעשה את זה? להניח שהיא מחזורית זה
סבבה, כי יש הרבה פונקציות מחזוריות, ולאפס נגזרת בקצוות
זה גם כזה בערך, אבל לדרוש רציפות הנגזרת הא' בנקודות שליד
הקצה? זה נשמע כאילו משהו חשב על זה כשהוא היה
שיכור.

ובכן, אנחנו לא פוסלים את האפשרות הזו, אבל יש גם
הסבר הגיוני. ניזכר ש-spline זה פולינומים שונים שנפגשים בנקודות
האינטרפולציה, ככה:



אם הפולינום האחרון - P_N (בציור P_5) הוא $a_0+a_1x+\dots+a_kx^k$
והפולינום לפניו (בציור P_4) הוא $b_0+b_1x+\dots+b_kx^k$ אז רציפות
בכל k הנגזרות הראשונות (ועוד כולל את הנגזרת ה-0) גורר
ששני הפולינומים שווים. לכן נקבל פולינום אחד שמתאים ל-$[x_{N-2},x_N]$.
כנ"ל לגבי $[x_0,x_2]$. אז למעשה, "צמצמנו" את האפשרות לבחור את
הפולינום P_1 והפולינום P_N, כי הם חייבים להיות זהים לשכן שלהם.
השם "not a knot" נובע מהאינטואיציה ל-splines (שחס וחלילה
לא שמענו עליה בשיעור, אבל מגלים שיש ויקיפדיה) שspline הוא
כמו חוט גמיש, שקשרנו אותו למסמרים בנקודות מסוימות (נקודות
האינטרפולציה). הוא יכול לנוע בחופשיות בין המסמרים (אבל רק
בצורה יפה ופולינומיאלית כזו, כמו חוטים אמיתיים שלא כעס לא
נראים ככה:), אבל תמיד חייב להישאר במקום איפה שיש
מסמרים. בכך שדרשנו ש-$P_1=P_0$, למעשה, אנחנו דורשים שזה
יהיה spline שיהיה חוקי גם אם כלל לא היה שם קשר (או מסמר),
ולכן בעצם שני מהקשרים שלנו הם עכשיו בכלל not a knot.

גזירה ואינטגרציה נומרית

נתחיל משהו כללי שבהמשך נשתמש בו בשביל גזירה נומרית.

יהי $L: V \to \mathbb{R}$ אופרטור לינארי, כלומר: $L(\alpha f+\beta y)=\alpha L(f)+\beta L(y)$

ותהי סדרת נקודות $x_0,\dots,x_N$ כך ש- $f(x_j)=f_j$

אז לפי לגרנז', פולינום האינטרפולציה הוא:

$$P_N=\sum_{i=1}^{N} f_i l_i(x), \qquad e(x)=f(x)-P_N(x)$$

נגדיר את $E(x)$ להיות:

$$E(x):=L(e(x))=L(f(x)-P_N(x))=L(f(x))-L(P_N(x))$$

נשים לב גם כי:

$$L(P_n)=L\left(\sum_{i=0}^{N} f_i l_i(x)\right)=\sum_{i=0}^{N} f_i \cdot \underbrace{L(l_i(x))}_{a_i}$$

ולכן, נקבל:

$$L(f)=L(P_N)+E=\sum_{i=0}^{N} f_i a_i+E$$

נזכור את זה ונעבור לגזירה נומרית.

גזירה נומרית

נשים לב שגזירה היא אופרטור לינארי. נסמן: $G(f)=f'$

ניזכר מהו ה- ~~Condition Number~~ Condition number שמוגדר להיות $\frac{\Delta b}{\Delta x}$, כלומר היחס בין השגיאה בנתונים ההתחלתיים, לשגיאה בתוצאה שאנחנו מקבלים. מכיוון ש- G לינארי, נקבל:

$$f+\delta f \xrightarrow{G} (f+\delta f)'=f'+\delta f'$$

לכן קיבלנו שה- Condition number הוא:

$$k(f)^{*}=\|G'(f)\|=\left\|\frac{\partial G}{\partial f}\right\|=\left\|\frac{\partial f'}{\partial f}\right\|\simeq\left\|\frac{\delta f'}{\delta f}\right\|$$

* למי שתהה מאיפה הגיעו השמות G ו-k, G זה קיצור ל- Gzira, k זה קיצור ל- Kondition Number.

חישוב נוסחאות גזירה

יש לנו 3 נקודות x_{-1},x_0,x_1 כאשר $x_1=x_0+h$, $x_{-1}=x_0-h$.

לפי פיתוח טיילור אנחנו יודעים שמתקיים:

$$f_0 = f_0$$
$$f_1 = f_0 + hf_0' + \frac{h^2}{2}f_0'' + o(h^2)$$
$$f_{-1} = f_0 - hf_0' + \frac{h^2}{2}f_0'' - \frac{h^3}{3!}f''' + \frac{h^4}{4!}f_0^{(4)} + o(h^4)$$

את הנגזרת הראשונה אפשר לקרב באמצעות שתי נקודות:

$$\frac{f_1 - f_0}{h} = f_0' + \underbrace{\frac{h}{2}f_0'' + o(h)}_{E\ (\text{השגיאה})}$$

כמו גם באמצעות f_1, f_{-1}:

$$\frac{f_1 - f_{-1}}{2h} = f_0' + \frac{h^3}{6}f_0''' + o(h^4)$$

נזכור שכל תלות ~~...~~ לנגזרת מכל סדר על ידי ~~...~~ ערכיה בנקודות שונות (נתון) מתאימה.

נרצה לקרב את f_0' באמצעות שלוש הנקודות f_{-1}, f_0, f_1 (כפי שכבר עשינו, עכשיו הפעם נעשה זאת בדרך כללית יותר שתלמד אותנו לנגזרות עם דברים שלא ידענו לנגזרות בדרכים אחרות) לכן נחפש מקדמים a_{-1}, a_0, a_1 שיקיימו:

$$f_0' \approx a_{-1}f_{-1} + a_0f_0 + a_1f_1$$

נפתח את כל האיברים באמצעות פיתוח טיילור:

$$f_0' \approx \underbrace{a_{-1}f_0 - a_{-1}f_0'h + \frac{a_{-1}}{2}f''h^2 + o(h^2)}_{a_{-1}f_{-1}} + a_0f_0 + \underbrace{a_1f_0 + a_1f_0'h + \frac{a_1}{2}f_0''h^2 + o(h^2)}_{a_1f_1}$$

$$f_0' \approx (a_{-1} + a_0 + a_1)f_0 + (-a_1h + a_1h)f_0' + \left(\frac{a_{-1}}{2}h^2 + \frac{a_1}{2}h^2\right)f_0'' + o(h^2)$$

נשים לב כי השוויון הזה הוא שוויון פונקציונאלי (למעשה, כפי שגם בתוך כאן הוא לא, אבל הוא היה אם היינו עושים זאת עבור x כללי ולא אפס. בכל מקרה), נרצה שיהיה שוויון בין כל המקדמים של f_0, f_0', f_0''. נקבל מערכת משוואות לינארית:

$$\Theta(f_0):\ a_{-1} + a_0 + a_1 = 0$$
$$\Theta(f_0'):\ -ha_{-1} + 0 + ha_1 = 1$$
$$\Theta(f_0''):\ \frac{a_{-1}}{2}h^2 + 0 + \frac{a_1}{2}h^2 = 0$$

כעת נפתור את מערכת המשוואות ונקבל כי $a_0=0, a_1=\frac{1}{2h}, a_{-1}=\frac{-1}{2h}$.
וגילינו כי $f'_0=\frac{f_1-f_{-1}}{2h}$. כאמור, ידענו את זה, אבל עכשיו
ניתן לעשות חישוב דומה עבור נגזרות אחרות. אם נרצה לחשב
נגזרת שנייה בנקודה 0, נקבל את מערכת המשוואות הבאה:

$$\Theta(f_0): a_{-1}+a_0+a_1=0$$
$$\Theta(f'_0): -ha_{-1}+0+ha_1=0$$
$$\Theta(f''_0): \frac{a_{-1}}{2}h^2+0+\frac{a_1}{2}h^2=1$$

והפתרון שלה הוא $a_1=a_{-1}=\frac{1}{h^2}, a_0=-\frac{2}{h^2}$. קיבלנו ש- $f''_0=\frac{f_{-1}+f_1-2f_0}{h^2}$.

אם נרצה לחשב נגזרות יותר גבוהות נצטרך יותר נקודות.
זאת מכיוון שאם נרצה למצוא קירוב טוב לנגזרת חמישית
למשל, נצטרך לדרוש שהמקדם של $f_0, f'_0, f''_0, f^{(3)}_0, f^{(4)}_0$ יהיו כולם 0,
ושהמקדם של $f^{(5)}_0$ יהיה 1. אלה הן 5 משוואות, ולכן צריך
חמישה נעלמים (שנקבל על ידי לקיחת ערכים של חמש נקודות).
ניתן גם באמצעות יותר נקודות להשיג דיוק גבוה יותר לנגזרות
ראשונות. כך למשל, עבור 5 נקודות:

$$f'_0=\frac{1}{h}(f_{-2}-8f_{-1}+8f_1-f_2)+o(h^4)$$
$$f''(0)=\frac{1}{12h^2}(-f_{-2}+16f_{-1}-30f_0+16f_1-f_2)+o(h^4)$$

נחזור לרגע לקירוב נגזרת שנייה באמצעות שלוש נקודות. ראינו כי
$f'(x)=\frac{f(x-h)-2f(x)+f(x+h)}{h^2}$ (ראינו זאת ספציפית עבור $x=0$, אך
אין הבדל בין אפס לכל נקודה אחרת). לכן, אם נרצה לקרב בבת
אחת את הנגזרת השנייה ב-N נקודות שונות נחשב:

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ f_N \end{pmatrix}+O(h^2)=\begin{pmatrix} f''_0 \\ f''_1 \\ f''_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f''_{N-1} \\ f''_N \end{pmatrix}$$