1 Interpolacija polinomnim splajnovima

Vidjeli smo iz prethodnog da polinomi imaju dobra lokalna svojstva interpolacije, dok globalna uniformna pogreška može biti i vrlo velika. Niti posebnim izborom čvorova interpolacije ne možemo uvijek ukloniti ovaj problem. Povećavanje stupnja interpolacijskog polinoma može čak i povećati pogrešku, a interpolacijske polinome visokog stupnja ($n \geq 5$) općenito izbjegavamo koristiti. Kako onda smanjiti pogrešku ako i dalje želimo koristiti polinome za aproksimiranje funkcija? Ideja je konstruirati interpolacijske polinome niskog stupnja koji aproksimiraju promatranu funkciju po djelovima intervala od interesa, tj. provesti **po djelovima polinomnu interpolaciju**. Ako je funkcija koju promatramo glatka želimo u što većoj mjeri sačuvati glatkoću takvog interpolata. Po djelovima polinomne funkcije koje zadovoljavaju zadane uvjete glatkoće zovemo **polinomne splajn funkcije**. Ako još takav splajn zadovoljava i uvjete interpolacije nazivamo ga **interpolacijskim polinomnim splajnom**.

U daljnjem ćemo istražiti konstrukciju i svojstva aproksimacije linearnog i kubičnog splajna. Dok je za linearni splajn, u oznaci S_1, moguće dodatno zahtijevati najviše neprekidnost na cijelom intervalu od interesa (lijepljenje derivacije vodi na funkciju koja je globalno linearna), za kubični splajn S_3 možemo zahtijevati da pripada prostoru C^1 ili prostoru C^2 (dakle, moguće je naći dva kubična splajna).

Zašto izbjegavamo splajnove parnog stupnja? Pogledajmo to na primjeru paraboličkog splajna. Zamislimo da je interval od interesa $[a, b]$ podjeljen na n podintervala točkama

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Parabolički splajn S_2 je na svakom podintervalu polinom stupnja najviše dva, pa ima $3n$ nepoznatih parametara. Ako zahtjevamo da je S_2 interpolacijski splajn imamo $n+1$ zadanih uvjeta. Ako još zahtjevamo i da je $S_2 \in C^1[a, b]$ dobijemo po dva uvjeta za svaki unutrašnji čvor, tj $2(n-1) = 2n-2$ uvjeta. Dakle, ukupno imamo $3n-1$ uvjeta i $3n$ nepoznatih parametara, pa nam nedostaje jedan uvjet. Dodavanje uvjeta $S_2 \in C^2[a, b]$ nije "ekonomično", pa ostaje dodatni neki uvjet u rubovima intervala ili još jedan čvor interpolacije, no svakako se ne može postići "simetričnost" podataka. S ovim problemom se srećemo kod svih splajnova parnoga stupnja.

1.1 Linearni splajn

Najjednostavniji interpolacijski splajn, linearni splajn S_1, određen je uvjetom interpolacije u čvorovima $\{x_0, \ldots, x_n\}$ i globalnom neprekidnošću na $[a, b]$. Lako se dobije da vrijedi

$$S_1(x) = f_i \frac{x_{i+1} - x_i}{h_i} + f_{i+1} \frac{x - x_i}{h_i} = f_i + \frac{x - x_i}{h_i} (f_{i+1} - f_i), \qquad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

za sve $i = 0, 1, \ldots, n-1$, pri čemu je $h_i = x_{i+1} - x_i$.
Kako je nalaženje samog splajna jednostavno odmah ćemo ispitati pogrešku.

LEMA. Ako je f neprekidna na $[a, b]$ i $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ istog predznaka, onda postoji $\xi \in [a, b]$ takav da vrijedi

$$\alpha f(a) + \beta f(b) = (\alpha + \beta) f(\xi).$$

DOKAZ. Uočimo najprije da tvrdnja vrijedi ako je $\alpha = 0$ (tada je $\xi = b$) ili $\beta = 0$ (tada je $\xi = a$). Nadalje, ako je $f(a) = f(b)$ tvrdnja je očigledna jer možemo uzeti $\xi = a$ ili $\xi = b$. Pretpostavimo stoga da je $f(a) \neq f(b)$ i $\operatorname{sgn}(\alpha) = \operatorname{sgn}(\beta)$. U tom slučaju funkcija $\psi : [a, b] \to \mathbb{R}$ definirana s

$$\psi(x) = \alpha f(a) + \beta f(b) - (\alpha + \beta) f(x)$$

ima različite predznake na krajevima intervala $[a, b]$. Naime, vrijedi

$$\begin{aligned} \psi(a) &= \alpha f(a) + \beta f(b) - (\alpha + \beta) f(a) = \beta (f(b) - f(a)), \\ \psi(b) &= \alpha f(a) + \beta f(b) - (\alpha + \beta) f(b) = \alpha (f(a) - f(b)) = -\alpha (f(b) - f(a)) \end{aligned}$$

pa zbog neprekidnosti funkcije ψ (koja je takva jer je takva i funkcija f) slijedi da postoji $\xi \in (a, b)$ takav da vrijedi $\psi(\xi) = 0$, tj.

$$\alpha f(a) + \beta f(b) - (\alpha + \beta) f(x) = 0 \qquad \blacksquare$$

Da bismo iskazali glavni teorem o svojstvima aproksimacije linearnog splajna uvest ćemo radi jednostavnosti zapisa neke oznake.

$$\begin{aligned}
\omega_i(f) &= \max_{x',x''\in[x_i,x_{i+1}]} |f(x'') - f(x')|, \quad i = 0,1,\ldots,n-1, \\
\omega(f) &= \max_{0\le i\le n-1} \omega_i(f), \\
D^n f(x) &= \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} f(x) = f^{(n)}(x), \\
\|Df\|_\infty &= \sup_{x\in[a,b]} |Df(x)|, \\
\bar{h} &= \max_{0\le i\le n-1} h_i.
\end{aligned}$$

Vrijednost $\omega_i(f)$ zovemo **oscilacija** funkcije f na podintervalu $[x_i, x_{i+1}]$, a $\omega(f)$ **najveća oscilacija** funkcije f. Uočimo da glatkoća funkcije f nije potrebna u definiciji ovih veličina, već je dovoljno da je f neprekidna. D je **operator deriviranja**, a $\bar{h}$ **dijametar mreže**.

TEOREM. (Uniformna ocjena pogreške linearnog splajna)
Neka je S_1 linearni interpolacijski splajn za funkciju $f : [a, b] \to \mathbb{R}$. Obzirom na svojstva glatkoće funkcije f vrijedi:

1. ako je f neprekidna na $[a, b]$, onda je

$$\|S_1 - f\|_\infty = \max_{x \in [a,b]} |S_1(x) - f(x)| \leq \omega(f),$$

2. ako je f' ograničena na $[a, b]$, onda je

$$\|S_1 - f\|_\infty \leq \frac{\bar{h}}{2} \|Df\|_\infty,$$

3. ako je f neprekidna na $[a,b]$ i f' neprekidna na svakom od pointervala $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$, onda je

$$\|S_1 - f\|_\infty \leq \frac{\bar{h}}{4}\omega\left(Df\right),$$

4. ako je f neprekidna na $[a,b]$ i f'' ograničena na svakom od pointervala $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$, onda je

$$\|S_1 - f\|_\infty \leq \frac{\bar{h}^2}{8}\left\|D^2 f\right\|_\infty.$$

DOKAZ. Neka je za $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ i $x \in [x_i, x_{i+1}]$ označeno

$$t = \frac{x - x_i}{h_i} = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}.$$

Vrijedi

$$\begin{aligned} E(x) &= S_1(x) - f(x) = f_i + \frac{x - x_i}{h_i}(f_{i+1} - f_i) - f(x) \\ &= (1 - t) f_i + t f_{i+1} - f(x). \end{aligned}$$

Uočimo da je $x \in [x_i, x_{i+1}]$ ekvivalentno s $t \in [0, 1]$, pa t i $1 - t$ imaju isti predznak ili je jedan od njih nula.

1. Ako je f neprekidna na $[a, b]$, onda za svaki $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ prema prethodnoj lemi postoji $\xi \in [x_i, x_{i+1}]$ takav da vrijedi

$$(1-t) f_i + t f_{i+1} = (1-t+t) f(\xi) = f(\xi),$$

pa je za svaki $x \in [x_i, x_{i+1}]$ ispunjeno

$$E(x) = f(\xi) - f(x).$$

Dakle, na svakom podintervalu $[x_i, x_{i+1}]$, $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$, vrijedi

$$|E(x)| = |f(\xi) - f(x)| \leq \omega_i(f) \leq \omega(f), \quad x \in [x_i, x_{i+1}],$$

pa je

$$\max_{x \in [a,b]} |E(x)| = \max_{x \in [a,b]} |S_1(x) - f(x)| \leq \omega(f).$$

2. Ako je f' ograničena na $[a, b]$, onda je $\|Df\|_\infty$ konačan broj i za svaki $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ vrijedi

$$f_i = f(x) + \int_x^{x_i} Df(v)\,\mathrm{d}v, \quad f_{i+1} = f(x) + \int_x^{x_{i+1}} Df(v)\,\mathrm{d}v.$$

Supstitucijom u izraz za $E(x)$, gdje je $x \in [x_i, x_{i+1}]$ i $t \in [0, 1]$, dobijemo

$$E(x) = -(1-t) \int_{x_i}^{x} Df(v)\,\mathrm{d}v + t \int_x^{x_{i+1}} Df(v)\,\mathrm{d}v,$$

pa je

$$|E(x)| \leq (1-t) \int_{x_i}^{x} |Df(v)|\,\mathrm{d}v + t \int_x^{x_{i+1}} |Df(v)|\,\mathrm{d}v.$$

Kako je za sve $v \in [a, b]$ ispunjeno $|Df(v)| \leq \|Df\|_\infty$, iz gornjeg slijedi

$$\begin{aligned}|E(x)| &\le \left[(1-t)\int_{x_i}^{x} \mathrm{d}v + t\int_{x}^{x_{i+1}} \mathrm{d}v\right] \|Df\|_\infty \\ &= [(1-t)(h_i t + x_i - x_i) + t(x_{i+1} - h_i t - x_i)] \|Df\|_\infty \\ &= 2t(1-t)h_i \|Df\|_\infty .\end{aligned}$$

Parabola $y = 2t(1-t)$ na $[0,1]$ u točki $t = 1/2$ poprima maksimalnu vrijednost $1/2$, pa je za sve $x \in [x_i, x_{i+1}]$ ispunjeno

$$|E(x)| \le \frac{h_i}{2} \|Df\|_\infty \le \frac{\bar{h}}{2} \|Df\|_\infty .$$

Dakle,

$$\max_{x\in[a,b]} |E(x)| = \max_{x\in[a,b]} |S_1(x) - f(x)| \le \frac{\bar{h}}{2} \|Df\|_\infty .$$

3. Neka je f neprekidna na $[a, b]$ i f' neprekidna na svakom od pointervala $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$. Uzmimo proizvoljan $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$. Prema Taylorovoj formuli s Lagrangeovim oblikom ostatka za $\xi, \eta \in [x_i, x_{i+1}]$ imamo

$$f_i = f(x) - t h_i Df(\xi), \quad f_{i+1} = f(x) + (1-t) h_i Df(\eta).$$

Supstitucijom u izraz za $E(x)$, gdje je $x \in [x_i, x_{i+1}]$ i $t \in [0, 1]$, dobijemo

$$E(x) = t(1-t) h_i (Df(\eta) - Df(\xi)),$$

odakle je

$$|E(x)| = t(1-t) h_i |Df(\eta) - Df(\xi)| \leq t(1-t) h_i \omega_i(Df).$$

Slično kao i prije, ocjenom vrijednosti $t(1-t)$ za $t \in [0, 1]$ dobijemo

$$|E(x)| \leq \frac{1}{4} h_i \omega_i(Df) \leq \frac{\bar{h}}{4} \omega(Df), \quad x \in [x_i, x_{i+1}].$$

Sada lako slijedi

$$\max_{x \in [a,b]} |E(x)| = \max_{x \in [a,b]} |S_1(x) - f(x)| \leq \frac{\bar{h}}{4} \omega(Df).$$

4. I na kraju neka je f neprekidna na $[a, b]$ i f'' ograničena na svakom od pointervala $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$. Tada za svaki $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ vrijedi Taylorova formula s integralnim oblikom ostatka

$$\begin{aligned} f_i &= f(x) - th_i Df(x) + \int_x^{x_i} (x_i - v)\, D^2 f(v)\, \mathrm{d}v, \\ f_{i+1} &= f(x) - (1-t)\, h_i Df(x) + \int_x^{x_{i+1}} (x_{i+1} - v)\, D^2 f(v)\, \mathrm{d}v. \end{aligned}$$

Iz formule za grešku E slijedi

$$E(x) = (1-t) \int_x^{x_i} (x_i - v)\, D^2 f(v)\, \mathrm{d}v + t \int_x^{x_{i+1}} (x_{i+1} - v)\, D^2 f(v)\, \mathrm{d}v.$$

Odavde lako dobijemo

$$|E(x)| \le \frac{1}{2} h_i^2 t (1-t) \left\| D^2 f \right\|_\infty \le \frac{1}{8} h_i^2 \left\| D^2 f \right\|_\infty \le \frac{1}{8} \bar{h}^2 \left\| D^2 f \right\|_\infty,$$

i to vrijedi za sve $x \in [x_i, x_{i+1}]$. Dakle,

$$\max_{x \in [a,b]} |E(x)| = \max_{x \in [a,b]} |S_1(x) - f(x)| \le \frac{1}{8} \bar{h}^2 \left\| D^2 f \right\|_\infty \qquad \blacksquare$$

Ovakvu vrstu teorema nazivamo **direktnim teoremima teorije aproksimacija**. Primijetimo da se prirodno nameću dva pitanja:

1. Da li su navedene ocjene pogrešaka najbolje moguće? Možemo li možda dobiti bolji red aproksimacije finijim ocjenama? Da li su konstante u ocjeni greške najbolje moguće? Teoremi koji se bave ovom problematikom zovu se **inverzni teoremi teorije aproksimacija**. U većini slučajeva oni su iskazi tipa "red aproksimacije naveden u direktnom teoremu je najbolji mogući", jer da nije tako trebalo bi popraviti direktni teorem! Ocjena optimalnosti konstanti je neugodan problem koji općenito nije riješen, a u svakom konkretnom slučaju treba konstruirati funkciju na kojoj se dostiže konstanta iz direktnog teorema, čime se pokazuje da je ona najbolja moguća.

2. Možemo li dobiti sve bolje i bolje ocjene za grešku dodavanjem novih uvjeta na glatkoću funkcije? Teoremi koji se bave ovom problematikom zovu se **teoremi zasićenja teorije aproksimacija**. I ovi su teoremi u principu negativnog karaktera. Npr. za linearni splajn nikakvi daljnji dodatni uvjeti na glatkoću funkcije f neće povečati red aproksimacije s h^2.

1.2 Hermiteov kubični splajn

Hermiteov kubični splajn se razmatra na sličan način kao i Hermiteov interpolacijski polinom. Prvi je netrivijalni slučaj po djelovima kubični splajn s globalno neprekidnom derivacijom.

DEFINICIJA. Neka su u čvorovima $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$ zadane vrijednosti f_i, f_i' za $i = 0, 1, \ldots, n$. Hermiteov kubični splajn je funkcija $H \in C^1[a, b]$ koja zadovoljava uvjete

1. Za svaki $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ vrijedi

$$H(x) = a_{i0} + a_{i1}(x - x_i) + a_{i2}(x - x_i)^2 + a_{i3}(x - x_i)^3, \ x \in [x_i, x_{i+1}].$$

2. Za svaki $i \in \{0, 1, \ldots, n\}$ vrijedi

$$H(x_i) = f_i, \quad DH(x_i) = f_i'.$$

Koristeći Hermiteovu bazu na svakom podintervalu mreže $[x_i, x_{i+1}]$ lako vidimo da vrijedi

$$H(x) = \varphi_1(t)\, f_i + \varphi_2(t)\, f_{i+1} + \varphi_3(t)\, h_i f_i' + \varphi_4(t)\, h_i f_{i+1}'$$

gdje je

$$\begin{aligned} t &= \frac{x - x_i}{h_i}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \\ \varphi_1(t) &= (1-t)^2 (1+2t), \\ \varphi_2(t) &= t^2 (3-2t), \\ \varphi_3(t) &= t\left(1-t^2\right), \\ \varphi_4(t) &= -t^2 (1-t). \end{aligned}$$

Napomenimo da kod konkretnog računanja treba najprije izračunati koeficijente A_i i $B_i,\ i = 0, 1, \ldots, \infty$, i to po formulama

$$\begin{aligned} A_i &= -2\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} + f_i' + f_{i+1}', \\ B_i &= A_i + \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} - f_i', \end{aligned}$$

i zapamtiti ih. Za zadanu točku $x \in [x_i, x_{i+1}]$ vrijednost Hermiteovog kubičnog splajna u točki x računamo formulom

$$H(x) = f_i + t h_i \left[f_i' + t \left(B_i + t A_i \right) \right].$$

TEOREM. (Uniformna ocjena pogreške Hermiteovog kubičnog splajna)
Neka je H Hermiteov kubični interpolacijski splajn za funkciju $f : [a, b] \to \mathbb{R}$. Obzirom na svojstva glatkoće funkcije f vrijedi:

1. ako je f' neprekidna na $[a, b]$, onda je

$$\|H - f\|_\infty = \max_{x\in[a,b]} |H(x) - f(x)| \leq \frac{3\bar{h}}{8}\omega(Df),$$

2. ako je f'' ograničena na $[a, b]$, onda je

$$\|H - f\|_\infty \leq \frac{\bar{h}^2}{16} \left\|D^2 f\right\|_\infty,$$

3. ako je f' neprekidna na $[a, b]$ i f'' neprekidna na svakom od pointervala $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$, onda je

$$\|H - f\|_\infty \leq \frac{\bar{h}^2}{32}\omega\left(D^2 f\right),$$

4. ako je f' neprekidna na $[a, b]$ i f''' ograničena na svakom od pointervala $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$, onda je

$$\|H - f\|_\infty \leq \frac{\bar{h}^3}{96}\left\|D^3 f\right\|_\infty.$$

DOKAZ. Samo za ilustraciju dajemo dokaz u prvom slučaju.

Neka je za proizvoljan $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ i za $x \in [x_i, x_{i+1}]$ označeno

$$t = \frac{x - x_i}{h_i} = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}.$$

Vrijedi

$$\begin{aligned} E(x) &= H(x) - f(x) \\ &= \varphi_1(t) f_i + \varphi_2(t) f_{i+1} + \varphi_3(t) h_i f_i' + \varphi_4(t) h_i f_{i+1}' - f(x). \end{aligned}$$

Ako u gornjem f_i i f_{i+1} zamijenimo njihovim Taylorovim razvojem oko točke $x = x_i + th$ s ostatkom u Lagrangeovom obliku, tj. za neke $\xi, \eta \in [x_i, x_{i+1}]$ stavimo

$$f_i = f(x) - th_i Df(\xi), \quad f_{i+1} = f(x) + (1-t) h_i Df(\eta),$$

onda zbog $\varphi_1(t) + \varphi_2(t) = 1$ dobijemo

$$E(x) = h_i \left[(1-t) \varphi_2(t) Df(\xi) - t\varphi_1(t) Df(\eta) + \varphi_3(t) f_i' + \varphi_4(t) f_{i+1}' \right].$$

Grupiramo li članove istog predznaka, po prethodnoj lemi dobijemo

$$E(x) = h_i t(1-t)\left(1+2t-2t^2\right)\left(Df\left(\bar{\xi}\right) - Df(\bar{\eta})\right),$$

gdje su $\bar{\xi}, \bar{\eta} \in [x_i, x_{i+1}]$. Sada odmah slijedi ocjena greške

$$|E(x)| \leq h_i t(1-t)\left(1+2t-2t^2\right)\omega_i(Df).$$

Uzimajući na intervalu $[0,1]$ maksimum polinoma p zadanog s $p(t) = t(1-t)\left(1+2t-2t^2\right)$, a koji iznosi $3/8$, dobijemo da na svakom podintervalu $[x_i, x_{i+1}]$ za proizvoljni x vrijedi

$$|E(x)| \leq \frac{3}{8} h_i \omega_i(Df) \leq \frac{3}{8}\bar{h}\omega(Df).$$

Dakle,

$$\max_{x\in[a,b]} |E(x)| = \max_{x\in[a,b]} |H(x) - f(x)| \leq \frac{3}{8}\bar{h}\omega(Df) \qquad \blacksquare$$

1.3 Potpuni kubični splajn

Već smo spomenuli da s obzirom na zahtjeve koje postavljamo na globalnu neprekidnost prve i druge derivacije kubičnog splajna dobivamo dva različita interpolacijska splajna. U prvom slučaju, kada je prva derivacija globalno neprekidna i poklapa se u čvorovima s vrijednostima derivacije funkcije f, dobili smo Hermiteov kubični splajn. Na žalost, on je ponajviše od teorijskog značenja. U drugom slučaju, kada zahtijevamo globalnu neprekidnost druge derivacije, dobivamo splajn koji se jednostavno zove **kubični interpolacijski splajn**. Od svih splajn funkcija, kubični interpolacijski splajn je najviše korišten i najbolje izučen.

DEFINICIJA. Neka su u čvorovima $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$ zadane vrijednosti f_i za $i = 0, 1, \ldots, n$. Potpuni kubični splajn je funkcija $S_3 \in C^2[a, b]$ koja zadovoljava uvjete

1. Za svaki $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ vrijedi

$$S_3(x) = a_{i0} + a_{i1}(x - x_i) + a_{i2}(x - x_i)^2 + a_{i3}(x - x_i)^3, \ x \in [x_i, x_{i+1}].$$

2. Za svaki $i \in \{0, 1, \ldots, n\}$ vrijedi $S_3(x_i) = f_i$.

Uočimo da nema interpoliranja u vrijednostima derivacije jer tražimo što veću glatkoću splajna. Dodatni uvjeti se zadaju na rubovima intervala, pa se nazivaju **rubnim uvjetima**. Ovdje navodimo neke od njih koji se često javljaju.

$(R1)$ $DS_3\left(a\right)=Df\left(a\right), \quad DS_3\left(b\right)=Df\left(b\right);$

$(R2)$ $D^2S_3\left(a\right)=0, \ \ D^2S_3\left(b\right)=0;$

$(R3)$ $D^2S_3\left(a\right)=D^2f\left(a\right), \ \ D^2S_3\left(b\right)=D^2f\left(b\right);$

$(R4)$ $DS_3\left(a\right)=Df\left(b\right), \ D^2S_3\left(a\right)=D^2f\left(b\right).$

Prve uvjete nazivamo **potpunim** rubnim uvjetima, druge **prirodnim** rubnim uvjetima, a četvrte **periodičkim** rubnim uvjetima. Sukladno tome nazivamo i pripadne splajnove, pa razlikujemo **potpuni**, **prirodni** i **periodički** kubični splajn. Kojeg ćemo kada koristiti na očigledan način ovisi o samoj funkciji koju aproksimiramo.

Algoritam za konstrukciju interpolacijskog kubičnog splajna možemo izvesti na dva načina. U prvom, za nepoznate parametre koje treba odrediti uzimamo vrijednosti prve derivacije splajna u čvorovima. Tradicionalna oznaka za te parametre je

$$m_i = DS_3(x_i), \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Uočimo da se oni ne izjednačavaju s vrijednostima f' u čvorovima, već se ostavljaju slobodnima. Određujemo ih iz uvjeta da se treba postići globalna pripadnost splajna klasi $C^2[a,b]$. U drugom, za nepoznate parametre koje treba odrediti uzimamo vrijednosti druge derivacije splajna u čvorovima. Tradicionalna oznaka za te parametre je

$$M_i = D^2S_3(x_i), \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Određujemo ih iz uvjeta da se treba postići globalna pripadnost splajna klasi $C[a,b]$.

I prvi i drugi slučaj javljaju se podjednako često u praksi, pa ćemo ih proučiti oba.

Prvi algoritam dobivamo primijenom Hermiteove interpolacije uz uvjete

$$S_3(x_i) = f_i, \quad DS_3(x_i) = m_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Naravno, pri tom su f_i zadani, a m_i nepoznati. Uz standardne oznake kao u prethodnom odjeljku kubični splajn S_3 možemo na svakom podintervalu $[x_i, x_{i+1}]$ napisati u obliku

$$\begin{aligned} S_3(x) \;=\; & f_i (1-t)^2 (1+2t) + f_{i+1} t^2 (3-2t) \\ & + m_i h_i t (1-t)^2 - m_{i+1} h_i t^2 (1-t), \end{aligned}$$

gdje je

$$t = \frac{x - x_i}{h_i}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}].$$

Nepoznate parametre m_i i m_{i+1} koji se tu javljaju moramo odrediti iz uvjeta da je druga dervacija $D^2 S_3$ neprekidna u unutrašnjim čvorovima.

Budući je

$$
\begin{aligned}
D^2 S_3(x) &= \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i^2}(6 - 12t) + \frac{m_i}{h_i}(-4 + 6t) + \frac{m_{i+1}}{h_i}(-2 + 6t), \\
t &= \frac{x - x_i}{h_i}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \\
D^2 S_3(x) &= \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}^2}(6 - 12t) + \frac{m_{i-1}}{h_{i-1}}(-4 + 6t) + \frac{m_i}{h_{i-1}}(-2 + 6t), \\
t &= \frac{x - x_{i-1}}{h_{i-1}}, \quad x \in [x_{i-1}, x_i],
\end{aligned}
$$

slijedi

$$
\begin{aligned}
D^2 S_3(x_i + 0) &= 6\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i^2} - 4\frac{m_i}{h_i} - 2\frac{m_{i+1}}{h_i}, \\
D^2 S_3(x_i - 0) &= -6\frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}^2} + 2\frac{m_{i-1}}{h_{i-1}} + 4\frac{m_i}{h_{i-1}}.
\end{aligned}
$$

jer u prvom slučaju $t \to 0$, a u drugom slučaju $t \to 1$.

Uz oznake

$$\mu_i = \frac{h_{i-1}}{h_{i-1} + h_i}, \quad \lambda_i = 1 - \mu_i, \quad c_i = 3\left(\mu_i \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} + \lambda_i \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}}\right),$$

uvjete neprekidnosti druge derivacije D^2S_3 u x_i za $i = 1, \ldots, n-1$ možemo pisati u obliku

$$\lambda_i m_{i-1} + 2m_i + \mu_i m_{i+1} = c_i, \quad i = 1, \ldots, n-1.$$

Dobili smo $n-1$ jednadžbi s $n+1$ nepoznanica m_i, pa nam nedostaju još dvije jednadžbe. Njih ćemo dobiti iz rubnih uvjeta. Uz uvjete tipa $(R1) - (R3)$ dobivamo sustav oblika

$$\begin{aligned} 2m_0 + \mu_0^* m_1 &= c_0^*, \\ \lambda_i m_{i-1} + 2m_i + \mu_i m_{i+1} &= c_i, \quad i = 1, \ldots, n-1, \\ \lambda_n^* m_{n-1} + 2m_n &= c_n^*. \end{aligned}$$

Koeficijenti $\mu_0^*, c_0^*, \lambda_n^*$ i c_n^* određuju se iz samih rubnih uvjeta. Imamo

$(R1)$ $\mu_0^* = \lambda_n^* = 0, \quad c_0^* = 2Df\left(a\right), \quad c_n^* = 2Df\left(b\right).$

$(R3)$ $\mu_0^* = \lambda_n^* = 1, \quad c_0^* = 3\frac{f_1 - f_0}{h_0} - \frac{h_0}{2}D^2f\left(a\right), \quad c_n^* = 3\frac{f_n - f_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{h_{n-1}}{2}D^2f\left(b\right).$

$(R2)$ Specijalni slučaj prethodnog za $D^2f\left(a\right) = D^2f\left(b\right) = 0.$

Ako je f periodička funkcija onda je $f_0 = f_n$ i $m_0 = m_n$. Da bismo zapisali uvjet periodičnosti za drugu derivaciju možemo npr. periodički produljiti mrežu tako da dodamo još jedan čvor x_{n+1} uz uvjet $x_{n+1} - x_n = x_1 - x_0$, tj. $h_n = h_0$. Zbog pretpostavke periodičnosti možemo staviti i $f_1 = f_{n+1}$ i $m_1 = m_{n+1}$. Na taj način uvjet periodičnosti druge derivacije postaje ekvivalentan uvjetu neprekidnosti druge derivacije u točki x_n.

Kada iskoristimo sve pretpostavke u slučaju uvjeta $(R4)$ dobijemo sustav oblika

$$\begin{aligned} 2m_1 + \mu_1 m_2 + \lambda_1 m_n &= c_1, \\ \lambda_i m_{i-1} + 2m_i + \mu_i m_{i+1} &= c_i, \quad i = 2, \ldots, n-1, \\ \mu_n m_1 + \lambda_n m_{n-1} + 2m_n &= c_n. \end{aligned}$$

Ostaje odgovoriti na očito pitanje: da li dobiveni sustav ima jedinstveno rješenje?

TEOREM. Postoji jedinstveni interpolacijski kubični splajn koji zadovoljava jedan od rubnih uvjeta $(R1) - (R4)$.

DOKAZ. U svim navedenim slučajevima se vidi da je matrica sustava strogo dijagonalno dominantna, što povlači regularnost. Naime, svi dijagonalni elementi su jednaki 2, a zbroj izvandijagonalnih elemenata je najviše $\lambda_i + \mu_i = 1$ po retku ■

Postupak računanja $S_3(x)$ za neki $x \in [a,b]$ koji nije čvor je sljedeći:

1. Riješimo linearni sustav za $m_0, \ldots, m_n$ (ovo radimo samo jednom). Za to je potrebno samo $\mathcal{O}(n)$ operacija zbog posebne strukture matrice sustava.
2. Binarnim pretraživanjem nađemo indeks i takav da vrijedi $x \in [x_i, x_{i+1}]$.
3. Hornerovom shemom (vidi skraćeni postupak kod Hermiteovog splajna) izračunamo $S_3(x)$.

U drugom slučaju, za svaki interval $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$, stavimo uvjete

$$S_3(x_i) = f_i, \quad D^2 S_3(x_i) = M_i, \quad S_3(x_{i+1}) = f_{i+1}, \quad D^2 S_3(x_{i+1}) = M_{i+1}.$$

Lako se vidi da ovako dobiveni sustav opet ima jedinstveno rješenje (naime imamo dovoljno podataka za izračunati koeficijente kubnog polinoma na svakom od pidintervala), pa se uz standardne oznake kao u prethodnom odjeljku izraz za kubični splajn S_3 može na svakom podintervalu $[x_i, x_{i+1}]$ napisati u obliku

$$S_3(x) = f_i(1-t) + f_{i+1}t - \frac{h_i^2}{6}t(1-t)\left[M_i(2-t) + M_{i+1}(1+t)\right].$$

Nepoznate parametre M_i i M_{i+1} koji se tu javljaju moramo odrediti iz uvjeta da je prva dervacija DS_3 neprekidna u unutrašnjim čvorovima.

Iz izraza za S_3 lako dobijemo

$$\begin{aligned} DS_3(x) &= \frac{f_{i+1}-f_i}{h_i} - \frac{h_i^2}{6}\left[M_i\left(2-6t+3t^2\right)+M_{i+1}\left(1-3t^2\right)\right] \\ D^2S_3(x) &= M_i(1-t)+M_{i+1}t, \\ D^3S_3(x) &= \frac{M_{i+1}-M_i}{h_i}. \end{aligned}$$

Sada ćemo iskoristiti uvjet globalne neprekidnosti prve derivacije. Za unutrašnje čvorove $(i = 1, \ldots, n-1)$ dobijemo

$$\begin{aligned} DS_3(x_i+0) &= \frac{f_{i+1}-f_i}{h_i} - \frac{h_i}{6}(2M_i+M_{i+1}), \\ DS_3(x_i-0) &= \frac{f_i-f_{i-1}}{h_{i-1}} - \frac{h_{i-1}}{6}(M_{i-1}+2M_i), \end{aligned}$$

pa iz uvjeta neprekidnosti slijedi $n - 1$ jednadžbi traženog linearnog sustava

$$\mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_i = \frac{6}{h_{i-1} + h_i} \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} \right),$$

a μ_i i λ_i su definirani kao u prethodnom slučaju. Daljnji postupak je isti kao u prvom slučaju s koeficijentima m_i.

Ocjeniti grešku za kubični splajn je puno teže nego u slučaju Hermiteovog kubičnog splajna, budući su koeficijenti kubičnog splajna zadani implicitno kao rješenja linearnog sustava.

2 Diskretna metoda najmanjih kvadrata

Neka je funkcija f zadana na diskretnom skupu točaka $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ kojih je mnogo više nego nepoznatih parametara aproksimacijske funkcije $\varphi(x, a_0, \ldots, a_m)$. Pokušajmo funkciju φ odrediti iz uvjeta da euklidska norma (norma 2) vektora pogreške u čvorovima aproksimacije bude najmanja moguća, tj. da minimiziramo funkciju S definiranu s

$$S = \sum_{k=0}^{n} \left(f(x_k) - \varphi(x_k)\right)^2 .$$

Ovu funkciju (koja je u stvari definirana kao kvadrat euklidske norme) interpretiramo kao funkciju nepoznatih parametara $a_0, \ldots, a_m$, tj.

$$S = S(a_0, \ldots, a_m) .$$

Ako je S dovoljno glatka funkcija, nužni uvjeti ekstrema su

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, \quad k = 0, \ldots, m.$$

Pokazat ćemo da nas takav pristup vodi na tzv. **sustav normalnih jednadžbi**.

2.1 Linearni problem i linearizacija

Ilustrirajmo gornju ideju jednim jednostavnim primjerom. Pretpostavimo da je zadana mreža $\{(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)\}$ čiji model želimo po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimirati pravcem

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x.$$

Greška aprokismacije u čvorovima koju minimiziramo je dana s

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2 = \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k)^2 .$$

Nužni uvjeti minimizacije su

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k), \\ 0 &= \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k) x_k. \end{aligned}$$

Nakon sređivanja dobivamo sustav

$$
\begin{aligned}
a_0\,(n+1) + a_1 \sum_{k=0}^{n} x_k \; &= \; \sum_{k=0}^{n} f_k \\
a_0 \sum_{k=0}^{n} x_k + a_1 \sum_{k=0}^{n} x_k^2 \; &= \; \sum_{k=0}^{n} f_k x_k .
\end{aligned}
$$

Uvedemo li standardne skraćene oznake

$$
s_l = \sum_{k=0}^{n} x_k^l, \quad t_l = \sum_{k=0}^{n} f_k x_k^l, \quad l \geq 0,
$$

dobiveni sustav možemo pisati u obliku

$$
\begin{aligned}
s_0 a_0 + s_1 a_1 \; &= \; t_0 \\
s_1 a_0 + s_2 a_1 \; &= \; t_1 .
\end{aligned}
$$

Nije teško pokazati da je matrica ovog sustava regularna jer je njena determinanata $D = s_0 s_2 - s_1^2$ različita od nule. Naime, definiramo li u $\mathbb{R}^{n+1}$ vektore

$$\boldsymbol{e} = (1, 1, \ldots, 1)\,, \quad \boldsymbol{x} = (x_0, x_1, \ldots, x_n)$$

i primijenimo na njih Cauchy-Schwarzovu nejednakost, dobijemo

$$\left(\sum_{k=0}^{n} e_k x_k \right)^2 \leq \left(\sum_{k=0}^{n} e_k^2 \right) \left(\sum_{k=0}^{n} x_k^2 \right),$$

tj.,

$$s_1^2 = \left(\sum_{k=0}^{n} x_k \right)^2 \leq (n+1) \sum_{k=0}^{n} x_k = s_0 s_2,$$

pri čemu jednakost vrijedi jedino kada su promatrani vektori kolinearni, a $\boldsymbol{e}$ i $\boldsymbol{x}$ to nikada nisu. Dakle, vrijedi $s_0 s_2 > s_1^2$, pa je $D > 0$.

Nadalje, lako se vidi da je ekstrem dobiven iz ovih uvjeta zaista minimum funkcije S jer graf funkcije S paraboloid s "otvorom prema gore", pa S može imati samo minimum. Za funkciju φ mogli smo uzeti i polinom višeg stupnja,

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m,$$

a postupak bi bio posve analogan. Ipak, stupanj ne bi trebao prelaziti 10 jer je tada dobiveni sustav vrlo loše uvjetovan (matrica sustava može biti gotovo singularna), pa rezultati mogu biti posve pogrešni. Ako baš moramo odabrati aproksimiranje polinomima višeg stupnja, onda nikako ne bismo trebali koristiti prikaz u bazi potencija, već trebamo koristiti neke od ortogonalnih polinoma.
Linearni model metode najmanjih kvadrata je primjenjiv i na opću linearnu funkciju φ zadanu s

$$\varphi(x) = a_0 \varphi_0(x) + \cdots + a_m \varphi_m(x),$$

pri čemu su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ neke poznate funkcije. I to ćemo ilustrirati jednim primjerom.

Pretpostavimo da je zadana mreža $\{(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)\}$ čiji model želimo po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimirati funkcijom

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x),$$

pri čemu su φ_0 i φ_1 neke zadane funkcije. Greška aprokismacije u čvorovima je dana s

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2 = \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0\varphi_0(x_k) - a_1\varphi_1(x_k))^2 .$$

Nužni uvjeti minimizacije su

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2\sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0\varphi_0(x_k) - a_1\varphi_1(x_k))\,\varphi_0(x_k), \\ 0 &= \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2\sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0\varphi_0(x_k) - a_1\varphi_1(x_k))\,\varphi_1(x_k). \end{aligned}$$

Uvedemo li standardne skraćene oznake

$$\begin{aligned} s_0 &= \sum_{k=0}^{n} \varphi_0^2(x_k), \quad s_1 = \sum_{k=0}^{n} \varphi_0(x_k)\,\varphi_1(x_k), \quad s_2 = \sum_{k=0}^{n} \varphi_1^2(x_k), \\ t_0 &= \sum_{k=0}^{n} f_k\varphi_0(x_k), \quad t_1 = \sum_{k=0}^{n} f_k\varphi_1(x_k), \end{aligned}$$

dobivamo sustav potpuno istog oblika

$$\begin{aligned} s_0a_0 + s_1a_1 &= t_0 \\ s_1a_0 + s_2a_1 &= t_1. \end{aligned}$$

Može se pokazati da ovako dobiveni sustav ima ista svojstva kao i sustav u prethodnom primjeru.

Sada se postavlja pitanje: što ako trebamo aproksimacijsku funkciju φ koja nelinearno ovisi o parametrima? Dobili bismo nelinerani sustav jednadžbi koji se općenito teško rješava. Promatrani problem bi postao ozbiljan optimizacijski problem koji bi se onda i rješavao odgovarajućim optimizacijskim metodama.

No postoji i drugi pristup. Katkada jednostavnim transformacijama početni problem možemo transformirati na linearni problem najmanjih kvadrata. No (na žalost) rješenja ovih dvaju problema općenito ne moraju biti jednaka. Problem je u različitim mjerama za udaljenost točaka, odnosno mjerama za grešku. To ćemo ilustrirati jednim primjerom.

Pretpostavimo da je zadana mreža $\{(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)\}$ čiji model želimo po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimirati funkcijom

$$\varphi(x) = a_0 e^{a_1 x}.$$

Greška aproksimacije u čvorovima koju minimiziramo je dana s

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2 = \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x})^2 .$$

Nužni uvjeti minimizacije su

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x_k}) \, e^{a_1 x_k}, \\ 0 &= \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x}) \, a_0 x_k e^{a_1 x}, \end{aligned}$$

što je nelinearni sustav jednadžbi.

No logaritmiramo li funkciju φ dobivamo

$$\ln \varphi(x) = \ln a_0 + a_1 x.$$

Sada možemo početni problem svesti na linearni problem najmanjih kvadrata u kojem je aproksimacijska funkcija funkcija ψ definirana s

$$\psi(x) = b_0 + b_1 x, \quad b_0 = \ln a_0, \quad b_1 = a_1$$

a promatrana mreža je

$$\{(x_0, \ln f_0), \ldots, (x_n, \ln f_n)\}.$$

Provedemo li postupak kao u prvom primjeru dobijemo neke b_0 i b_1, onda slijedi

$$a_0 = e^{b_0}, \quad a_1 = b_1.$$

Vidimo da je a_0 nužno pozitivan, pa će i φ biti nužno pozitivna funkcija. Ovo je, naravno, problem jer mreža nije imala takvo ograničenje. No čim smo logaritmirali sve f_k uvjet pozitivnosti je morao biti ispunjen, pa smo ovaj postupak i mogli provesti samo za pozitivne funkcije. Ako postoje neki negativni f_k problem možemo riješiti translacijom svih podataka nakon čega provodimo navedeni postupak linearizacije.

2.2 Matrična formulacija linearnog problema najmanjih kvadrata

Da bismo formirali matrični zapis linearnog problema najmanjih kvadrata moramo preimenovati nepoznanice da nam zapis ne bi previše odstupao od standardne forme. Ako je dana mreža $\{(t_1, y_1), \ldots, (t_n, y_n)\}$ i ako želimo model aproksimirati funkcijom

$$\varphi(t) = x_1\varphi_1(t) + \cdots + x_m\varphi_m(t),$$

onda trebamo odrediti nepoznate parametre $x_1, \ldots, x_m$ tako da vrijedi

$$\sum_{k=1}^{n} \left[y_k - (x_1\varphi_1(t) + \cdots + x_m\varphi_m(t))\right]^2 \to \min.$$

Uvedemo li oznake

$$\begin{aligned} a_{kj} &= \varphi_j(t_k), \quad k = 1, \ldots, n, \quad j = 1, \ldots, m, \\ b_k &= y_k, \quad k = 1, \ldots, n, \\ A &= [a_{kj}] \in \mathbb{R}^{n \times m}, \quad b = [b_k] \in \mathbb{R}^n, \quad x = [x_j] \in \mathbb{R}^m, \end{aligned}$$

onda nam se prethodni uvjet minimizacije svodi na traženje minimuma (po x) euklidske norme

$$\|Ax - b\|_2 .$$

TEOREM. Neka je

$$S = \{x \in \mathbb{R}^m \mid \|Ax - b\|_2 = \min\} .$$

Vrijedi: $x \in S$ ako i samo ako je ispunjena sljedeća relacija ortogonalnosti (ovdje koristimo oznaku $\mathbf{0}$ za nul-vektor)

$$A^T(b - Ax) = \mathbf{0}.$$

DOKAZ. Dokažimo najprije smjer dovoljnosti. Neka je $\hat{x} \in \mathbb{R}^m$ takav da vrijedi

$$A^T(b - A\hat{x}) = \mathbf{0}.$$

Označimo $\hat{r} = b - A\hat{x}$. Za bilo koji $x \in \mathbb{R}^m$ vrijedi

$$r = b - Ax = \hat{r} + A\hat{x} - Ax = \hat{r} - A(x - \hat{x}) = \hat{r} - Ae, \quad e = x - \hat{x}.$$

Sada imamo

$$\begin{aligned} \|r\|_2^2 &= r^T r = (\hat{r} - Ae)^T(\hat{r} - Ae) = \hat{r}^T\hat{r} - \hat{r}^T Ae - (Ae)^T\hat{r} + (Ae)^T Ae \\ &= \hat{r}^T\hat{r} - 0 - 0 + \|Ae\|_2^2 = \hat{r}^T\hat{r} + \|Ae\|_2^2 = \|\hat{r}\|_2^2 + \|Ae\|_2^2. \end{aligned}$$

Kako je $\|Ae\|_2 \geq 0$, to se minimalna vrijednost $\|r\|_2$ postiže upravo onda kada je $\|Ae\|_2 = 0$, tj. $x = \hat{x}$, pa $\hat{x}$ minimizira $\|r\|_2 = \|Ax - b\|_2$. Dakle, $\hat{x} \in S$.

Dokažimo i smjer nužnosti. Dokaz ćemo provesti kontrapozicijom. Pretpostavimo stoga da je za neki $\hat{x} \in \mathbb{R}^m$ ispunjeno

$$A^T (b - A\hat{x}) = A^T \hat{r} = z \neq \mathbf{0}$$

i uzmimo

$$\bar{x} = \hat{x} + \varepsilon z, \quad \varepsilon > 0.$$

Tada je

$$\bar{r} = b - A\bar{x} = \hat{r} + A\hat{x} - A\bar{x} = \hat{r} - A(\bar{x} - \hat{x}) = \hat{r} - A\varepsilon z$$

i

$$\begin{aligned} \|\bar{r}\|_2^2 &= \bar{r}^T \bar{r} = (\hat{r} - A\varepsilon z)^T (\hat{r} - A\varepsilon z) \\ &= \hat{r}^T \hat{r} - \varepsilon \hat{r}^T A z - \varepsilon (Az)^T \hat{r} + \varepsilon^2 (Az)^T Az \\ &= \hat{r}^T \hat{r} - 2\varepsilon z^T z + \varepsilon^2 (Az)^T Az < \hat{r}^T \hat{r} = \|\hat{r}\|_2^2 \end{aligned}$$

za dovoljno mali ε, pa $\hat{x} \notin S$ jer $\|\hat{r}\|_2^2$ nije minimalna ■

Relacija

$$A^T(b - Ax) = \mathbf{0}$$

često se zove **sustav normalnih jednadžbi** i obično se piše u obliku

$$A^T A x = A^T b.$$

Matrica $A^T A$ je simetrična i pozitivno semidefinitna, a sustav normalnih jednadžbi je uvijek konzistentan. Štoviše, vrijedi i sljedeća propozocija koja će nam garantirati da uvjet $\mathrm{rang}(A) = m$ osigurava postojanje rješenja problema metode najmanjih kvadrata.

PROPOZICIJA. Matrica $A^T A$ je pozitivno definitna ako i samo ako su stupci matrice A linearno neovisni, tj. ako je rang matrice A jednak m.

DOKAZ. Ako su stupci matrice $A = [a_1 \cdots a_m]$ ($a_i \in \mathbb{R}^n$) linearno neovisni, onda za svaki $x \in \mathbb{R}^m,\ x \neq \mathbf{0}$, vrijedi

$$Ax = x_1 a_1 + \cdots + x_m a_m \neq \mathbf{0}.$$

Za takve x je

$$(Ax)^T Ax = \|Ax\|_2^2 > 0,$$

pa je očito matrica $A^T A$ pozitivno definitna.

S druge strane, ako su stupci matrice A linearno ovisni, onada postoji neki $\hat{x} \in \mathbb{R}^m$, $\hat{x} \neq \mathbf{0}$, takav da je

$$A\hat{x} = \hat{x}_1 a_1 + \cdots + \hat{x}_m a_m = \mathbf{0},$$

pa za takav $\hat{x}$ vrijedi

$$(A\hat{x})^T A\hat{x} = \|A\hat{x}\|_2^2 = 0.$$

Za sve ostale $x \in \mathbb{R}^m$ takve da je

$$Ax = x_1 a_1 + \cdots + x_m a_m \neq \mathbf{0}$$

je ispunjeno

$$(Ax)^T Ax = \|Ax\|_2^2 > 0,$$

pa je očito matrica $A^T A$ pozitivno semidefinitna ■

3 Minimaks aproksimacija

Neka je f neprekidna funkcija na intervalu $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$. Pokušajmo usporediti polinomne aproksimacije funkcije f dobivene različitim metodama i ustanoviti koja od njih daje najmanju maksimalnu pogrešku. Označimo s $\rho_n(f)$ najmanju maksimalnu pogrešku aproksimacije po svim takvim polinomima stupnja ne većeg od n, tj.

$$\rho_n(f) = \inf_{\partial p \leq n} \|f - p\|_\infty .$$

To bi značilo da ne postoji polinom stupnja ne većeg od n koji bi s manjom greškom od $\rho_n(f)$ aproksimirao funkciju f na danom intervalu. Nas, naravno, interesira za koji se polinom dostiže ta greška. Pa neka je p_n^* upravo taj polinom, tj. neka je

$$\rho_n(f) = \|f - p_n^*\|_\infty .$$

Nadalje, ako je polinom p_n^* jedinstven zanima nas kako ga možemo konstruirati. Polinom p_n^* nazivamo **minimaks aproksimacijom** funkcije f na intervalu $[a, b]$.

Ilustrirajmo pomoću jednog jednostavnog primjera o čemu se radi. Odredimo polinom p_1^* koji je minimaks aproksimacija eksponencijalne funkcije na intervalu $[-1, 1]$, tj polinom definiran s $p_1^*(x) = a_0 + a_1 x$ za kojeg vrijedi

$$\max_{x \in [-1,1]} |e^x - a_0 - a_1 x| \to \min .$$

Grafičkom ilustracijom lako vidimo da graf eksponencijalne funkcije mora sjeći graf polinoma (pravac) u točno dvije točke x_1 i x_2 takve da je $-1 < x_1 < x_2 < 1$ (u drugim slučajevima je lako naći bolju aproksimaciju!). Lako se naslućuje i rješenje. Najprije odredimo jednadžbu pravca p kroz točke $(-1, 1/e)$ i $(1, e)$. Zatimo odredimo koeficijent a_0 iz uvjeta da je pravac p_1^* tangenta funkcije $\exp$ u nekoj točki x_3 ali s koeficijentom smjera kao u pravca p. Rješenje je pravac paralelan s p i p_1^*, a jednako udaljen od oba. Jasno je i to da se maksimalne pogreške dosižu u točno tri točke:$-1, x_3$ i 1. Označimo li s ρ_1 tu maksimalnu pogrešku imamo sustav

$$
\begin{aligned}
1/e - a_0 + a_1 &= \rho_1 \\
e - a_0 - a_1 &= \rho_1 \\
e^{x_3} - a_0 - a_1 x_3 &= \rho_1 \\
e^{x_3} - a_1 &= 0.
\end{aligned}
$$

Posljednji uvjet je posljedica činjenice da zbog uvjeta maksimalnosti pogreške u x_3 imamo

$$
(e^x - a_0 - a_1 x)' \,|_{x_3} = e^{x_3} - a_1 = 0.
$$

Rješavanjem ovog sustava dobijemo (naravno, približno!)

$$
a_1 = 1.175, \quad a_0 = 1.264, \quad \rho_1 = 0.278, \quad x_3 = 0.161.
$$

Ako imamo dobru uniformnu aproksimaciju funkcije f, onda je realno očekivati da je i greška jednako tako uniformno distribuirana na intervalu aproksimacije, te da joj varira predznak. Sad ćemo bez dokaza dati tri važna teorema koji govore o egzistenciji minimaks aproksimacije i o njenoj pogrešci.

TEOREM. (**Čebiševljev teorem o oscilacijama grešaka**) Za danu funkciju f koja je neprekidna na $[a,b]$ i za dani $n \in \mathbb{N}_0$ postoji jedinstveni polinom p_n^* stupnja ne većeg od n za kojeg vrijedi

$$\rho_n(f) = \|f - p_n^*\|_\infty .$$

Taj polinom je karakteriziran sljedećim svojstvom: postoje barem $n+2$ točke

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n < x_{n+1} \leq b$$

za koje je

$$f(x_j) - p_n^*(x_j) = \sigma(-1)^j \rho_n(f), \quad j = 0, 1, \ldots, n+1,$$

pri čemu je $\sigma = \pm 1$ i ovisi samo o f i n.

TEOREM. (**de la Vallee-Poussin**) Neka je funkcija f neprekidna na $[a, b]$ i $n \in \mathbb{N}_0$. Pretpostavimo da za točke $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n < x_{n+1} \leq b$ polinom P stupnja ne većeg od n zadovoljava relaciju

$$f(x_j) - P(x_j) = (-1)^j e_j, \quad j = 0, 1, \ldots, n+1,$$

gdje su brojevi $e_j \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ istog predznaka. Tada je

$$\min_{0 \leq j \leq n+1} |e_j| \leq \rho_n(f) = \|f - p_n^*\|_\infty \leq \|f - P\|_\infty .$$

TEOREM. (**Jackson**) Neka funkcija f ima $k \in \mathbb{N}_0$ neprekidnih derivacija na $[a, b]$. Nadalje, neka za neke $M > 0$ i $0 < \alpha \leq 1$ vrijedi

$$\sup_{x,y \in [a,b]} \left| f^{(k)}(x) - f^{(k)}(y) \right| \leq M |x - y|^\alpha .$$

Tada postoji konstanta d_k neovisna o f i n takva da vrijedi

$$\rho_n(f) \leq \frac{M d_k}{n^{\alpha+k}}, \quad n > 0.$$