

5. Aproksimacija i interpolacija

5.1. Opći problem aproksimacije

Što je problem aproksimacije? Ako su poznate neke informacije o funkciji f , definiranoj na nekom skupu $X \subseteq \mathbb{R}$, na osnovu tih informacija želimo f zamijeniti nekom drugom funkcijom φ na skupu X , tako da su f i φ bliske u nekom smislu. Skup X je najčešće interval oblika $[a, b]$ (može i neograničen), ili diskretni skup točaka.

Problem aproksimacije javlja se u dvije bitno različite formulacije.

- (a) Poznata je funkcija f (npr. analitički), ali je njena forma prekomplikirana za računanje. U tom slučaju odabiremo neke informacije o f i po nekom kriteriju odredimo aproksimacijsku funkciju φ . U tom slučaju možemo birati informacije o f koje ćemo koristiti. Jednako tako, možemo ocijeniti grešku dobivene aproksimacije, obzirom na pravu vrijednost funkcije f .
- (b) Funkcija f nije poznata, ali su poznate samo neke informacije o njoj, na primjer, vrijednosti na nekom skupu točaka. Zamjenska funkcija φ određuje se iz raspoloživih informacija, koje, osim samih podataka, uključuju i očekivani oblik ponašanja podataka, tj. funkcije φ . U ovom se slučaju **ne može** napraviti ocjena pogreške bez dodatnih informacija o nepoznatoj funkciji f .

Varijanta (b) je puno češća u praksi. Najčešće se javlja kod mjerenja raznih veličina, jer, osim izmjerenih podataka, pokušavamo aproksimirati i podatke koji se nalaze “između” izmjerenih točaka. Primijetimo da se kod mjerenja javljaju i pogreške mjerenja, pa postoje posebne tehnike za ublažavanje tako nastalih grešaka.

Funkcija φ bira se prema prirodi modela, ali tako da bude relativno jednostavna za računanje. Ona obično ovisi o parametrima a_k , $k = 0, \dots, m$, koje treba odrediti po nekom kriteriju,

$$\varphi(x) = \varphi(x; a_0, a_1, \dots, a_m).$$

Kad smo funkciju φ zapisali u ovom obliku, kao funkciju koja ovisi o parametrima a_k , onda kažemo da smo odabrali opći oblik aproksimacijske funkcije.

Oblike aproksimacijskih funkcija možemo (grubo) podijeliti na:

- (a) linearne aproksimacijske funkcije,
- (b) nelinearne aproksimacijske funkcije.

Bitne razlike između ove dvije grupe aproksimacijskih funkcija opisujemo u nastavku.

5.1.1. Linearne aproksimacijske funkcije

Opći oblik linearne aproksimacijske funkcije je

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

gdje su $\varphi_0, \dots, \varphi_m$ poznate funkcije koje znamo računati. Primijetite da se linearnost ne odnosi na **oblik funkcije** φ , već na njenu ovisnost o parametrima a_k koje treba odrediti. Prednost ovog oblika aproksimacijske funkcije je da određivanje parametara a_k obično vodi na **sustave linearnih jednadžbi**.

Navedimo najčešće korištene oblike linearnih aproksimacijskih funkcija.

1. Algebarski polinomi, $\varphi_k(x) = x^k$, $k = 0, \dots, m$, tj.

$$\varphi(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_mx^m.$$

Funkciju $\varphi(x)$ ne moramo nužno zapisati u standardnoj bazi običnih potencija $\{1, x, \dots, x^m\}$. Vrlo često je neka druga baza bitno pogodnija, na primjer, tzv. ortogonalnih polinoma ili baza $\{1, (x - x_0), (x - x_0)(x - x_1), \dots\}$, gdje su x_0, x_1, \dots zadane točke.

2. Trigonometrijski polinomi, pogodni za aproksimaciju periodičkih funkcija, recimo, u modeliranju signala. Za funkcije φ_k uzima se $m + 1$ funkcija iz skupa

$$\{1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots\}.$$

Katkad se koristi i faktor u argumentu sinusa i kosinusa koji služi za kontrolu perioda, a ponekad se biraju samo parne ili samo neparne funkcije iz ovog skupa.

3. Po dijelovima polinomi, tzv. splajn funkcije. Ako su zadane točke x_0, \dots, x_n , onda se splajn funkcija na svakom podintervalu svodi na polinom određenog fiksnog (niskog) stupnja, tj.

$$\varphi \Big|_{[x_{k-1}, x_k]} = p_k, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

a p_k su polinomi najčešće stupnjeva 1, 2, 3 ili 5. U točkama x_i obično se zahtijeva da funkcija φ zadovoljava još i tzv. “uvjete ljepljenja” vrijednosti funkcije i nekih njenih derivacija ili nekih aproksimacija tih derivacija. Splajnovi se danas često koriste zbog dobrih svojstava obzirom na grešku aproksimacije i kontrolu oblika aproksimacijske funkcije.

5.1.2. Nelinearne aproksimacijske funkcije

Navedimo najčešće korištene oblike nelinearnih aproksimacijskih funkcija.

4. Eksponencijalne aproksimacije

$$\varphi(x) = c_0 e^{b_0 x} + c_1 e^{b_1 x} + \dots + c_r e^{b_r x},$$

koje imaju $n = 2r + 2$ nezavisna parametra, a opisuju, na primjer, procese rasta i odumiranja u raznim populacijama, s primjenom u biologiji, ekonomiji i medicini;

5. Racionalne aproksimacije

$$\varphi(x) = \frac{b_0 + b_1 x + \dots + b_r x^r}{c_0 + c_1 x + \dots + c_s x^s},$$

koje imaju $n = r + s + 1$ nezavisni parametar, a ne $r + s + 2$, kako formalno piše. Naime, razlomci se mogu proširivati (ili skalirati), pa ako su b_i, c_i parametri, onda su to i tb_i, tc_i , za $t \neq 0$. Zbog toga se uvijek fiksira jedan od koeficijenata b_i ili c_i , a koji je to — obično slijedi iz prirode modela.

Ovako definirane racionalne funkcije imaju mnogo bolja svojstva aproksimacije nego polinomi, a pripadna teorija je relativno nova.

5.1.3. Kriteriji aproksimacije

Aproksimacijske funkcije biraju se tako da “najbolje” zadovolje uvjete koji se postavljaju na njih. Najčešći su zahtjevi da graf aproksimacijske funkcije prolazi određenim točkama tj. da interpolira funkciju u tim točkama ili da je odstupanje aproksimacijske od polazne funkcije u nekom smislu minimalno, tj. tada se minimizira pogreška.

Interpolacija

Interpolacija je zahtjev da se vrijednosti funkcija f i φ podudaraju na nekom konačnom skupu argumenata (ili kraće točaka). Te točke obično nazivamo **čvorovima** interpolacije. Ovom zahtjevu se može, ali i ne mora dodati zahtjev da se u čvorovima, osim funkcijskih vrijednosti, poklapaju i vrijednosti nekih derivacija.

Drugim riječima, u najjednostavnijem obliku interpolacije, kad tražimo samo podudaranje funkcijskih vrijednosti, od podataka o funkciji f koristi se samo informacija o njenoj vrijednosti na skupu od $(n + 1)$ točaka, tj. podaci oblika (x_k, f_k) , gdje je $f_k = f(x_k)$, za $k = 0, \dots, n$.

Parametri a_0, \dots, a_n (kojih mora biti točno onoliko koliko i podataka!) određuju se iz uvjeta

$$\varphi(x_k; a_0, a_1, \dots, a_n) = f_k, \quad k = 0, \dots, n,$$

što je, općenito, nelinearni sustav jednažbi. Ako je aproksimacijska funkcija φ linearna, onda za parametre a_k dobivamo sustav linearnih jednažbi koji ima točno $n + 1$ jednažbi i $n + 1$ nepoznanica. Matrica tog sustava je **kvadratna**, što bitno olakšava analizu egzistencije i jedinstvenosti rješenja za parametre interpolacije.

Minimizacija pogreške

Prije opisa što znači minimizacija pogreške, definirajmo što je to norma vektora.

Neka je x vektor iz \mathbb{C}^n s komponentama x_i , $i = 1, \dots, n$, u oznaci $x = (x_1, \dots, x_n)^T$, ili, skraćeno $x = [x_i]$. U numeričkoj linearnoj algebri najčešće se koriste sljedeće tri norme:

1. 1-norma ili ℓ_1 norma, u engleskom govornom području poznatija kao “Manhattan” ili “taxi-cab” norma

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|,$$

2. 2-norma ili ℓ_2 norma ili euklidska norma

$$\|x\|_2 = (x^*x)^{1/2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2},$$

3. ∞ -norma ili ℓ_∞ norma

$$\|x\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} |x_i|.$$

Minimizacija pogreške je drugi kriterij određivanja parametara aproksimacije. Funkcija φ bira se tako da se minimizira neka odabrana **norma** pogreške

$$e(x) = f(x) - \varphi(x)$$

u nekom odabranom vektorskom prostoru funkcija definiranih na nekoj domeni X . Ove aproksimacije, često zване i najbolje aproksimacije po normi, dijele se na diskretne i kontinuirane, ovisno o tome minimizira li se norma pogreške e na diskretnom ili kontinuiranom skupu podataka X .

Standardno se kao norme pogreške koriste 2-norma i ∞ -norma.

Za 2-normu pripadna se aproksimacija zove **srednjekvadratna**, a metoda za njeno nalaženje zove se **metoda najmanjih kvadrata**. Funkcija φ , odnosno njeni parametri, se traže tako da bude $\|e\|_2$ minimalna na X .

U diskretnom slučaju je $X = \{x_0, \dots, x_n\}$, pa je zahtjev minimalnosti

$$\sqrt{\sum_{k=0}^n (f(x_k) - \varphi(x_k))^2} \rightarrow \min,$$

dok je u kontinuiranom slučaju

$$\sqrt{\int_a^b (f(x) - \varphi(x))^2 dx} \rightarrow \min.$$

Preciznije, minimizira se samo ono pod korijenom. Tako se dobiva jednako rješenje kao da se minimizira korijen tog izraza, jer je drugi korijen rastuća funkcija.

Zašto se baš minimiziraju kvadrati grešaka? To ima veze sa statistikom, jer se izmjereni podaci obično ponašaju kao normalna slučajna varijabla, s očekivanjem koje je točna vrijednost podatka. Odgovarajući kvadrati su varijanca i nju treba minimizirati.

U slučaju ∞ -norme pripadna se aproksimacija zove **minimaks** aproksimacija, a parametri se biraju tako da $\|e\|_\infty$ bude minimalna. U diskretnom slučaju problem se svodi na

$$\max_{k=0, \dots, n} |f(x_k) - \varphi(x_k)| \rightarrow \min,$$

a u kontinuiranom

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - \varphi(x)| \rightarrow \min.$$

U nekim problemima ovaj je tip aproksimacija poželjniji od srednjekvadratnih, jer se traži da maksimalna greška bude minimalna, tj. najmanja moguća, ali ih je općenito mnogo teže izračunati (na primjer, dobivamo problem minimizacije nederivabilne funkcije).

5.2. Interpolacija polinomima

Pretpostavimo da imamo funkciju f zadanu na diskretnom skupu različitih točaka x_k , $k = 0, \dots, n$, tj. $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$. Poznate funkcijske vrijednosti u tim točkama skraćeno označavamo s $f_k = f(x_k)$.

Primijetite da pretpostavka o različitosti točaka nije bitno ograničenje. Naime, kad bismo dozvolili da je $x_i = x_j$ uz $i \neq j$, ili f ne bi bila funkcija (ako je $f_i \neq f_j$) ili bismo imali redundantan podatak (ako je $f_i = f_j$), koji možemo ispustiti.

Ako je $[a, b]$ segment na kojem koristimo interpolaciju (i promatramo grešku), u praksi su točke obično numerirane tako da vrijedi $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$.

5.2.1. Egzistencija i jedinstvenost interpolacijskog polinoma

Za polinomnu interpolaciju vrijedi sljedeći teorem, čiji dokaz koristi činjenicu da linearni sustav s regularnom matricom ima jedinstveno rješenje. U iskazu teorema koristi se oznaka \mathbb{N}_0 za skup cijelih nenegativnih brojeva.

Teorem 5.2.1. *Neka je $n \in \mathbb{N}_0$. Za zadane točke (x_k, f_k) , $k = 0, \dots, n$, gdje je $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$, postoji jedinstveni (interpolacijski) polinom stupnja najviše n*

$$\varphi(x) := p_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

za koji vrijedi

$$p_n(x_k) = f_k, \quad k = 0, \dots, n.$$

Dokaz:

Neka je $p_n = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ polinom stupnja najviše n . Uvjete interpolacije možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned} p_n(x_0) &= a_0 + a_1x_0 + \dots + a_nx_0^n = f_0 \\ p_n(x_1) &= a_0 + a_1x_1 + \dots + a_nx_1^n = f_1 \\ &\dots\dots\dots \\ p_n(x_n) &= a_0 + a_1x_n + \dots + a_nx_n^n = f_n. \end{aligned}$$

Drugim riječima, treba provjeriti ima li ovaj sustav od $(n+1)$ -e linearne jednadžbe s $(n+1)$ -om nepoznanicom a_0, \dots, a_n jedinstveno rješenje. Za to je dovoljno provjeriti je li kvadratna matrica tog linearnog sustava regularna. To možemo napraviti računanjem vrijednosti determinante te matrice. Ta determinanta je tzv. Vandermondeova determinanta

$$D_n = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & x_{n-1} & x_{n-1}^2 & \dots & x_{n-1}^n \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix},$$

za koju se zna da vrijedi

$$D_n = \prod_{0 \leq j < i \leq n} (x_i - x_j).$$

(Kako se nalazi D_n pogledajte u Osnovnom udžbeniku.) Budući da je $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$, onda je $D_n \neq 0$, tj. matrica linearnog sustava je regularna, pa postoji jedinstveno rješenje a_0, \dots, a_n za koeficijente polinoma p_n , odnosno jedinstven interpolacijski polinom. ■

Ovaj teorem u potpunosti rješava prvo ključno pitanje egzistencije i jedinstvenosti rješenja problema polinomne interpolacije u njegovom najjednostavnijem obliku — kad su zadane funkcijske vrijednosti u međusobno različitim točkama.

5.2.2. Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma

Da bismo našli koeficijente interpolacijskog polinoma, nije nužno rješavati linearni sustav za koeficijente. Interpolacijski polinom p_n možemo odmah napisati korištenjem tzv. Lagrangeove baze $\{\ell_k, k = 0, \dots, n\}$ prostora polinoma \mathcal{P}_n

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n f_k \ell_k(x), \quad (5.2.1)$$

pri čemu je

$$\begin{aligned} \ell_k(x) &= \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)} \\ &= \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} := \frac{\omega_k(x)}{\omega_k(x_k)}, \quad k = 0, \dots, n. \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

Polinomi ℓ_k su stupnja n , pa je p_n polinom stupnja najviše n . Osim toga, vrijedi

$$\ell_k(x_i) = \begin{cases} 0, & \text{za } i \neq k, \\ 1, & \text{za } i = k. \end{cases}$$

Uvrstimo li to u (5.2.1), odmah slijedi da se suma u (5.2.1) svodi na jedan jedini član za $i = k$, tj. da vrijedi

$$p_n(x_k) = f_k.$$

Oblik (5.2.1)–(5.2.2) zove se Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma. Taj polinom možemo napisati u još jednom, zgodnijem obliku. Definiramo

$$\omega(x) = \prod_{k=0}^n (x - x_k), \quad (5.2.3)$$

pa je

$$\ell_k(x) = \frac{\omega(x)}{(x - x_k) \omega_k(x_k)}.$$

Uvrštavanjem u (5.2.1) dobivamo da je

$$p_n(x) = \omega(x) \sum_{k=0}^n \frac{f_k}{(x - x_k) \omega_k(x_k)}. \quad (5.2.4)$$

Uočimo da je

$$\omega_k(x_k) = \omega'(x_k),$$

pa (5.2.4) možemo pisati kao

$$p_n(x) = \omega(x) \sum_{k=0}^n \frac{f_k}{(x - x_k) \omega'(x_k)}. \quad (5.2.5)$$

Ova se forma može koristiti za računanje vrijednosti polinoma u točki $x \neq x_k$, $k = 0, \dots, n$. Prednost je što se za svaki novi x računa samo $\omega(x)$ i $(x - x_k)$, dok se $\omega_k(x_k) = \omega'(x_k)$ izračuna samo jednom za svaki k i čuva u tablici, jer ne ovisi o x .

Ukupan broj operacija je proporcionalan s n^2 , a za računanje u svakoj novoj točki x , trebamo još reda veličine n operacija. Ipak, u praksi se ne koristi ovaj oblik interpolacijskog polinoma, već nešto bolji Newtonov oblik. Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma uglavnom se koristi u teoretske svrhe (za dokaze).

5.2.3. Ocjena greške interpolacijskog polinoma

Ako znamo još neke informacije o funkciji f , možemo napraviti i ocjenu greške interpolacijskog polinoma. Dokaz teorema možete naći u Osnovnom udžbeniku.

Teorem 5.2.2. *Pretpostavimo da funkcija f ima $(n + 1)$ -u derivaciju na segmentu $[a, b]$ za neki $n \in \mathbb{N}_0$. Neka su $x_k \in [a, b]$, $k = 0, \dots, n$, međusobno različiti čvorovi interpolacije, tj. $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$, i neka je p_n interpolacijski polinom za funkciju f u tim čvorovima. Za bilo koju točku $x \in [a, b]$ postoji točka ξ iz otvorenog intervala*

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

takva da za grešku interpolacijskog polinoma vrijedi

$$e(x) := f(x) - p_n(x) = \frac{\omega(x)}{(n + 1)!} f^{(n+1)}(\xi), \quad (5.2.6)$$

pri čemu je $\omega(x)$ definirana relacijom (5.2.3).

Ako je $f^{(n+1)}$ ograničena na $[a, b]$ ili, jače, ako je $f \in C^{n+1}[a, b]$, onda se iz prethodnog teorema može dobiti sljedeća ocjena greške interpolacijskog polinoma za funkciju f u točki $x \in [a, b]$

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{|\omega(x)|}{(n + 1)!} M_{n+1}, \quad M_{n+1} := \max_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(x)|.$$

Ova ocjena direktno slijedi iz (5.2.6), a korisna je ako relativno jednostavno možemo izračunati ili odozgo ocijeniti M_{n+1} .

5.2.4. Newtonov oblik interpolacijskog polinoma

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma nije pogodan kad želimo povećati stupanj interpolacijskog polinoma da bismo eventualno poboljšali aproksimaciju i smanjili grešku, zbog toga što interpolacijski polinom moramo računati od početka.

Postoji forma interpolacijskog polinoma kod koje je mnogo lakše dodavati točke interpolacije, tj. povećavati stupanj interpolacijskog polinoma. Neka je p_{n-1} interpolacijski polinom koji interpolira funkciju f u točkama x_k , $k = 0, \dots, n-1$. Neka je p_n interpolacijski polinom koji interpolira funkciju f još i u točki x_n . Polinom p_n tada možemo napisati u obliku

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + c(x), \quad (5.2.7)$$

gdje je c korekcija, polinom stupnja n . Također, mora vrijediti

$$c(x_k) = p_n(x_k) - p_{n-1}(x_k) = f(x_k) - f(x_k) = 0, \quad k = 0, \dots, n-1.$$

Vidimo da su x_k nultočke od c , pa ga možemo napisati u obliku

$$c(x) = a_n (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}).$$

Nadalje, iz zadnjeg uvjeta interpolacije $p_n(x_n) = f(x_n)$, dobivamo

$$\begin{aligned} f(x_n) &= p_n(x_n) = p_{n-1}(x_n) + c(x_n) \\ &= p_{n-1}(x_n) + a_n (x_n - x_0) \cdots (x_n - x_{n-1}), \end{aligned}$$

odakle lako izračunavamo vodeći koeficijent a_n polinoma c

$$a_n = \frac{f(x_n) - p_{n-1}(x_n)}{(x_n - x_0) \cdots (x_n - x_{n-1})} = \frac{f(x_n) - p_{n-1}(x_n)}{\omega(x_n)}.$$

Korištenjem relacije (5.2.7), sada imamo sve elemente za računanje $p_n(x)$ u bilo kojoj točki x . Koeficijent a_n , očito je funkcija čvorova x_0, \dots, x_n i zvat ćemo ga n -ta podijeljena razlika. Formalno ćemo to označiti s

$$a_n = f[x_0, x_1, \dots, x_n], \quad (5.2.8)$$

pa će odmah slijediti rekurzivna formula za dobivanje interpolacijskog polinoma za stupanj većeg od prethodnog

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) f[x_0, \dots, x_n]. \quad (5.2.9)$$

Želimo koeficijent a_n izračunavati na neki jednostavan i stabilan način. Da bismo to postigli, vratimo se na Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma (to je isti interpolacijski polinom!). Primijetimo da je a_n koeficijent uz vodeću potenciju

x^n u p_n . Stoga iskoristimo relaciju (5.2.5), tj. nađimo koeficijent uz x^n na desnoj strani te relacije. Dobivamo

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \sum_{k=0}^n \frac{f(x_k)}{\omega'(x_k)}. \quad (5.2.10)$$

Iz formule (5.2.10) slijede neka svojstva podijeljenih razlika. Primijetimo da poredak čvorova nije bitan, tj. podijeljena razlika neosjetljiva je na poredak čvorova. Druga korisna formula je formula za rekursivno računanje podijeljenih razlika

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}.$$

Izvedimo tu formulu. Vrijedi

$$\begin{aligned} f[x_1, \dots, x_n] &= \sum_{k=1}^n \frac{f(x_k)}{(x_k - x_1) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)} \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \frac{f(x_k)(x_k - x_0)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)} \\ &\quad + \frac{f(x_n)(x_n - x_0)}{(x_n - x_0) \cdots (x_n - x_{n-1})} \\ f[x_0, \dots, x_{n-1}] &= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f(x_k)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_{n-1})} \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \frac{f(x_k)(x_k - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)} \\ &\quad - \frac{f(x_0)(x_n - x_0)}{(x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_n)}. \end{aligned}$$

Oduzimanjem dobivamo

$$\begin{aligned} f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}] &= \sum_{k=1}^{n-1} \frac{f(x_k)(x_n - x_0)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)} \\ &\quad + \frac{f(x_n)(x_n - x_0)}{(x_n - x_0) \cdots (x_n - x_{n-1})} + \frac{f(x_0)(x_n - x_0)}{(x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_n)} \\ &= (x_n - x_0) \sum_{k=0}^n \frac{f(x_k)}{\omega'(x_k)} = (x_n - x_0) f[x_0, \dots, x_n], \end{aligned}$$

čime je dokazana tražena formula. Neki autori baš tu rekursivnu formulu koriste kao definiciju podijeljenih razlika.

Ostaje još vidjeti što je početak rekurzije za podijeljene razlike. Ako znamo da je konstanta koja prolazi točkom $(x_0, f(x_0))$, interpolacijski polinom stupnja 0, onda je $a_0 = f[x_0] = f(x_0)$. Jednako tako vrijedi

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

pa tablicu podijeljenih razlika lako sastavljamo:

x_k	$f[x_k]$	$f[x_k, x_{k+1}]$	$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}]$	\cdots	$f[x_0, \dots, x_n]$
x_0	$f[x_0]$				
		$f[x_0, x_1]$			
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$		\ddots	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots		$f[x_0, \dots, x_n]$
		$f[x_{n-2}, x_{n-1}]$		\ddots	
x_{n-1}	$f[x_{n-1}]$		$f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n]$		
		$f[x_{n-1}, x_n]$			
x_n	$f[x_n]$				

Dakle, kad uvažimo rekurziju i oblik polinoma c u (5.2.9), dobivamo da je oblik Newtonovog interpolacijskog polinoma

$$p_n(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] + \cdots + (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})f[x_0, x_1, \dots, x_n].$$

Primijetite da nam od tablica podijeljenih razlika za računanje interpolacijskog polinoma treba samo “gornji rub”.

5.2.5. Koliko je dobar interpolacijski polinom?

U praksi se obično koriste interpolacijski polinomi niskih stupnjeva, najčešće do 5. Zašto? Kod nekih funkcija za neki izbor točaka interpolacije, povećavanje stupnja interpolacijskog polinoma može dovesti do povećanja grešaka. Zbog toga se umjesto visokog stupnja interpolacijskog polinoma u praksi koristi po dijelovima polinomna interpolacija.

Njemački matematičar Runge prvi je uočio probleme koji nastupaju kod interpolacije na ekvidistantnoj mreži čvorova. On je konstruirao funkciju (poznatu kao Rungeova funkcija), koja ima svojstvo da niz Newtonovih interpolacijskih polinoma na ekvidistantnoj mreži ne konvergira (po točkama) prema toj funkciji kad se broj čvorova povećava.

Primjer 5.2.1. (Runge, 1901.) Promotrimo (Rungeovu) funkciju

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

Odaberimo stupanj interpolacijskog polinoma n i ekvidistantne čvorove interpolacije x_k , $k = 0, \dots, n$

$$x_k = -5 + kh, \quad h = \frac{10}{n}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Zanima nas ponašanje grešaka koje nastaju povećavanjem stupnja n interpolacijskog polinoma.

Zanimljivo je da, ako umjesto ekvidistantnih točaka interpolacije u primjeru Runge uzmemo neekvidistantne, točnije tzv. Čebiševljeve točke na intervalu $[a, b]$,

$$x_k = \frac{1}{2} \left(a + b + (a - b) \cos \frac{2k + 1}{2n + 2} \right), \quad k = 0, \dots, n.$$

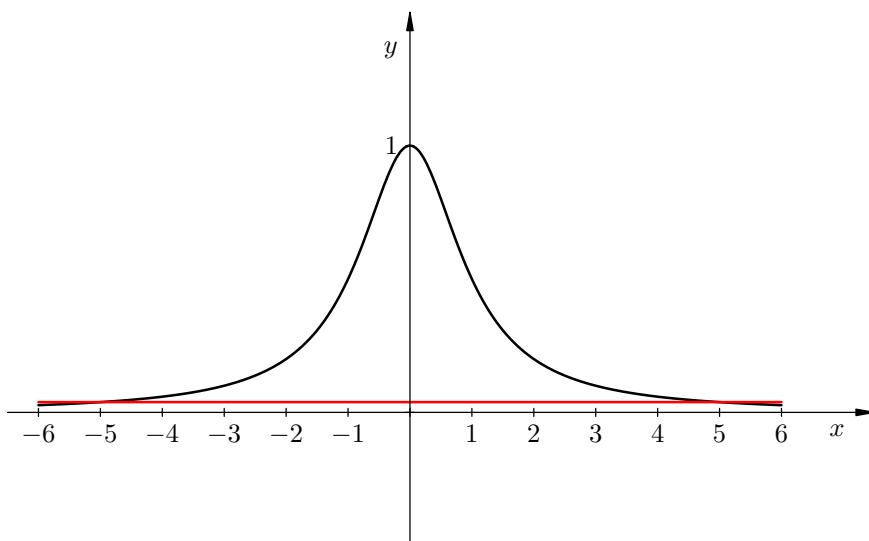
onda će porastom stupnja niz interpolacijskih polinoma konvergirati prema funkciji f .

Pogledajmo kako izgledaju interpolacije polinomima u ekvidistantnim i Čebiševljevim točkama za stupnjeve 1–6, 8, 10, 12, 14, 16 (parnost funkcije!).

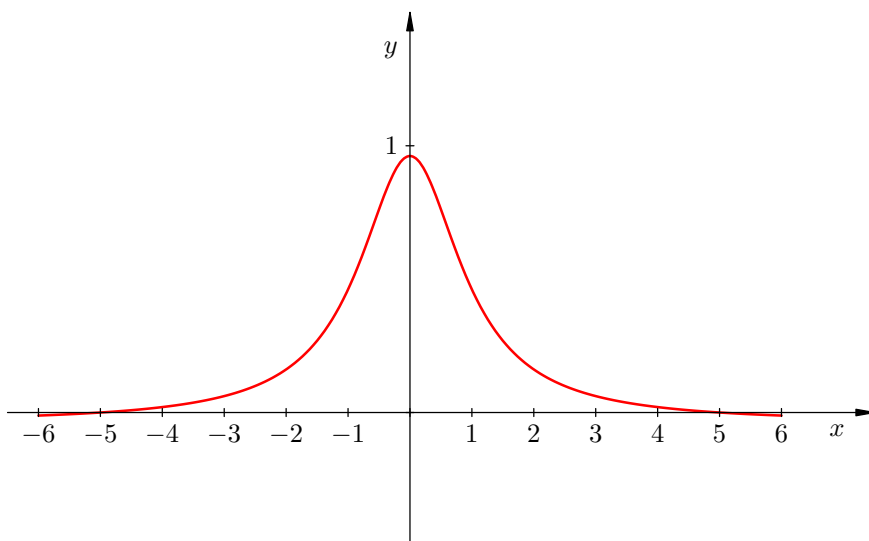
Prva grupa slika su redom funkcija (crno) i interpolacijski polinom (crveno) za ekvidistantnu mrežu, te pripadna greška, a zatim to isto za Čebiševljevu mrežu.

Primijetite i ponašanje grešaka izvan intervala interpolacije — greška vrlo brzo raste. Zbog toga interpolacijski polinomi nisu prikladni (čak i onda kad konvergiraju) za aproksimiranje vrijednosti funkcija za x -eve koji su izvan intervala $[x_0, x_n]$.

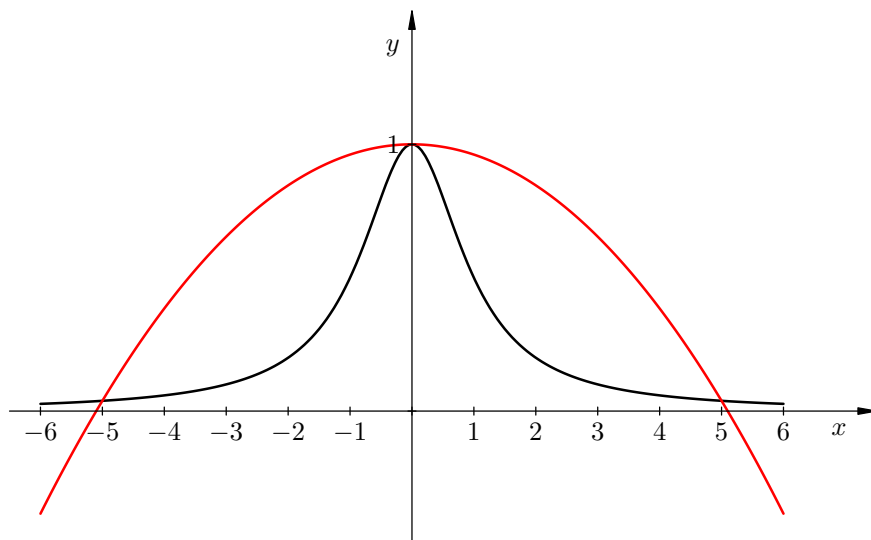
Nadalje uočite da interpolacijski polinom najbolje aproksimira funkciju u sredini područja interpolacije, a greška raste prema rubovima.



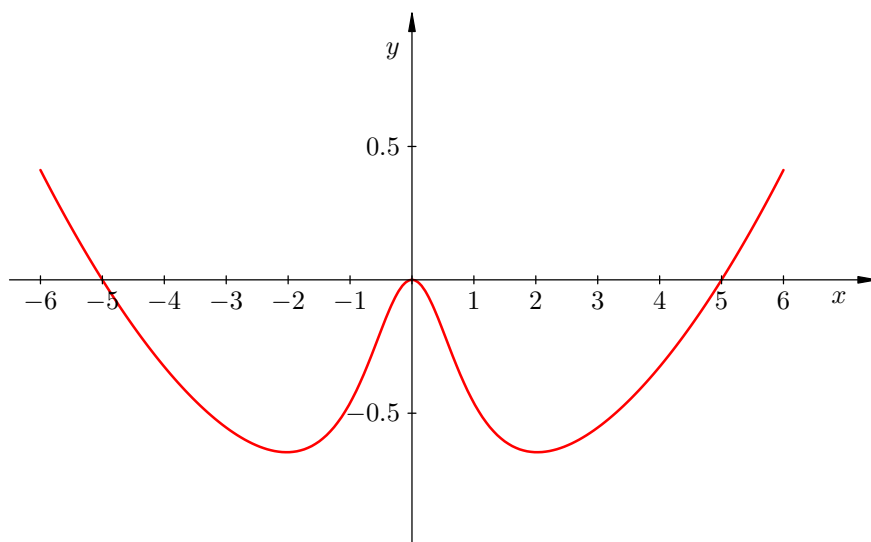
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 1.



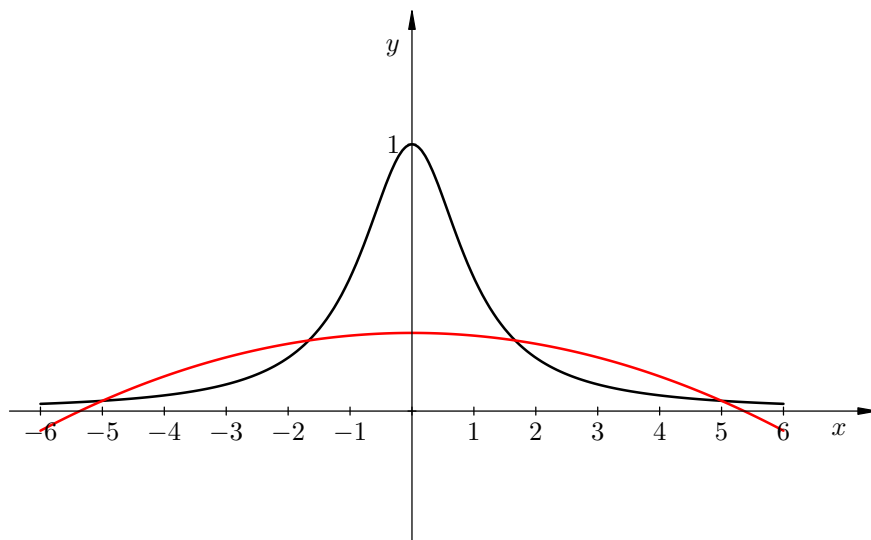
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 1.



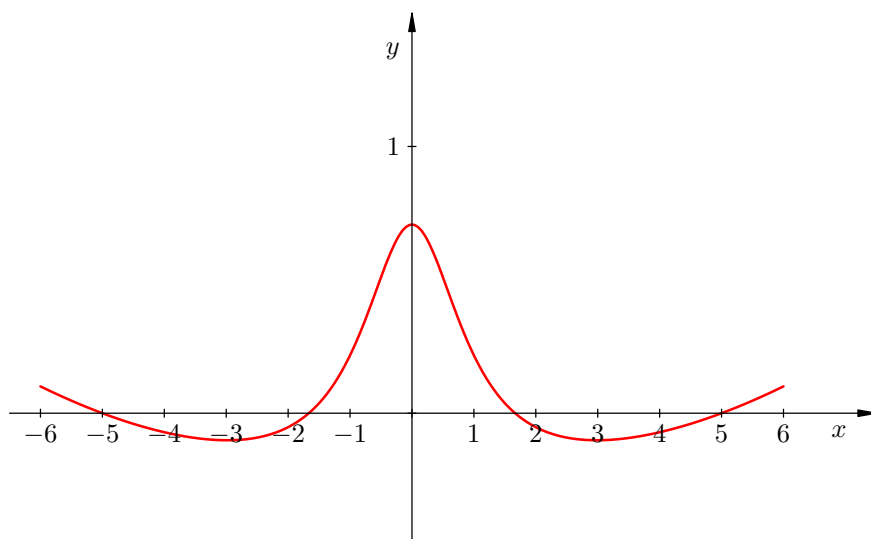
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 2.



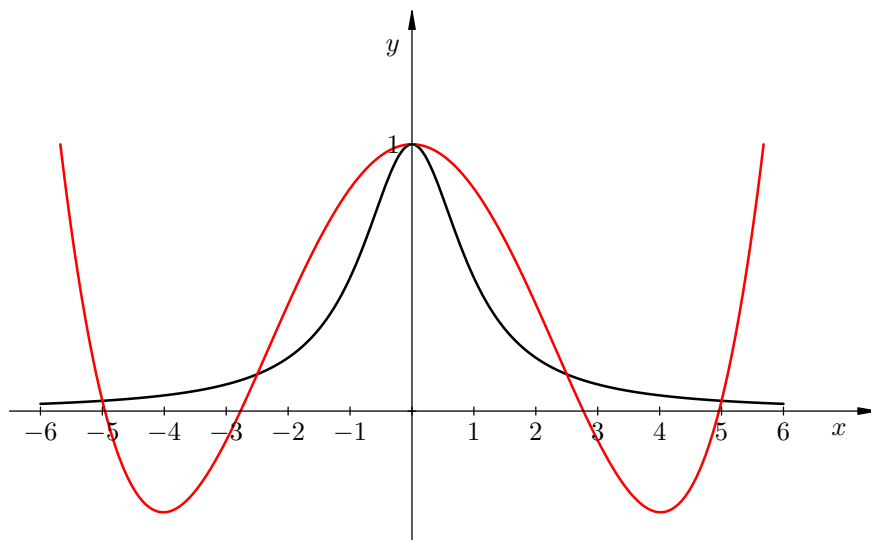
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 2.



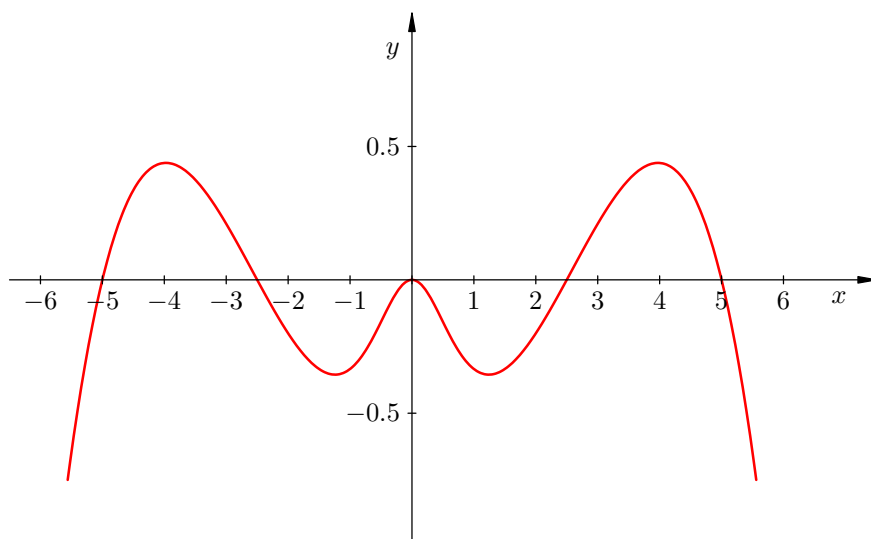
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 3.



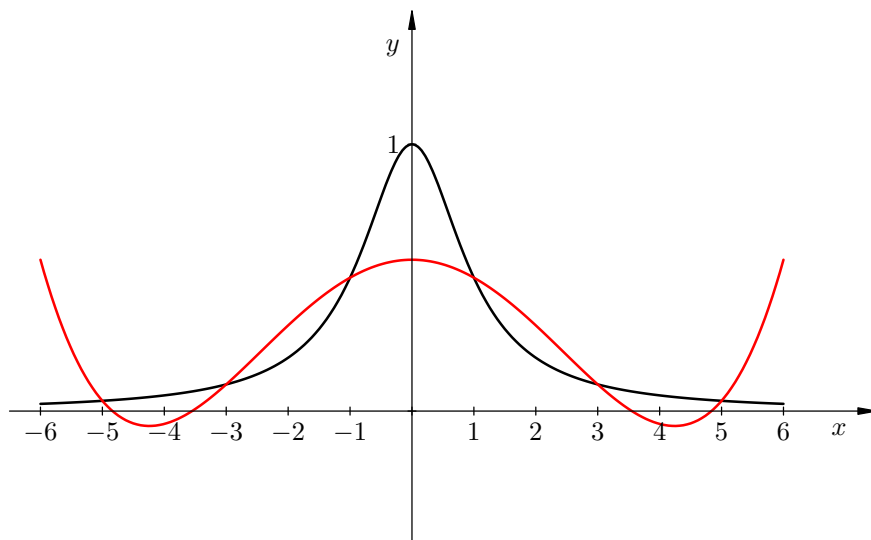
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 3.



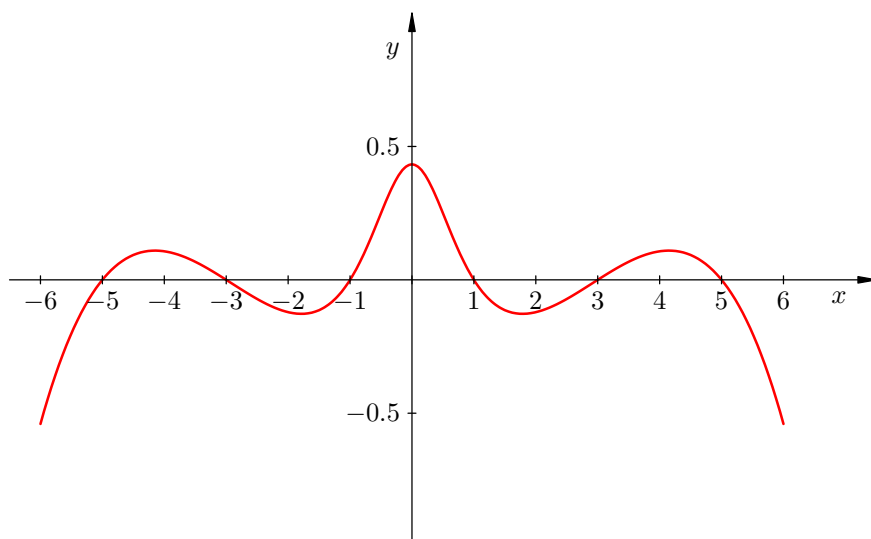
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 4.



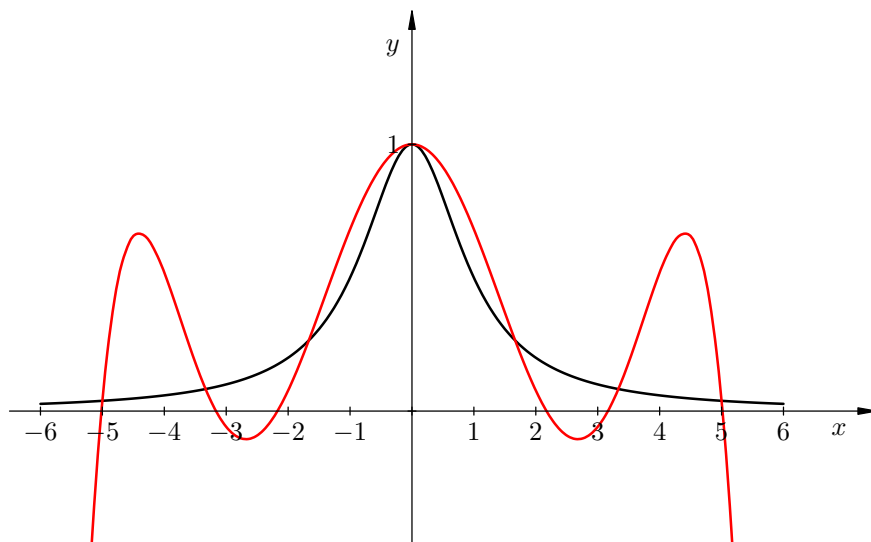
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 4.



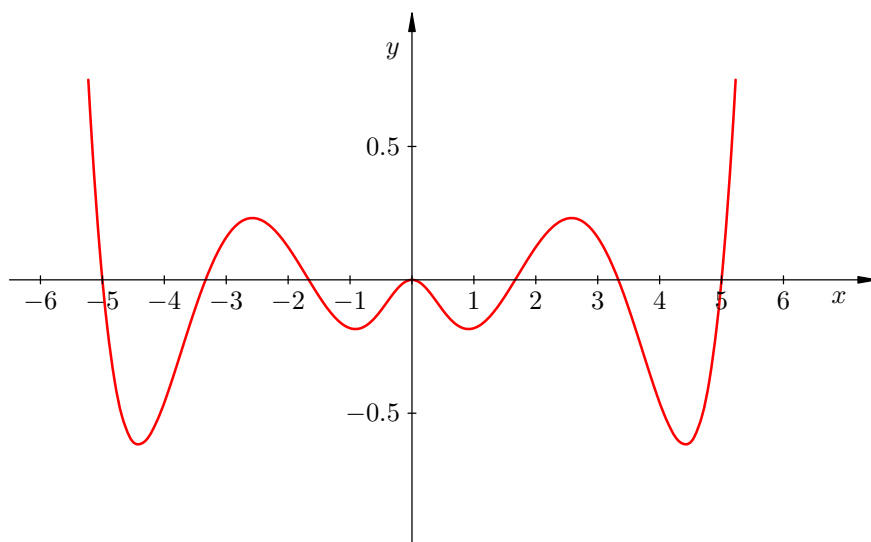
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 5.



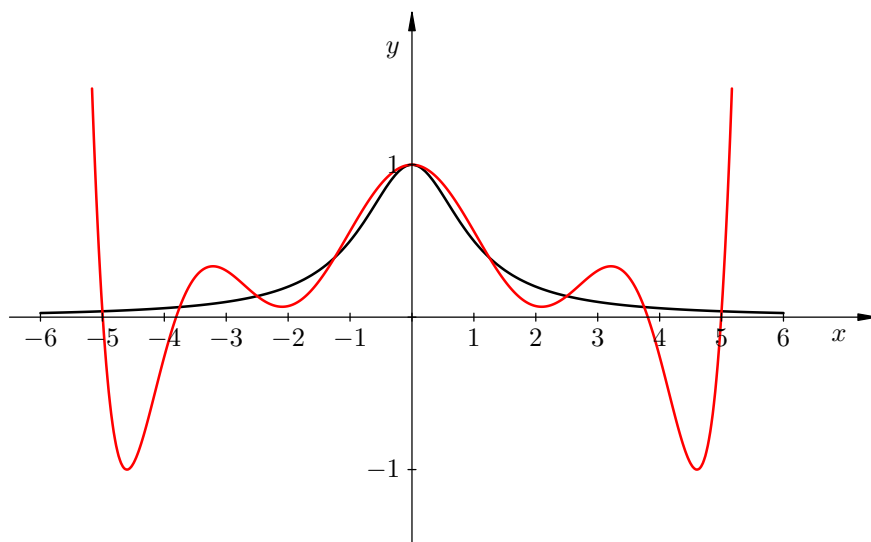
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 5.



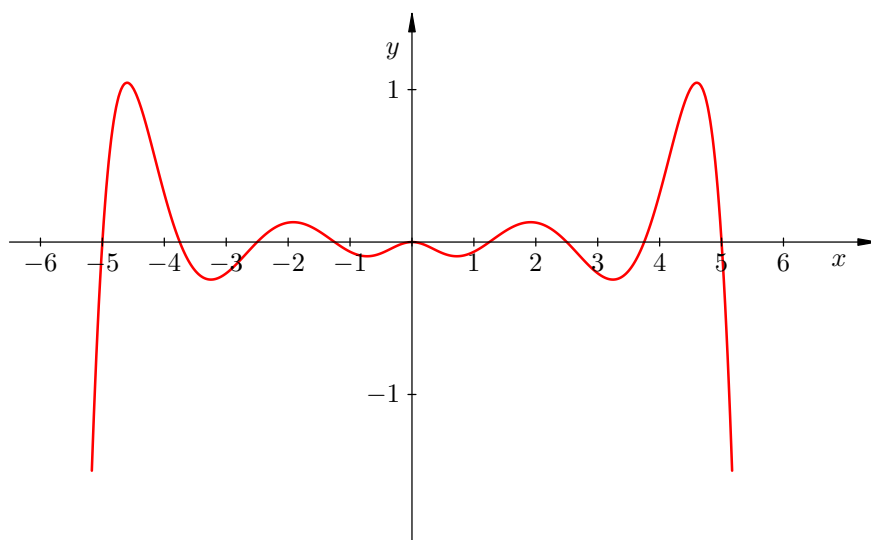
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 6.



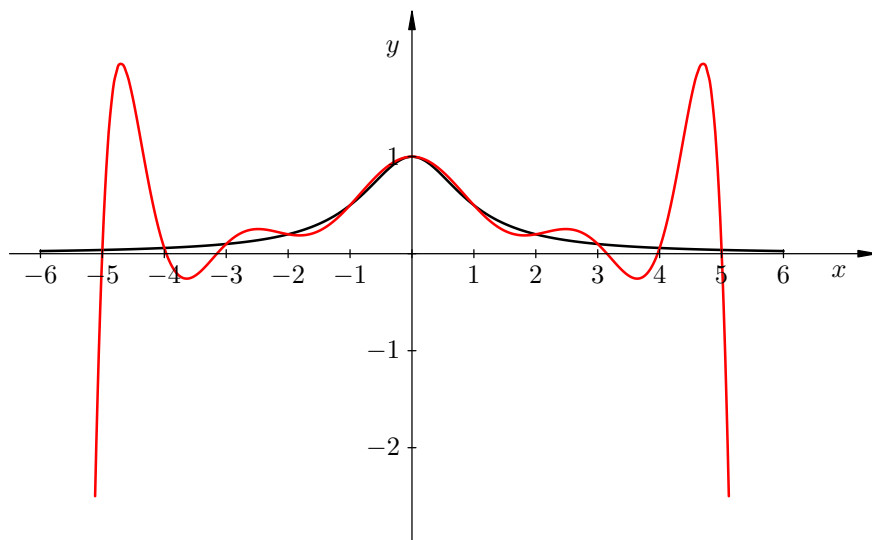
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 6.



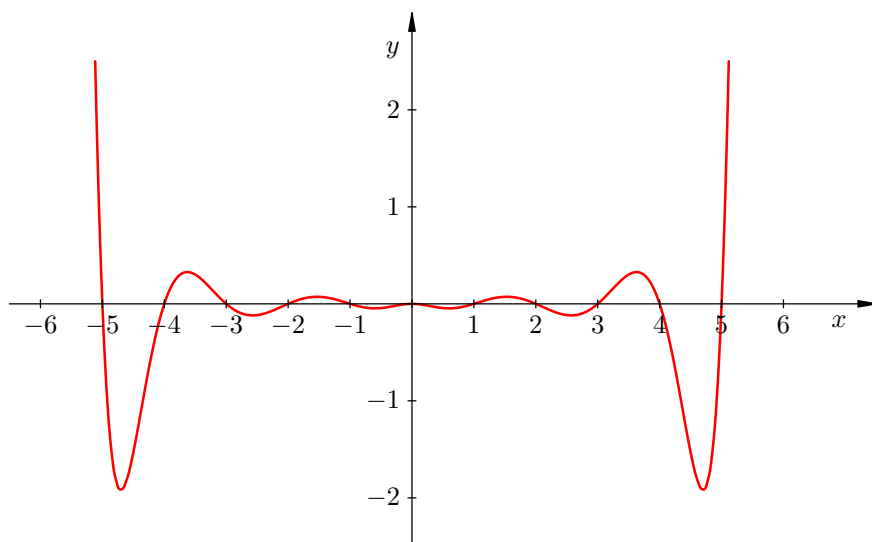
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 8.



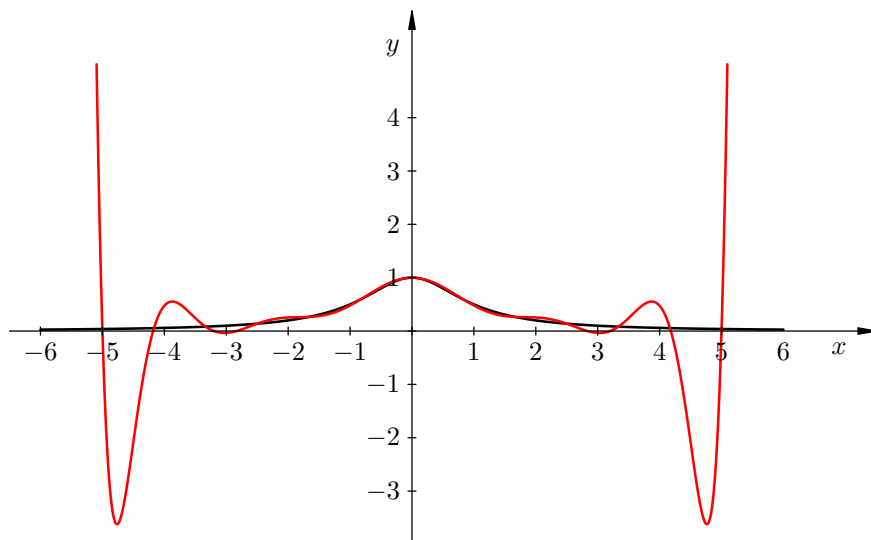
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 8.



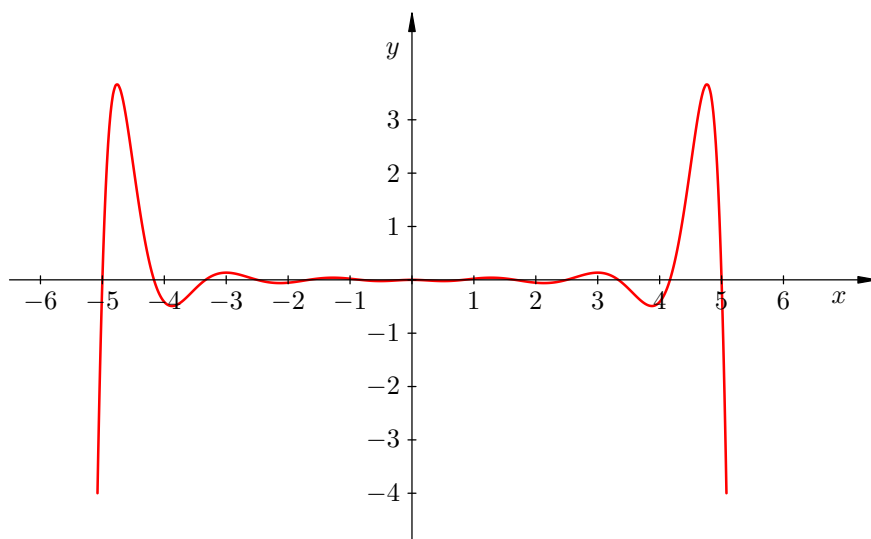
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 10.



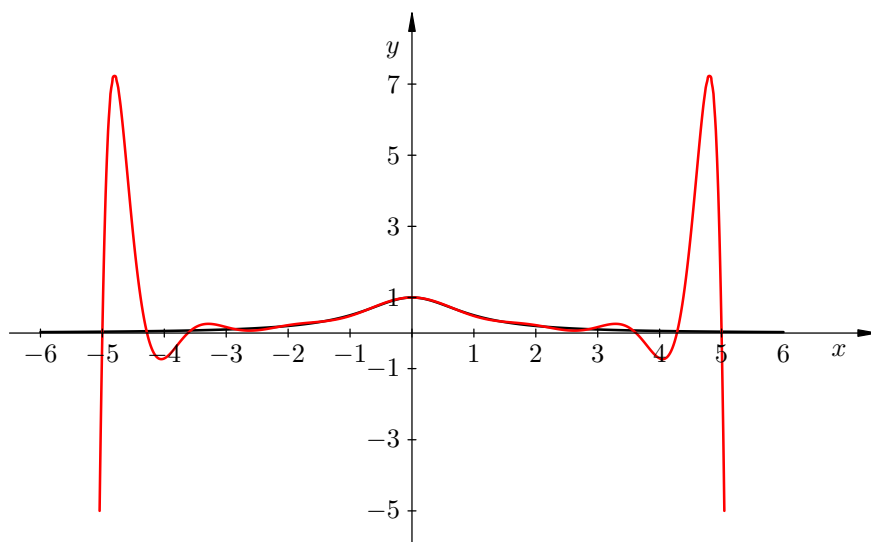
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 10.



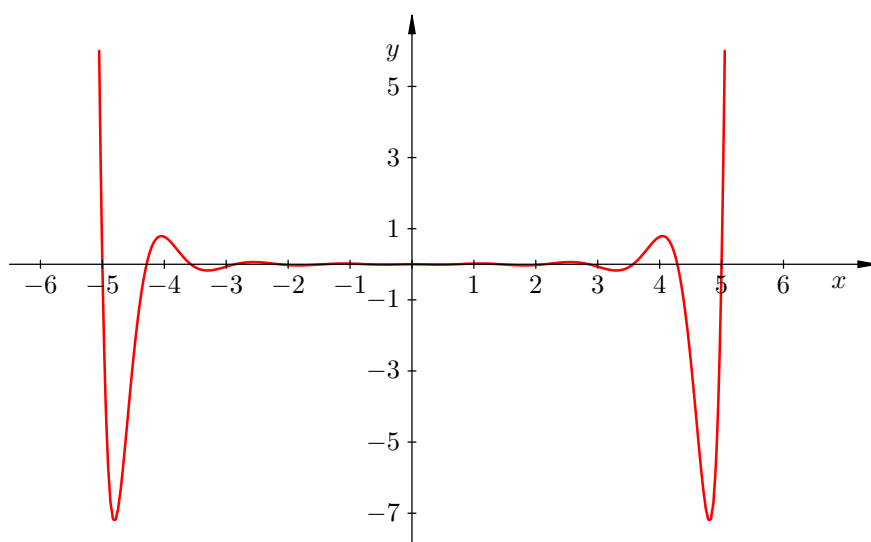
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 12.



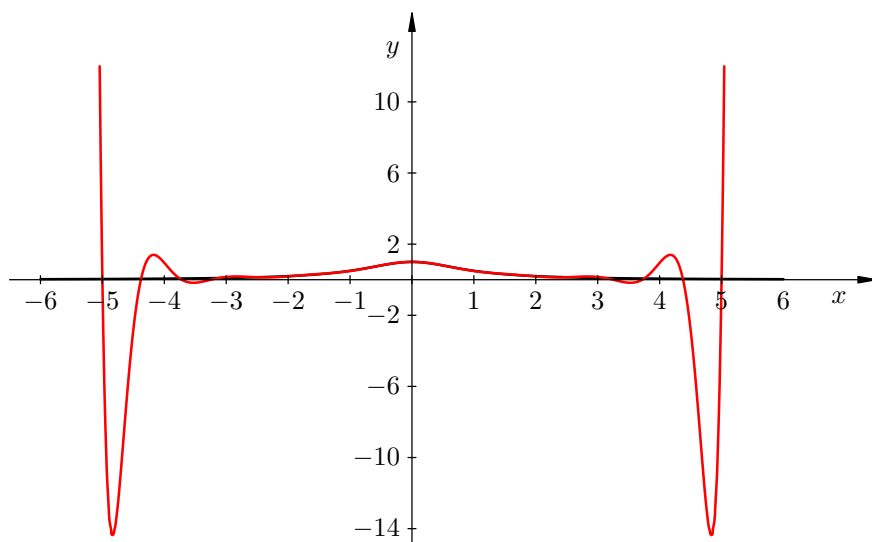
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 12.



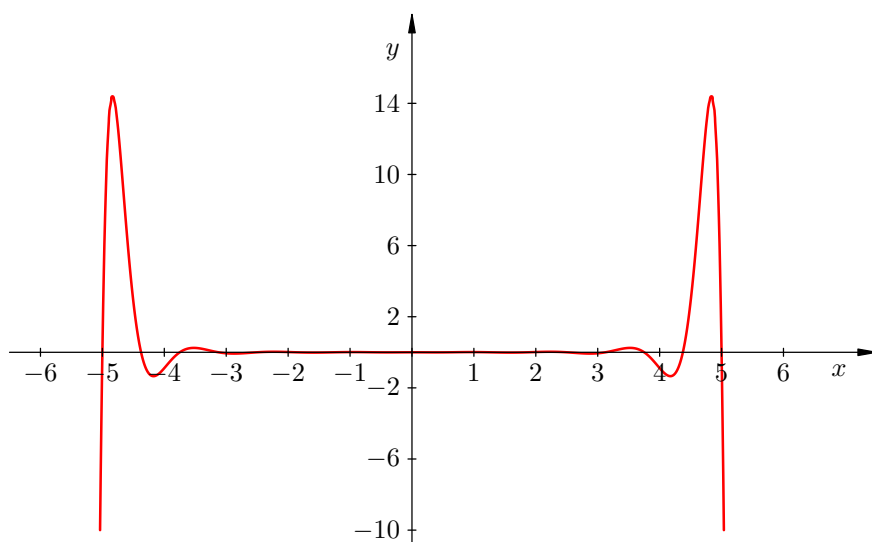
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 14.



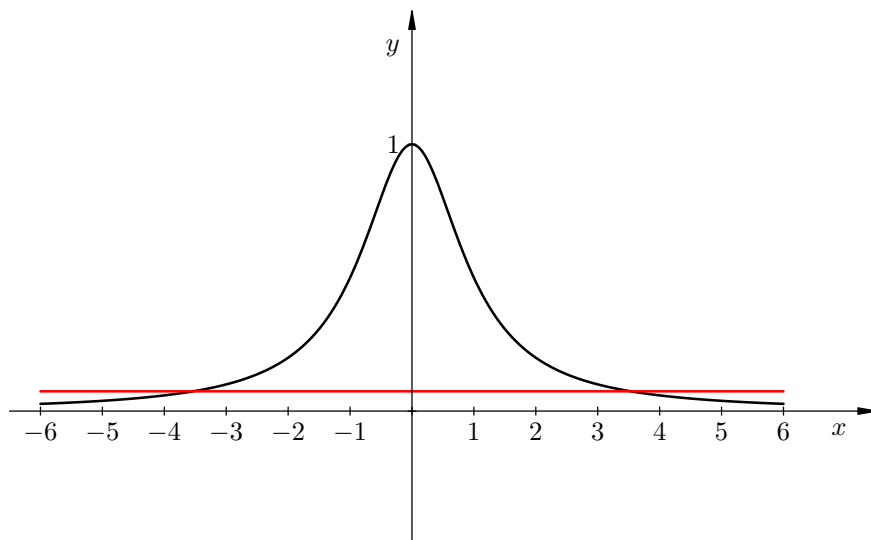
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 14.



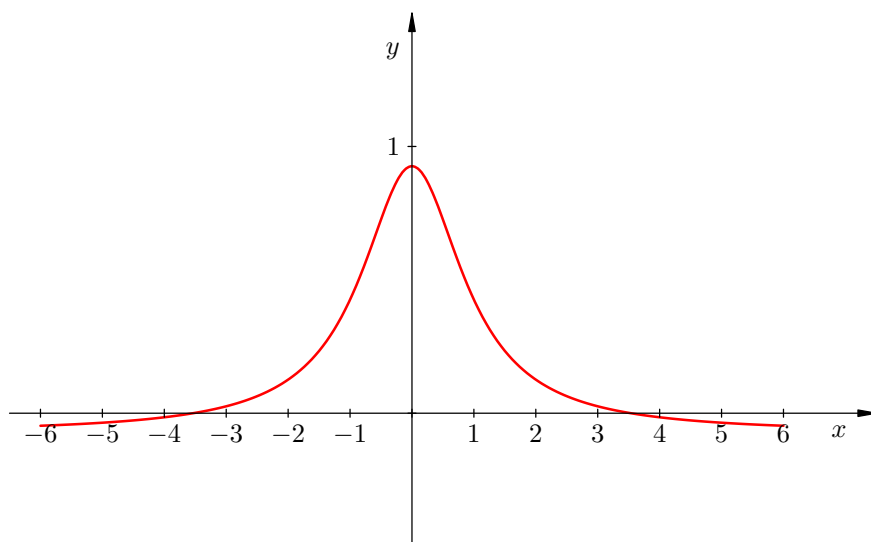
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 16.



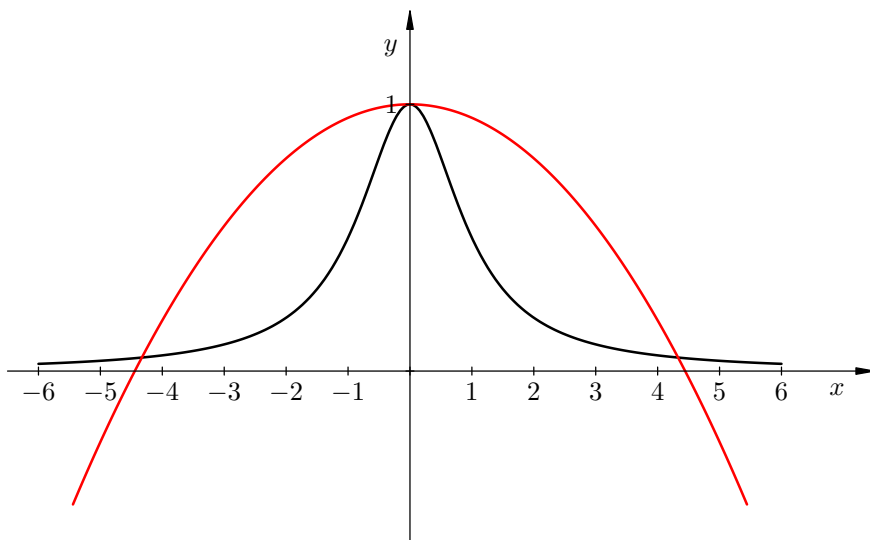
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 16.



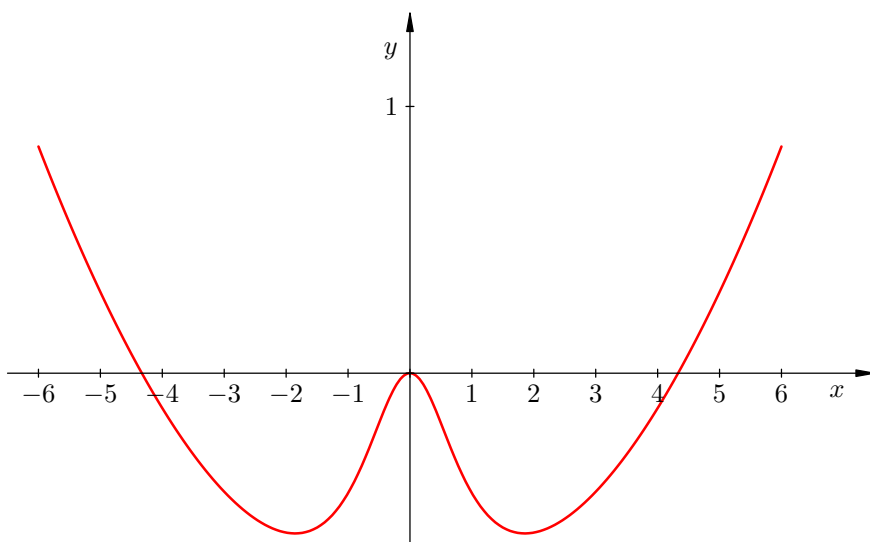
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 1.



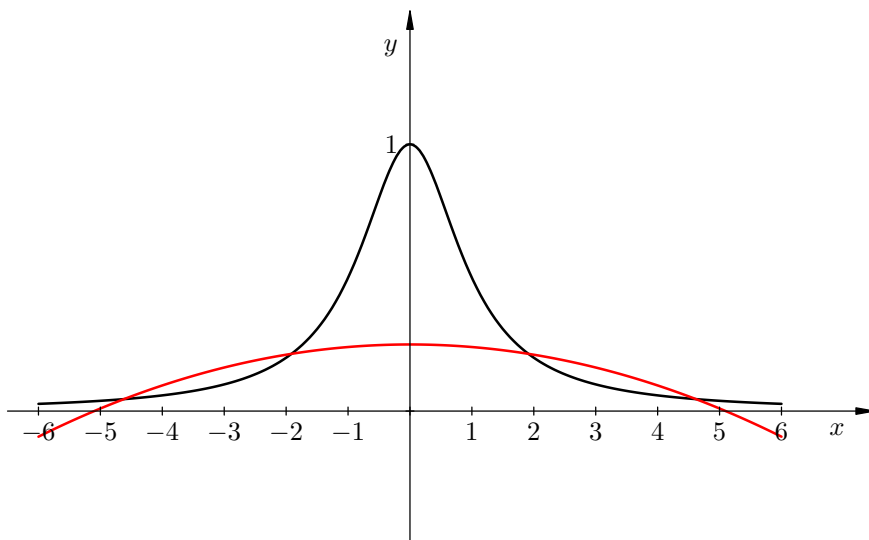
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 1.



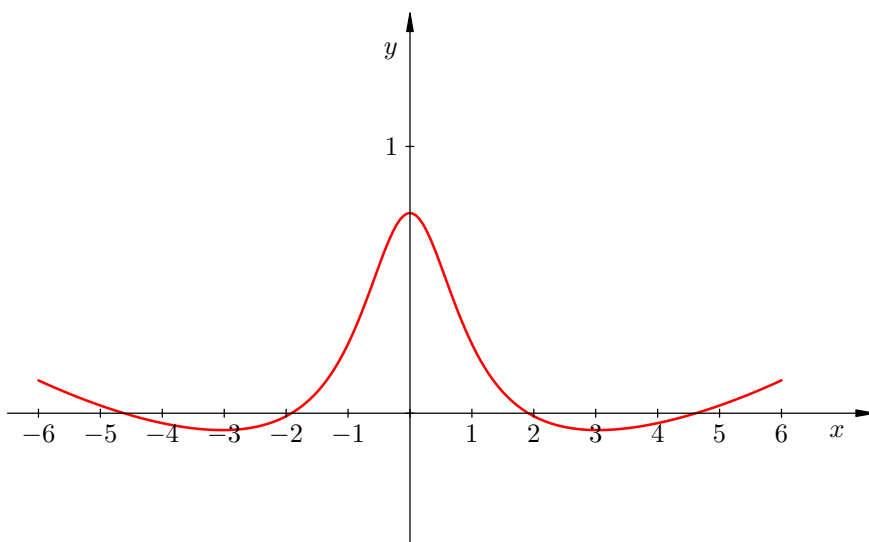
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 2.



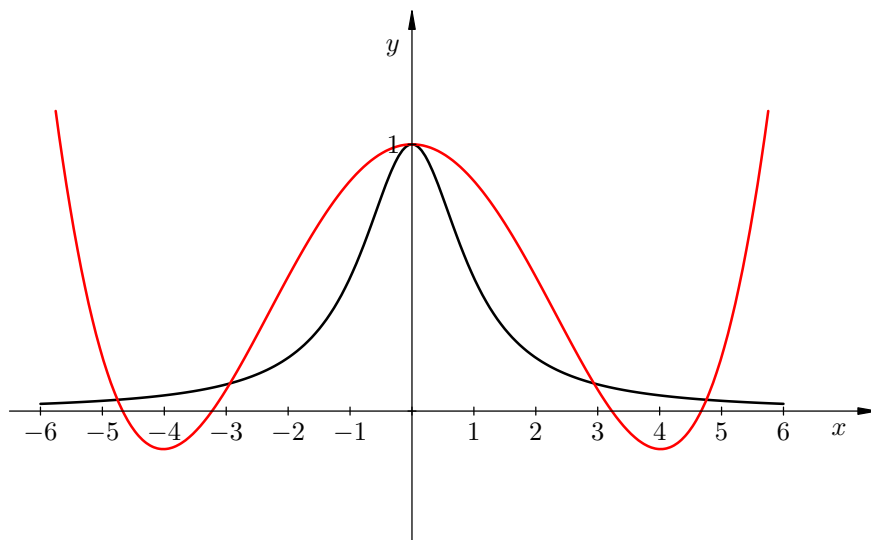
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 2.



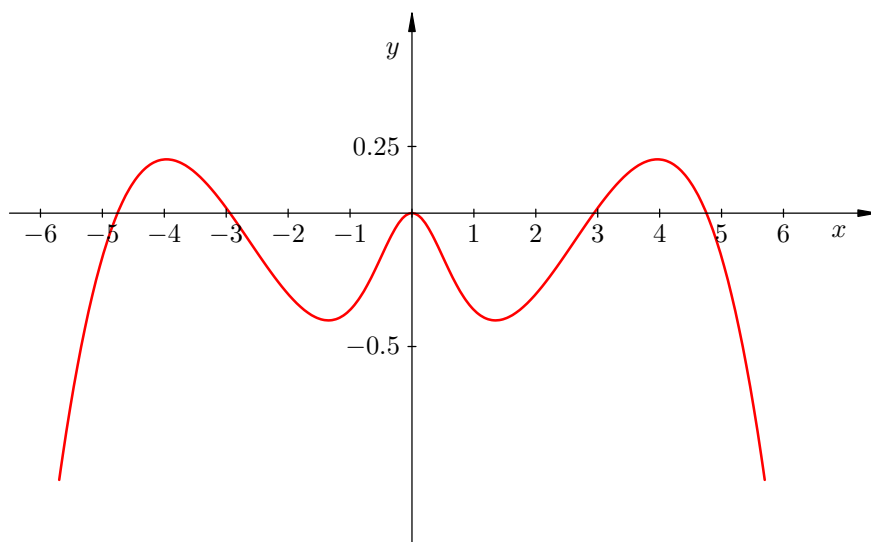
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 3.



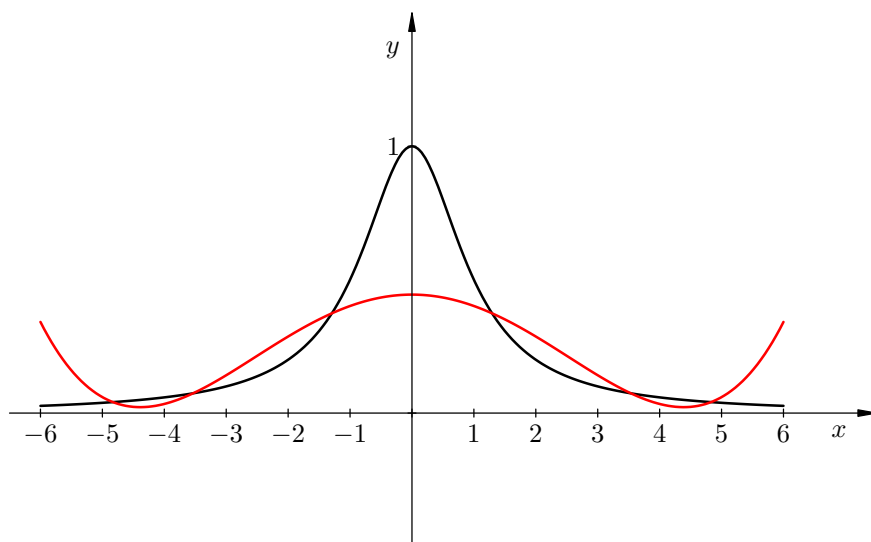
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 3.



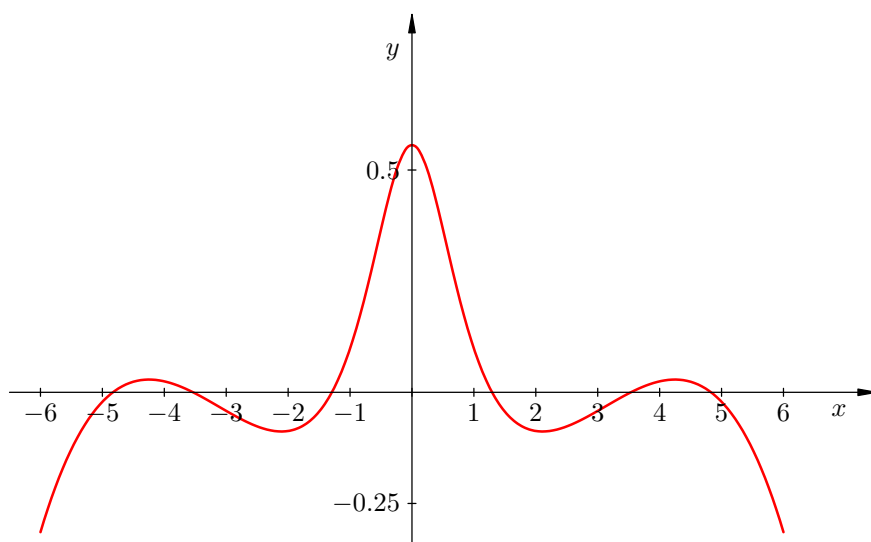
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 4.



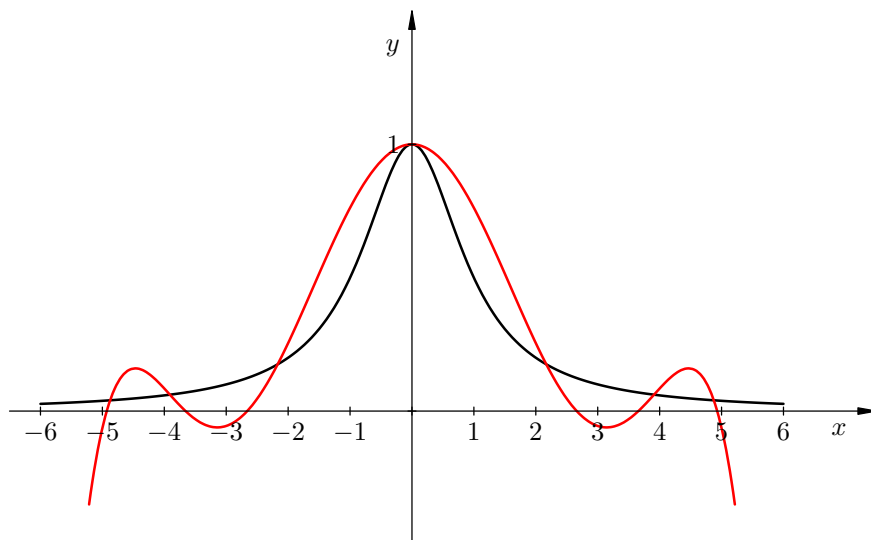
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 4.



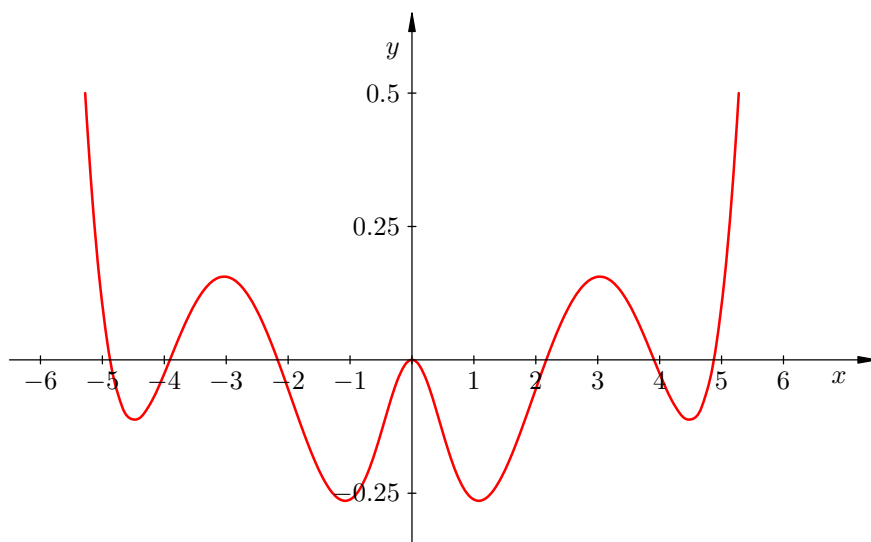
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 5.



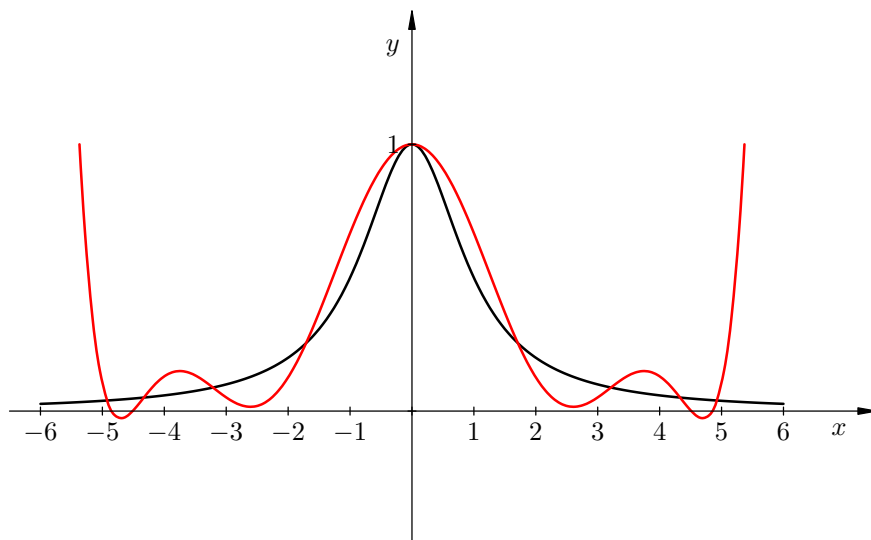
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 5.



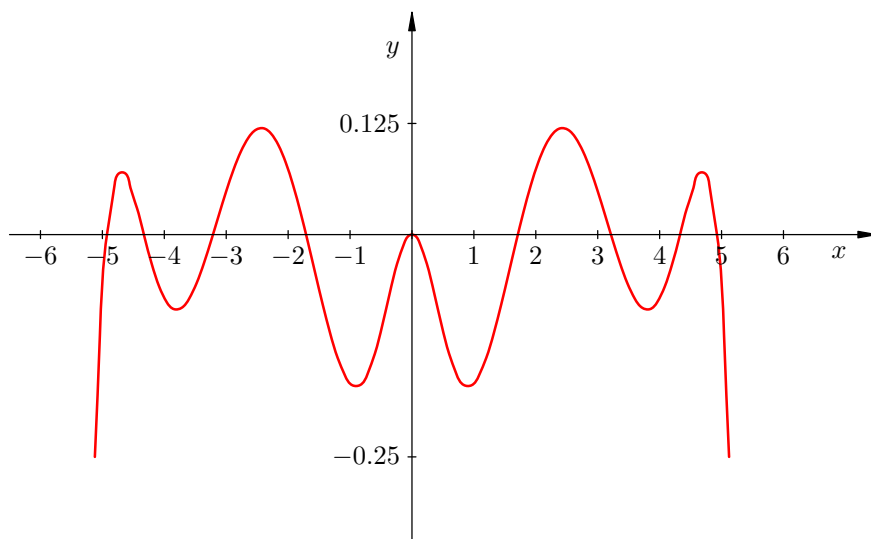
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 6.



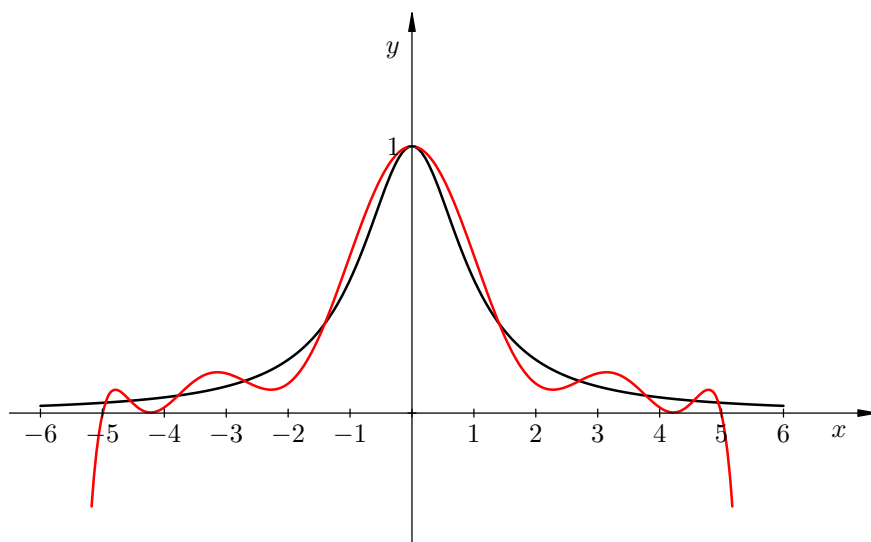
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 6.



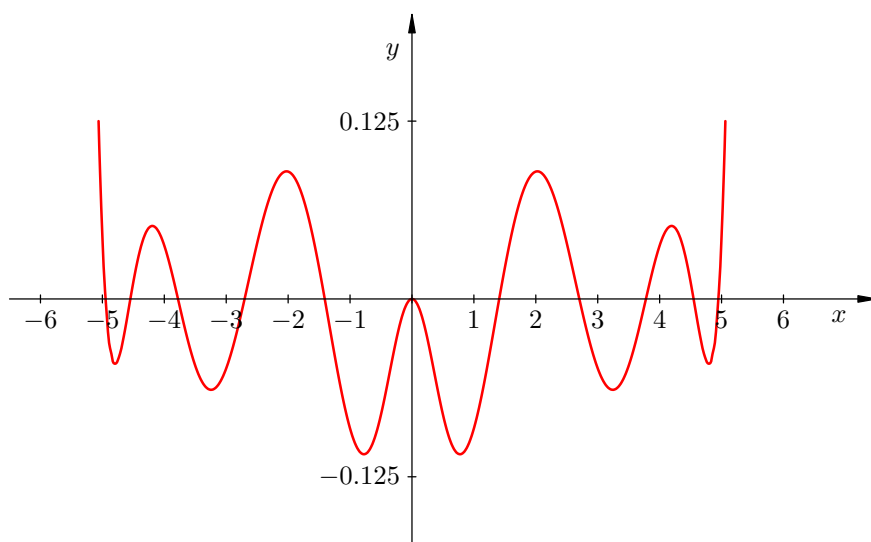
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 8.



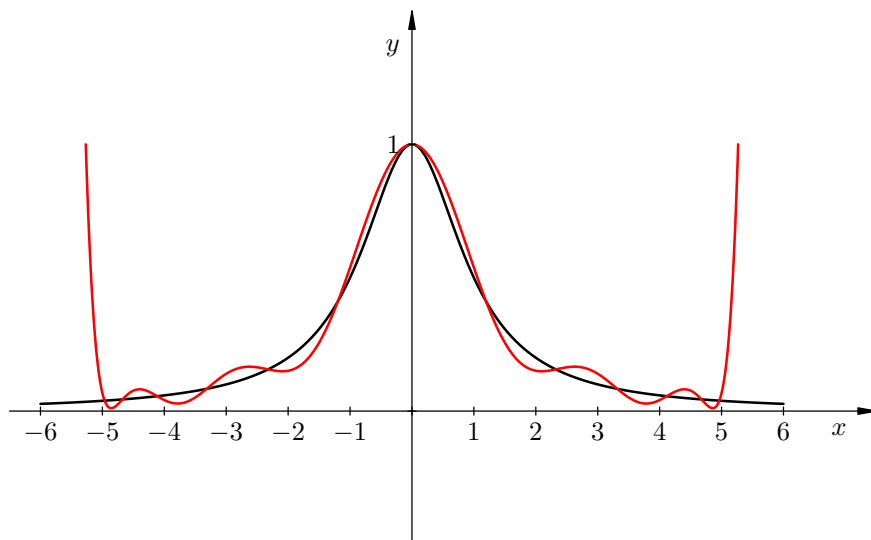
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 8.



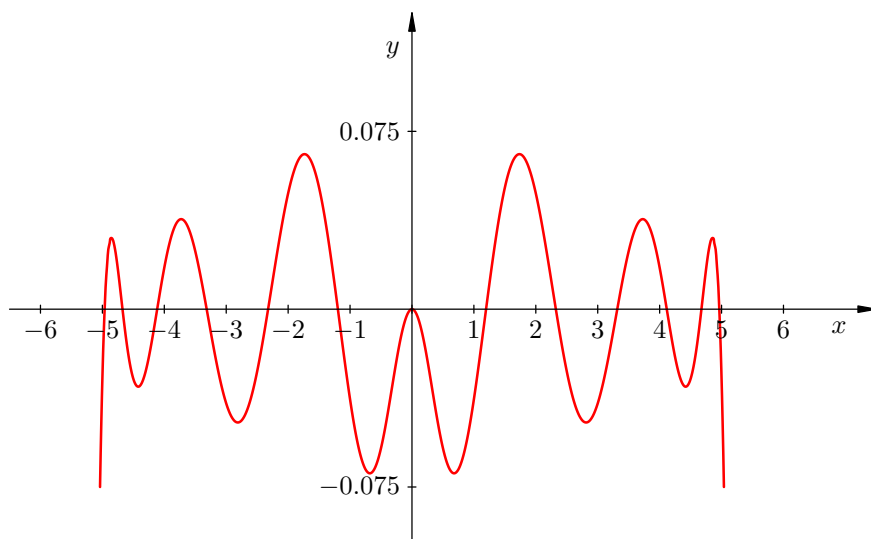
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 10.



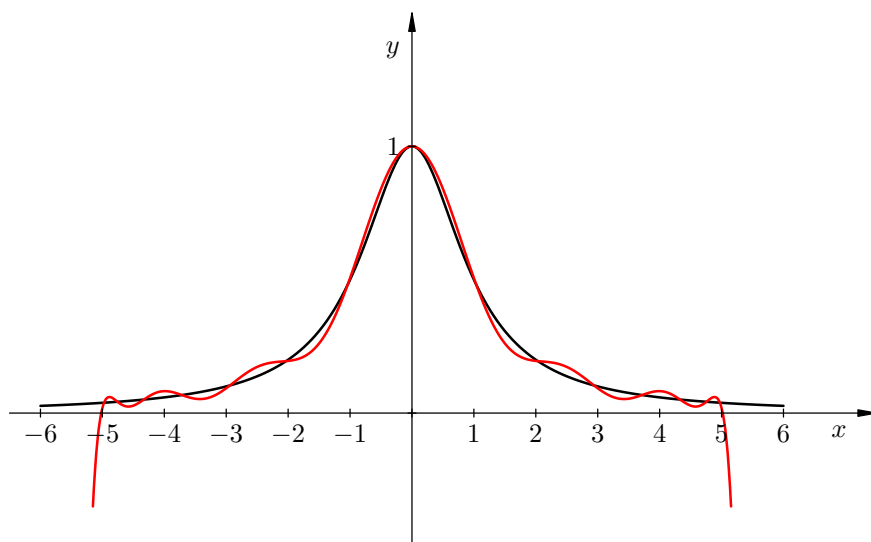
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 10.



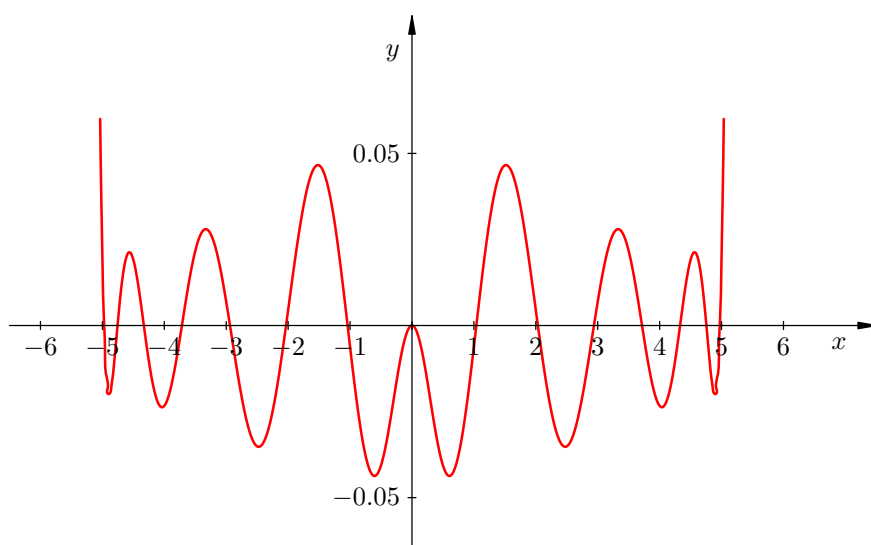
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 12.



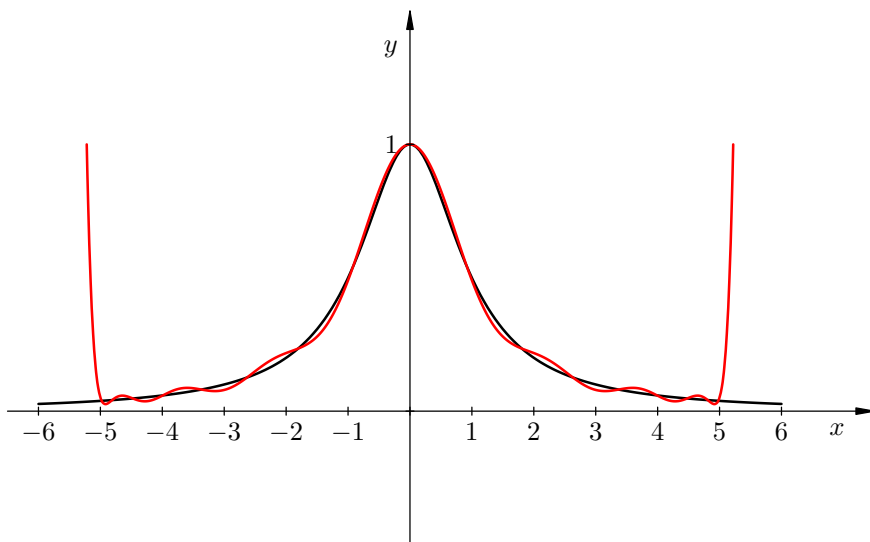
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 12.



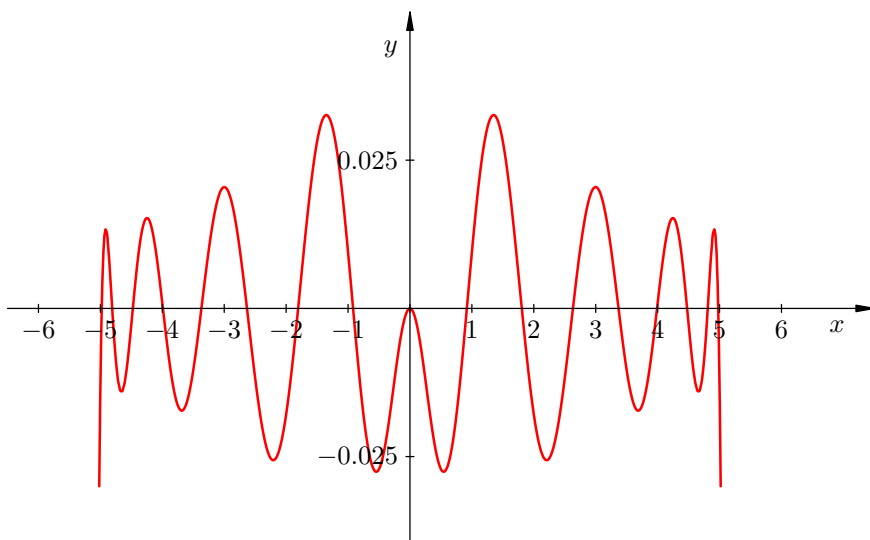
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 14.



Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 14.



Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 16.



Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 16.

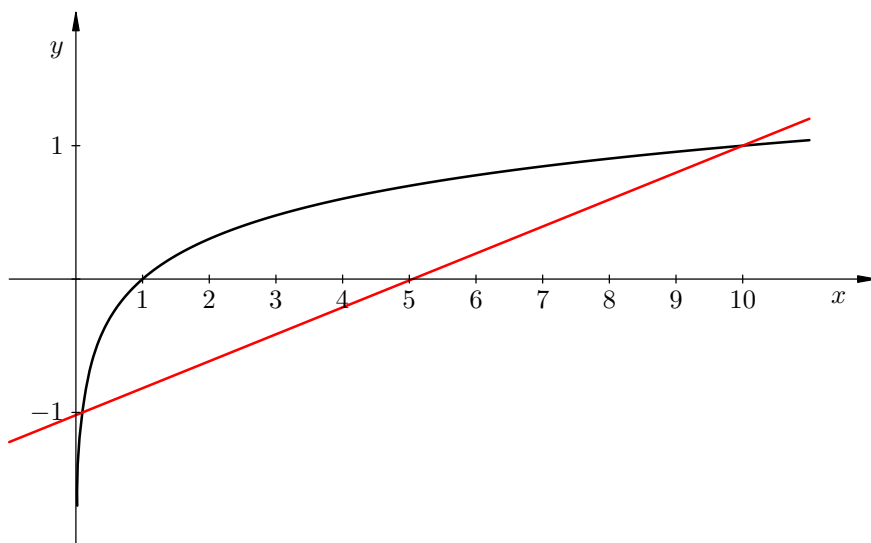
Primjer 5.2.2. Promotrimo grafove interpolacijskih polinoma stupnjeva 1–6 koji interpoliraju funkciju

$$f(x) = \log(x) \quad \text{za } x \in [0.1, 10]$$

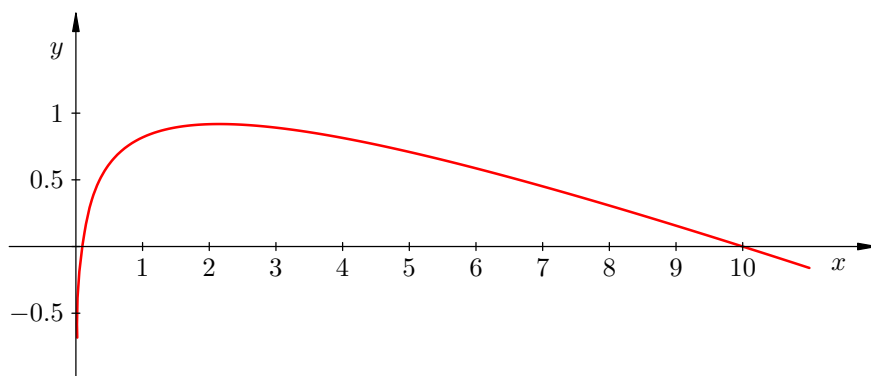
na ekvidistantnoj i Čebiševljevoj mreži.

Primijetiti ćete da je greška interpolacije najveća na prvom podintervalu bez obzira na stupanj interpolacijskog polinoma. Razlog leži u činjenici da funkcija $\log(x)$ ima singularitet u 0, a početna točka interpolacije je blizu.

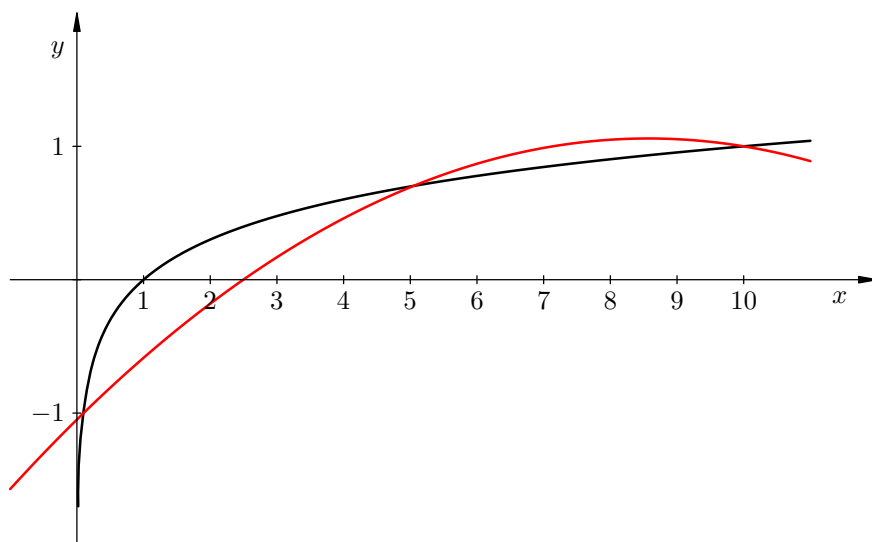
Prva grupa slika su redom funkcija (crno) i interpolacijski polinom (crveno) za ekvidistantnu mrežu, te pripadna greška, a zatim to isto za Čebiševljevu mrežu.



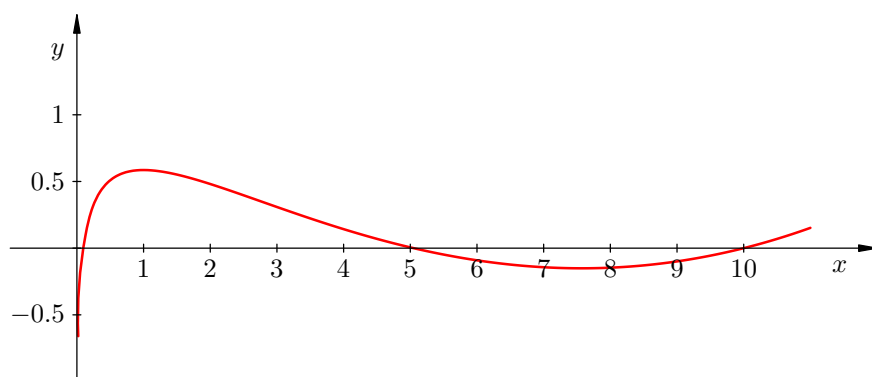
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 1.



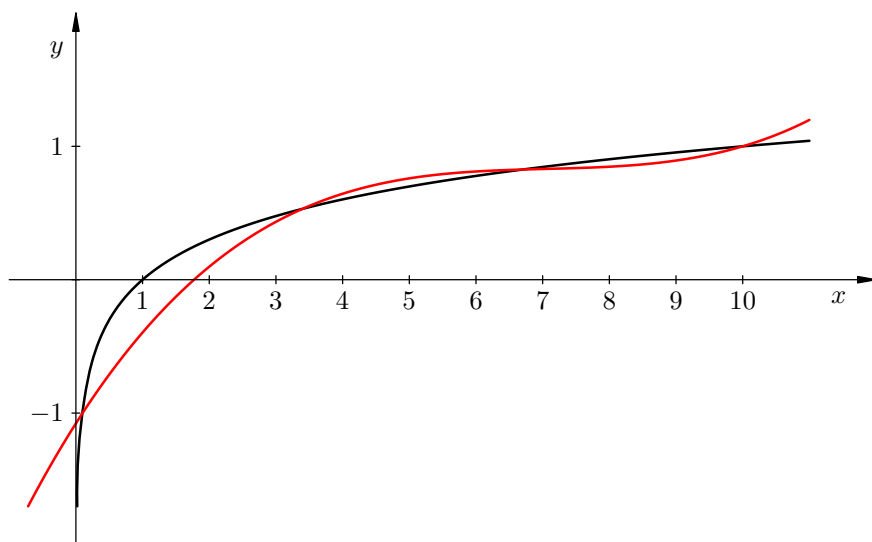
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 1.



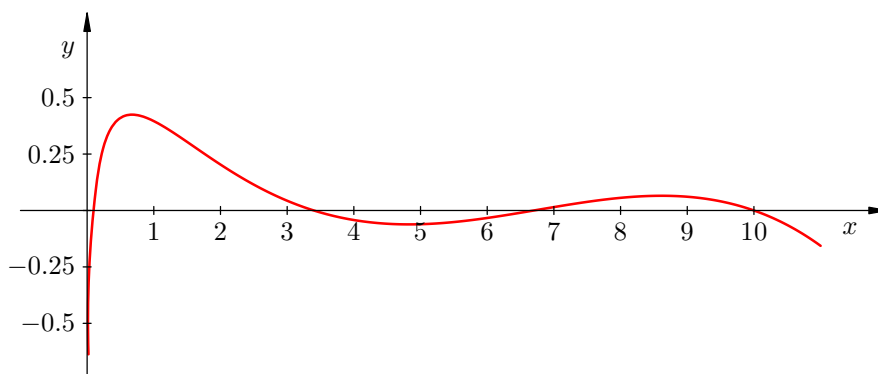
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 2.



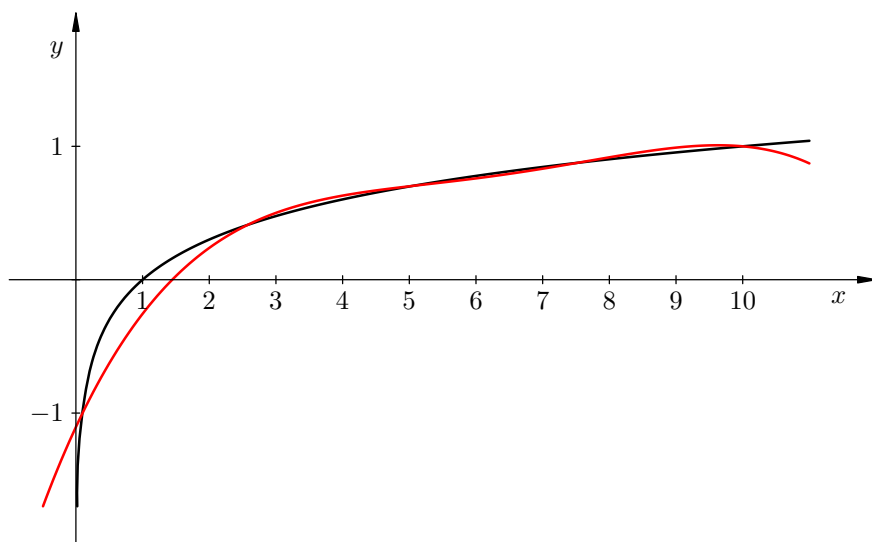
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 2.



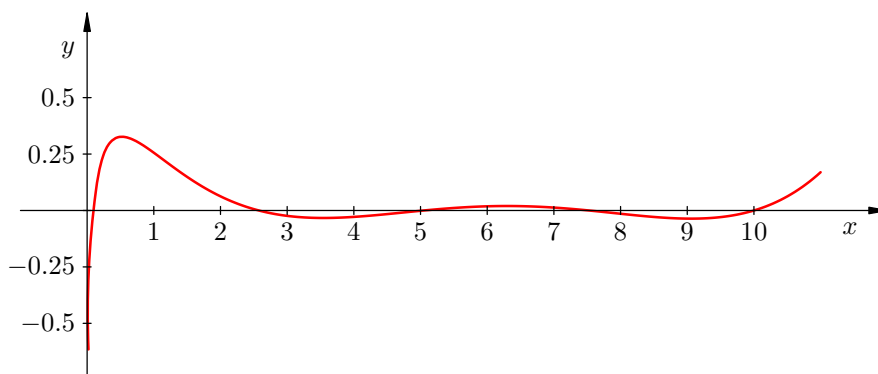
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 3.



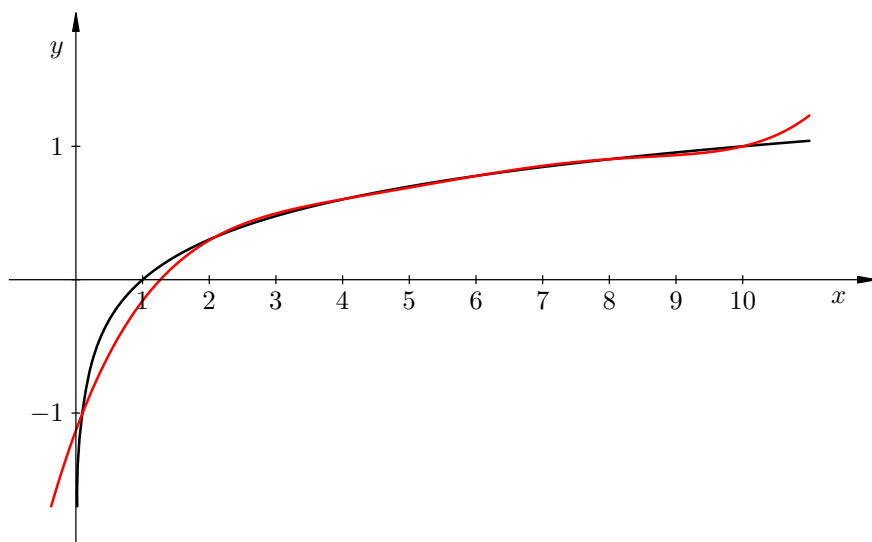
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 3.



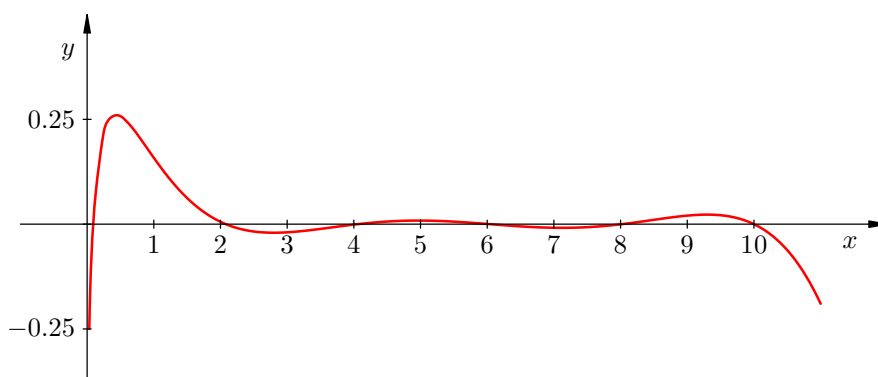
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 4.



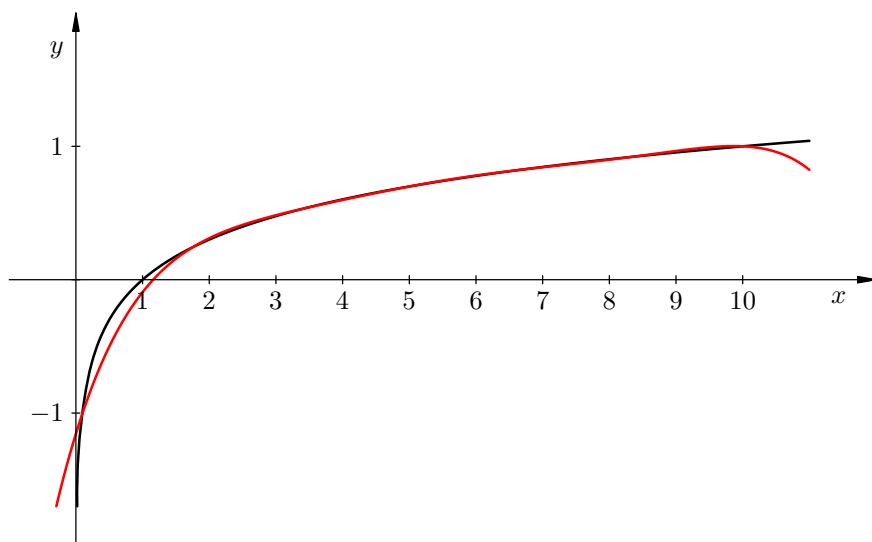
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 4.



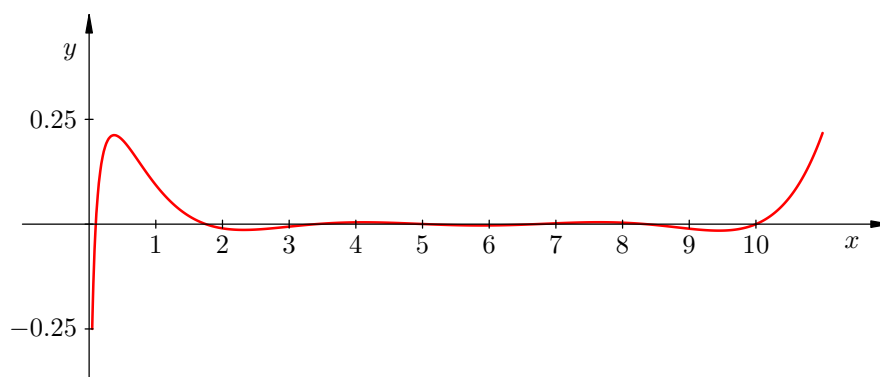
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 5.



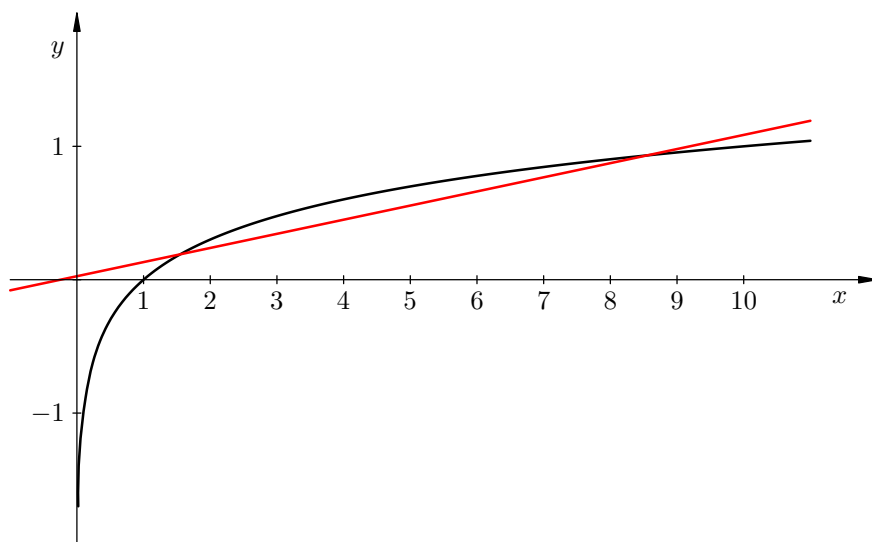
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 5.



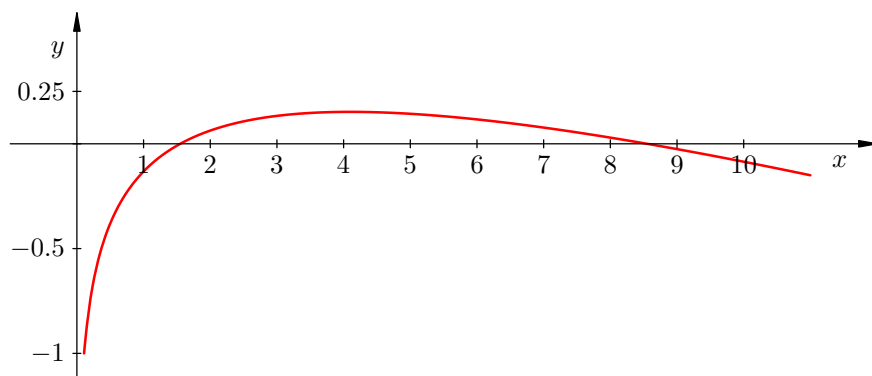
Ekvidistantna mreža, interpolacijski polinom stupnja 6.



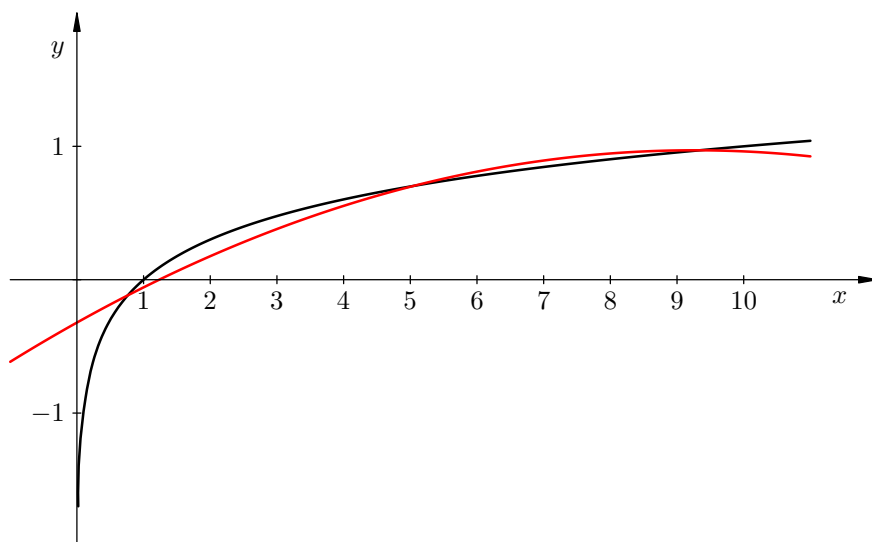
Ekvidistantna mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 6.



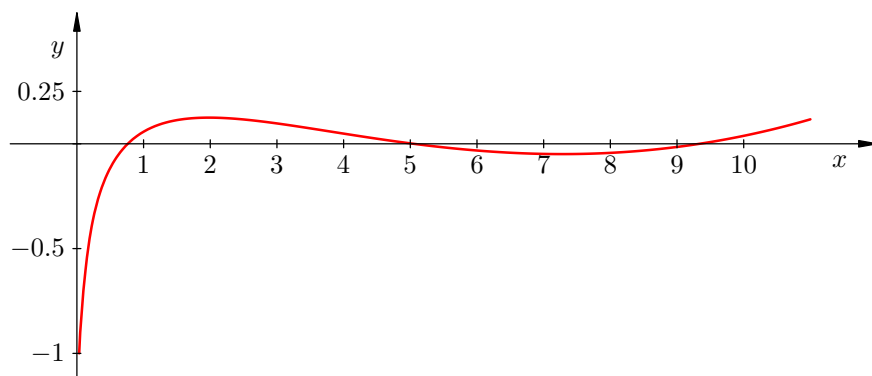
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 1.



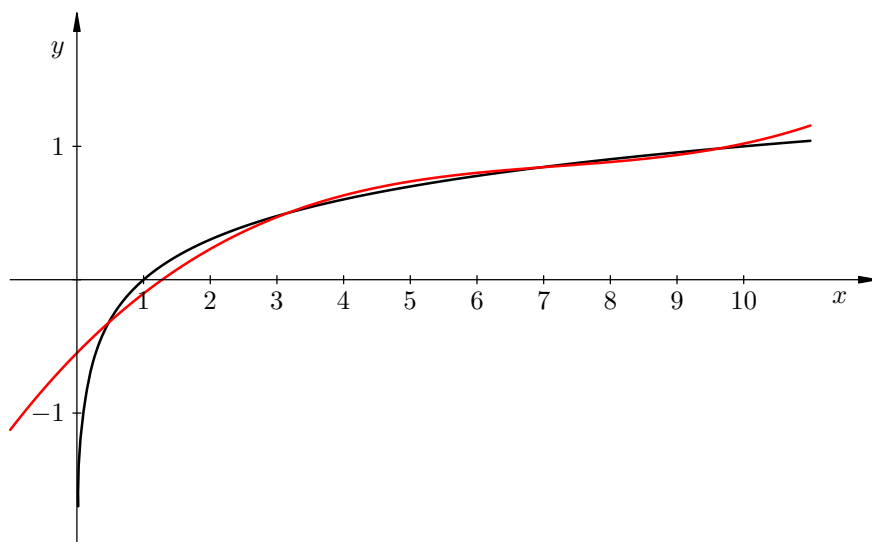
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 1.



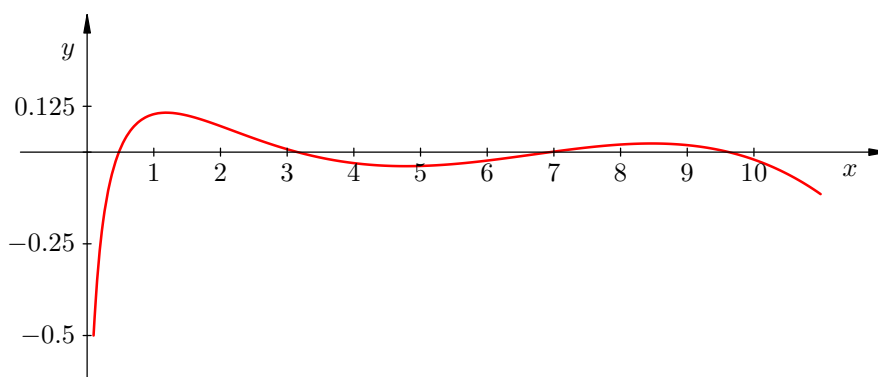
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 2.



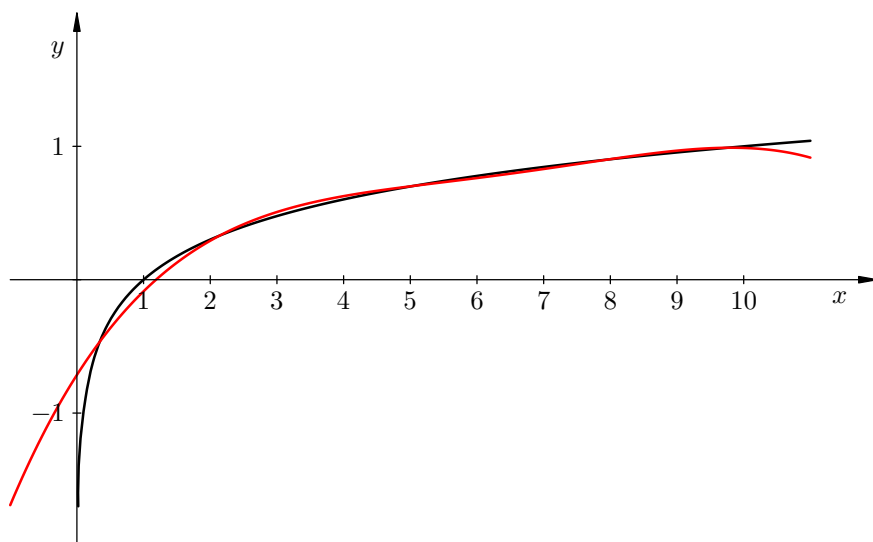
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 2.



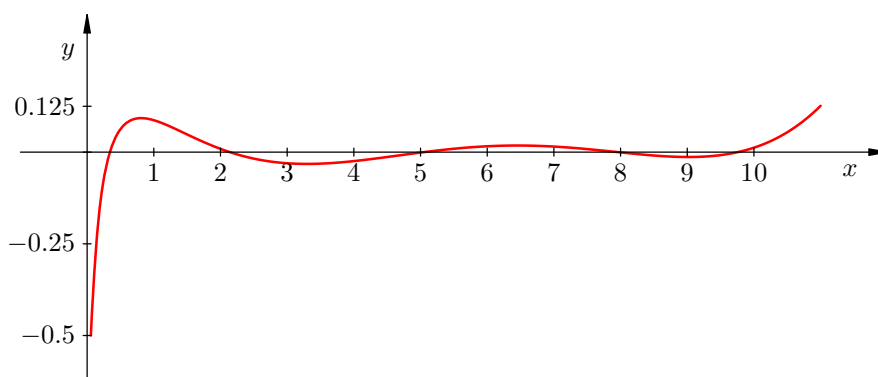
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 3.



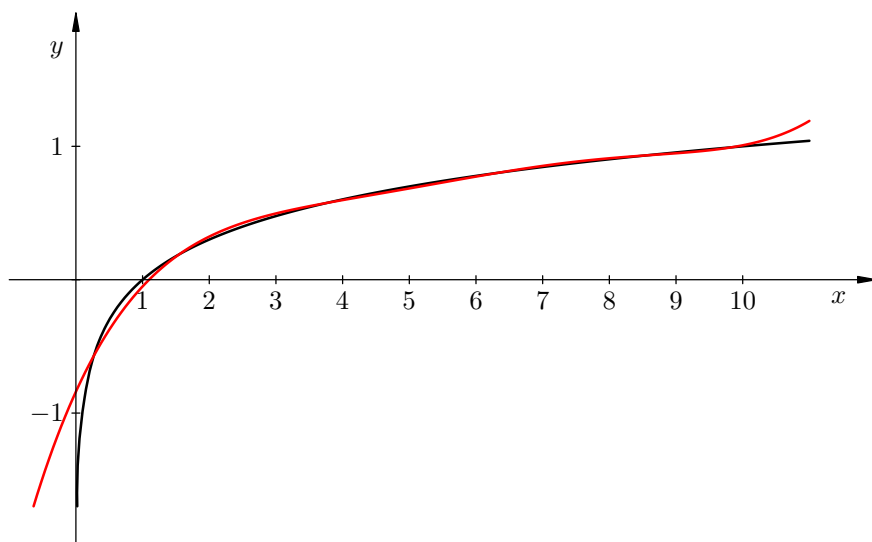
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 3.



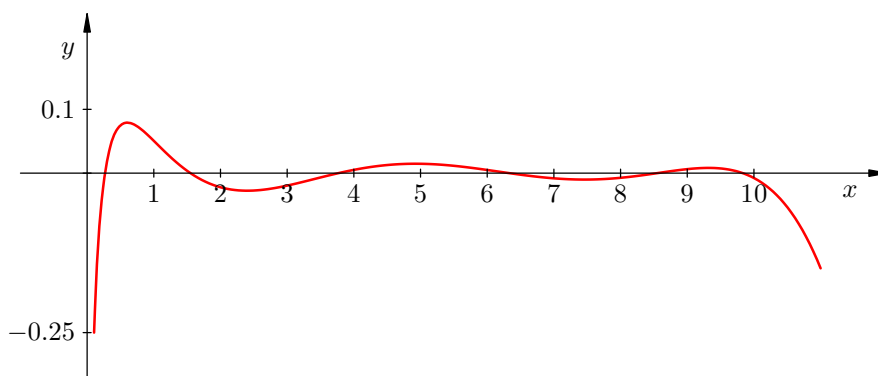
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 4.



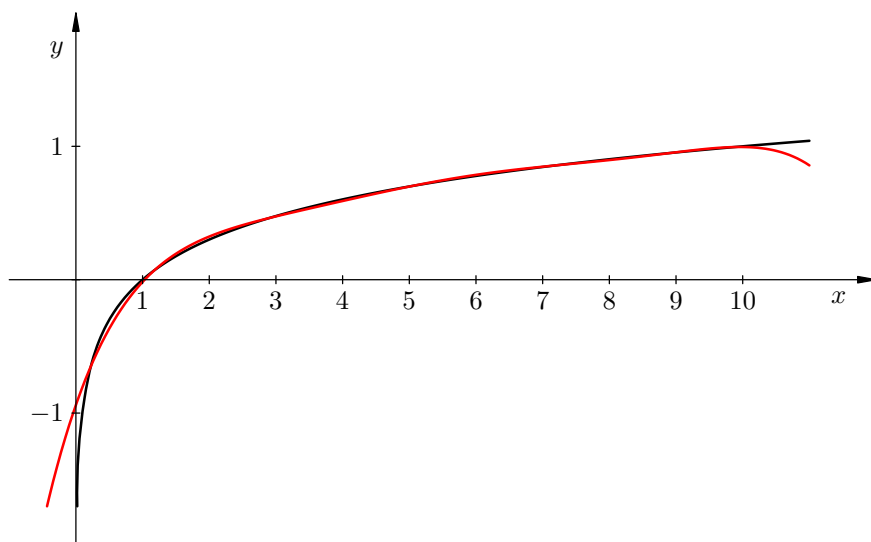
Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 4.



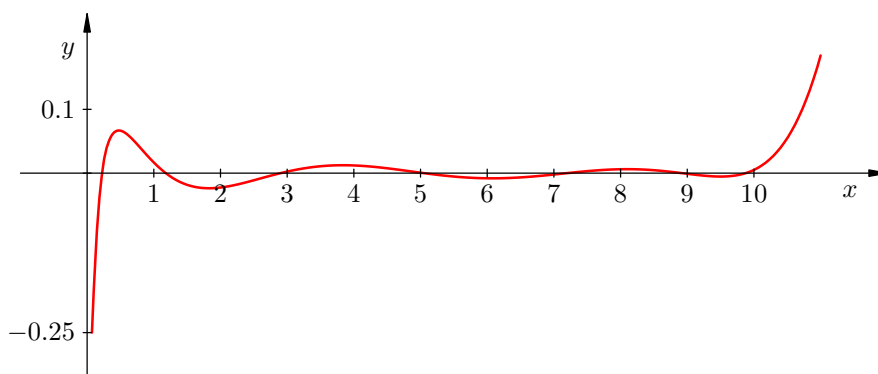
Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 5.



Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 5.



Čebiševljeva mreža, interpolacijski polinom stupnja 6.



Čebiševljeva mreža, greška interpolacijskog polinoma stupnja 6.

5.3. Diskretna metoda najmanjih kvadrata

Neka je funkcija f zadana na diskretnom skupu točaka x_0, \dots, x_n kojih je mnogo više nego nepoznatih parametara aproksimacijske funkcije

$$\varphi(x, a_0, \dots, a_m).$$

Funkcija φ određuje se iz uvjeta da euklidska norma (norma 2) vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije bude najmanja moguća, tj. tako da minimiziramo S ,

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

Ovu funkciju S (kvadrat euklidske norme vektora greške) interpretiramo kao funkciju nepoznatih parametara

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

Očito je uvijek $S \geq 0$, bez obzira kakvi su parametri. Dakle, zadatak je minimizirati funkciju S kao funkciju više varijabli a_0, \dots, a_m . Ako je S dovoljno glatka funkcija, a naša je (jer je funkcija u parametrima a_k), nužni uvjet ekstrema je

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

Takav pristup vodi na tzv. **sustav normalnih jednažbi**.

5.3.1. Linearni problemi i linearizacija

Ilustrirajmo to na najjednostavnijem primjeru, kad je aproksimacijska funkcija pravac.

Primjer 5.3.1. *Zadane su točke $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, koje po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimiramo pravcem*

$$\varphi(x) = a_0 + a_1x.$$

Greška aproksimacije u čvorovima koju minimiziramo je

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (f_k - \varphi(x_k))^2 = \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 - a_1x_k)^2 \rightarrow \min.$$

Nađimo parcijalne derivacije po parametrima a_0 i a_1 :

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 - a_1x_k),$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 - a_1x_k)x_k.$$

Dijeljenjem s -2 i sređivanjem po nepoznanicama a_0, a_1 , dobivamo linearni sustav

$$a_0(n+1) + a_1 \sum_{k=0}^n x_k = \sum_{k=0}^n f_k$$

$$a_0 \sum_{k=0}^n x_k + a_1 \sum_{k=0}^n x_k^2 = \sum_{k=0}^n f_k x_k.$$

Uvedemo li standardne skraćene oznake

$$s_\ell = \sum_{k=0}^n x_k^\ell, \quad t_\ell = \sum_{k=0}^n f_k x_k^\ell, \quad \ell \geq 0,$$

linearni sustav možemo pisati kao

$$\begin{aligned} s_0 a_0 + s_1 a_1 &= t_0 \\ s_1 a_0 + s_2 a_1 &= t_1. \end{aligned} \tag{5.3.1}$$

Nije teško pokazati da je matrica sustava regularna, jer je njena determinanta različita od nule. Dakle, postoji jedinstveno rješenje sustava. Samo rješenje dobiva se rješavanjem linearnog sustava (5.3.1).

Ostaje još pitanje da li smo dobili minimum, ali to nije teško pokazati, korištenjem drugih parcijalnih derivacija (dovoljan uvjet minimuma je pozitivna definitnost Hesseove matrice). Ipak, provjera da se radi o minimumu, može i puno lakše. Budući da se radi o zbroju kvadrata, S predstavlja paraboloid s otvorom prema gore u varijablama a_0, a_1 , pa je jasno da takvi paraboloidi imaju minimum. Zbog toga se nikad ni ne provjerava da li je dobiveno rješenje minimum za S .

Za funkciju φ mogli bismo uzeti i polinom višeg stupnja,

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

ali postoji opasnost da je za malo veće m ($m \approx 10$) dobiveni sustav vrlo loše uvjetovan (matrica sustava vrlo blizu singularne matrice), pa dobiveni rezultati mogu biti jako pogrešni. Zbog toga se za nikad ne koristi prikaz polinoma u bazi potencija. Ako se uopće koriste aproksimacije polinomima viših stupnjeva, onda se to radi korištenjem ortogonalnih polinoma.

Linearni model diskretnih najmanjih kvadrata je potpuno primjenjiv na opću linearnu funkciju

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

gdje su $\varphi_0, \dots, \varphi_m$ poznate (zadane) funkcije. Ilustrirajmo to ponovno na općoj linearnoj funkciji s 2 parametra.

Primjer 5.3.2. Zadane su točke $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, koje po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimiramo funkcijom oblika

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

Postupak je potpuno isti kao u prošlom primjeru. Opet minimiziramo kvadrat euklidske norme vektora pogrešaka aproksimacije u čvorovima

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

Sređivanjem parcijalnih derivacija

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

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

po varijablama a_0 , a_1 , uz dogovor da je

$$s_0 = \sum_{k=0}^n \varphi_0^2(x_k), \quad s_1 = \sum_{k=0}^n \varphi_0(x_k) \varphi_1(x_k), \quad s_2 = \sum_{k=0}^n \varphi_1^2(x_k),$$

$$t_0 = \sum_{k=0}^n f_k \varphi_0(x_k), \quad t_1 = \sum_{k=0}^n f_k \varphi_1(x_k),$$

dobivamo potpuno isti oblik linearnog sustava

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 = t_0$$

$$s_1 a_0 + s_2 a_1 = t_1.$$

Ovaj sustav ima ista svojstva kao i u prethodnom primjeru. Pokažite to!

Što ako φ nelinearno ovisi o parametrima? Dobili bismo nelinearni sustav jednadžbi, koji se relativno teško rješava. Uglavnom, problem postaje ozbiljan optimizacijski problem, koji se, recimo, može rješavati metodama pretraživanja ili nekim drugim optimizacijskim metodama, posebno prilagođenim upravo za rješavanje nelinearnog problema najmanjih kvadrata (na primjer, Levenberg–Marquardt metoda).

Postoji i drugi pristup. Katkad se jednostavnim transformacijama problem može transformirati u linearni problem najmanjih kvadrata. Nažalost, rješenja lineariziranog problema najmanjih kvadrata i rješenja originalnog nelinearnog problema, u principu, **nisu** jednaka. Problem je u različitim mjerama za udaljenost točaka, odnosno mjerama za grešku.

Ilustrirajmo, ponovno, nelinearni problem najmanjih kvadrata na jednom jednostavnom primjeru.

Primjer 5.3.3. Zadane su točke $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, koje po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimiramo funkcijom oblika

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

Greška aproksimacije u čvorovima (koju minimiziramo) je

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

Parcijalnim deriviranjem po varijablama a_0 i a_1 dobivamo

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

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

što je nelinearan sustav jednažbi.

S druge strane, ako logaritmiramo relaciju

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

dobivamo

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

Moramo logaritmirati još i vrijednosti funkcije f u točkama x_k , pa uz supstitucije

$$h(x) = \ln f(x), \quad h_k = h(x_k) = \ln f_k, \quad k = 0, \dots, n,$$

i

$$\psi(x) = \ln \varphi(x) = b_0 + b_1 x,$$

gdje je

$$b_0 = \ln a_0, \quad b_1 = a_1,$$

dobivamo linearni problem najmanjih kvadrata

$$\tilde{S} = \tilde{S}(b_0, b_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - \psi(x_k))^2 = \sum_{k=0}^n (h_k - b_0 - b_1 x_k)^2 \rightarrow \min.$$

Na kraju, iz rješenja b_0 i b_1 ovog problema, lako očitamo a_0 i a_1

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

Uočite da ovako dobiveno rješenje uvijek daje pozitivan a_0 , tj. linearizacijom dobivena funkcija $\varphi(x)$ će uvijek biti veća od 0. Jasno da to nije “pravo” rješenje za sve početne podatke (x_k, f_k) . No, možemo li na ovako opisani način linearizirati sve početne podatke? Očito je **ne**, jer mora biti $f_k > 0$ da bismo mogli logaritmirati.

Ipak, i kad su neki $f_k \leq 0$, nije teško, korištenjem translacije svih podataka dobiti $f_k + \text{translacija} > 0$, pa onda nastaviti postupak linearizacije. Pokušajte korektno formulirati linearizaciju.

Na kraju odjeljka dajemo i nekoliko funkcija koje su često u upotrebi i njihovih standardnih linearizacija u problemu najmanjih kvadrata.

(a) Funkcija

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

linearizira se logaritmiranjem

$$\psi(x) = \log \varphi(x) = \log(a_0) + a_1 \log x, \quad h_k = \log f_k, \quad k = 0, \dots, n.$$

Drugim riječima, dobili smo linearni problem najmanjih kvadrata

$$\tilde{S} = \tilde{S}(b_0, b_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - b_0 - b_1 \log(x_k))^2 \rightarrow \min,$$

gdje je

$$b_0 = \log(a_0), \quad b_1 = a_1.$$

U ovom slučaju, da bismo mogli provesti linearizaciju, moraju biti i $x_k > 0$ i $f_k > 0$.

(b) Funkcija

$$\varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}$$

linearizira se na sljedeći način

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 x, \quad h_k = \frac{1}{f_k}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\tilde{S} = \tilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \rightarrow \min.$$

(c) Funkciju

$$\varphi(x) = \frac{x}{a_0 + a_1 x}$$

možemo linearizirati na više načina. Prvo, možemo staviti

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 \frac{1}{x} + a_1, \quad h_k = \frac{1}{f_k}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\tilde{S} = \tilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n \left(h_k - a_0 \frac{1}{x_k} - a_1 \right)^2 \rightarrow \min.$$

Može se koristiti i sljedeći način

$$\psi(x) = \frac{x}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 x, \quad h_k = \frac{x_k}{f_k}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\tilde{S} = \tilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \rightarrow \min .$$

(d) Funkcija

$$\varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 e^{-x}}$$

linearizira se stavljanjem

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 e^{-x}, \quad h_k = \frac{1}{f_k}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\tilde{S} = \tilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - a_0 - a_1 e^{-x_k})^2 \rightarrow \min .$$

5.4. Primjeri

Pokažimo još neke primjere za metodu najmanjih kvadrata. Prvo pitanje koje si postavljamo je jesmo li dobro izabrali oblik aproksimacijske funkcije. Kad nađemo aproksimaciju, to ćemo relativno lako utvrditi gledanjem grafa pogreške. Ako on “jednoliko” oscilira oko $x = 0$, onda je aproksimacijska funkcija dobro odabrana.

Nadalje, metoda najmanjih kvadrata može ukloniti i slučajne greške (recimo mjerenja). Pokažimo to na sljedećem primjeru.

Primjer 5.4.1. *Eksperimentalni podaci uzeti su tako da se koordinate pravca*

$$y(x) = 4x + 3$$

za $x = 0, 1, \dots, 100$ slučajno (uniformno) perturbiraju za maksimalno 1 i dobiju se podaci

$$f_k = 4x_k + 3 + \text{slučajna perturbacija manja ili jednaka 1}, \quad k = 0, \dots, 100.$$

Tada prvih nekoliko podataka izgleda ovako:

x_k	$y(x_k)$	f_k
0	3	3.481757957246973
1	7	7.905987449877890
2	11	11.931070097690015
3	15	15.495131876084549
4	19	18.681441353019998
5	23	22.984820207108194
\vdots	\vdots	\vdots

Aproksimacijska funkcija je pravac

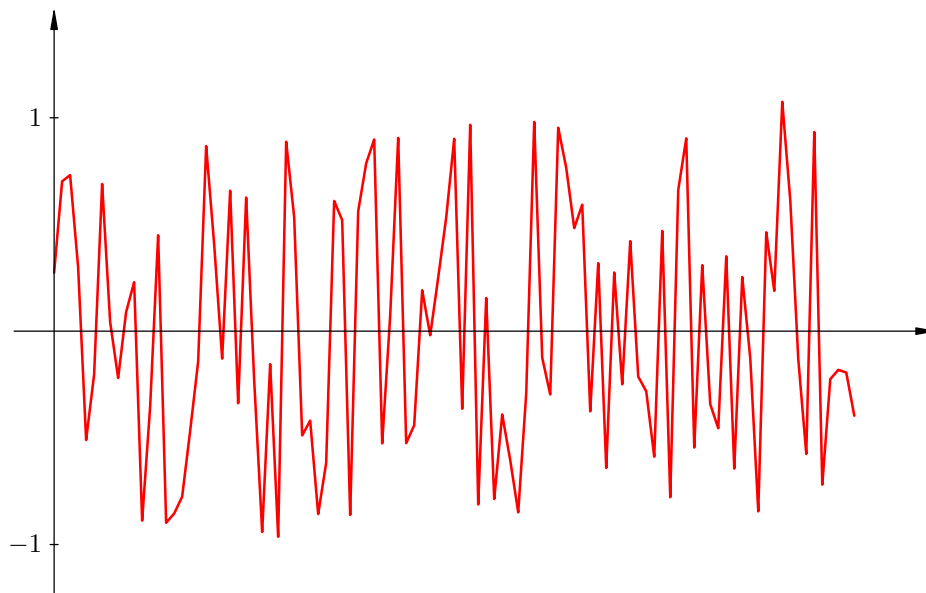
$$\varphi(x) = ax + b.$$

Kad se metodom najmanjih kvadrata izračunaju parametri, oni su $a = 3.99598$, $b = 3.20791$. Pogledajmo što su aproksimacije vrijednosti f_k za prvih nekoliko podataka:

x_k	$y(x_k)$	$\varphi(x_k)$
0	3	3.207905163100534
1	7	7.203881519200112
2	11	11.199857875299690
3	15	15.195834231399269
4	19	19.191810587498847
5	23	23.187786943598425
\vdots	\vdots	\vdots

Uočite da su greške $\varphi(x_k)$ obzirom na $y(x_k)$ znatno manje nego greške f_k obzirom na $y(x_k)$.

Pogledajmo kako se ponaša greška $f_k - \varphi(x_k)$.



Greška pokazuje ponašanje slučajne (uniformne) funkcije između -1 i 1 , pa smo metodom najmanjih kvadrata uklonili slučajnu grešku.