

1. Εισαγωγή

Ο σκοπός της χρήσης των αριθμητικών μεθόδων είναι η εύρεση λύσης σε προβλήματα που δεν έχουν αναλυτική λύση. Τέτοια προβλήματα παρουσιάζονται σε όλους τους κλάδους της επιστήμης του μηχανικού και αφορούν αλγεβρικές εξισώσεις συνήθεις διαφορικές εξισώσεις αλλά κυρίως διαφορικές εξισώσεις με μερικές παραγώγους. Οι αριθμητικές μέθοδοι δεν αποσκοπούν στην εύρεση της ακριβούς λύσης μιας διαφορετικής εξίσωσης ή της τιμής ενός ολοκληρώματος το οποίο δεν μπορούμε να επιλύσουμε αναλυτικά. Αντ' αυτού προσπαθούν να προσεγγίσουν την "ακριβή" λύση με κάποια προκαθορισμένα σφάλματα. Στις περισσότερες εφαρμογές η πληροφορία που παρέχεται δεν είναι ακριβής, π.χ. το μέτρο ελαστικότητας δεν έχει στην πραγματικότητα την τιμή που βρίσκουμε από τους πίνακες ούτε η τιμή του ιξώδους πραγματικών ρευστών είναι ακριβώς οι τιμές που έχουμε από ιδεατές μετρήσεις. Συνεπώς ο βαθμός προσέγγισης των αριθμητικών μεθόδων που χρησιμοποιούμε για την επίλυση πρακτικών προβλημάτων πρέπει να ανταποκρίνεται στον βαθμό της αβεβαιότητας των δεδομένων.

Η χρήση αριθμητικών μεθόδων, ή όπως αλλιώς ονομάζεται αριθμητική ανάλυση, είναι πιθανώς περισσότερο διαδεδομένη στην επίλυση εξισώσεων με μερικές παραγώγους. Οι εξισώσεις αυτές καταστρώθηκαν προ πολλού και είναι γενικά αποδεκτό ότι διέπουν πολλά από τα φαινόμενα που σχετίζονται άμεσα με τα αντικείμενα μελέτης των μηχανικών. Οι εξισώσεις ελαστικότητας διέπουν την παραμόρφωση των στερεών υπό την επήρεια επιβεβλημένων φορτίων, οι εξισώσεις Navier–Stokes διέπουν την κίνηση των ρευστών, ενώ οι εξισώσεις του Maxwell για το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο διέπουν την μετάδοση των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων, για να αναφέρουμε μόνο λίγα παραδείγματα. Οι εξισώσεις αυτές είναι όμως περίπλοκες και πολλές φορές μη-γραμμικές και η αναλυτική τους επίλυση είναι δυνατή μόνο σε πολύ απλές περιπτώσεις με μικρό πρακτικό ενδιαφέρον. Στην προσπάθεια αντιμετώπισης πρακτικών προβλημάτων επινοήθηκαν προσεγγιστικές τεχνικές λύσεις αυτών των εξισώσεων με αριθμητικές μεθόδους ακόμη από την εποχή του Isaac Newton (1643-1727). Η πραγματικά μεγάλη ανάπτυξη της αριθμητικής ανάλυσης και υπολογιστικής μηχανικής επιτελέστηκε με την το θεωρητικό υπόβαθρο που έθεσε αρχικά ο D. Hilbert, και που μετέπειτα εφήρμοσαν και ανέπτυξαν άλλοι όπως οι von Neumann, και P. Lax. Τελικά όμως άνθηση των κλάδων της αριθμητικής ανάλυσης και των εφαρμογών αυτής επιτελέστηκε με την εισαγωγή του ηλεκτρονικού υπολογιστή και την την συνεχή ανάπτυξη της επιστήμης των υπολογιστών που κατέστησε δυνατή την τεράστια αύξηση της υπολογιστικής ισχύος.



David Hilbert (1862 – 1943) είναι ένας από τους μαθηματικούς που επηρέασαν την μαθηματική σκέψη και ανάπτυξη στον 20^ο αιώνα με τις νέες ιδέες και μεθόδους που εισήγαγε. Μεταξύ αυτών εξέχουσα θέση κατέχει η γεωμετρική ερμηνεία των συναρτησιακών χώρων που οδήγησε στη εισαγωγή του χώρου Hilbert που αποτελεί θεμελιώδη έννοια στην συναρτησιακή ανάλυση. Ο Hilbert και οι συνεργάτες του στην σχολή των μαθηματικών του Πανεπιστημίου του Göttingen συνέβαλαν σημαντικά στην μαθηματική θεμελίωση της κβαντομηχανικής, της γενικής θεωρίας της σχετικότητας, και της μοντέρνας μαθηματικής λογικής. Το 1900 ο Hilbert παρουσίασε άλυτα προβλήματα των μαθηματικών που καθόρισαν την μαθηματική σκέψη στον 20^ο αιώνα. Ένα από αυτά που αφορούσε την θεωρία της απόδειξης και λύθηκε από ένα άλλο σημαντικό μαθηματικό και συνεργάτη του Hilbert τον Kurt Gödel.

Στην δεκαετία του 1970 παρουσιάστηκαν οι πρώτοι υπολογιστές που μπορούσαν να διαπραγματευτούν την αριθμητική λύση των προβλημάτων με πρακτικό ενδιαφέρον σε μετάδοση θερμότητας, παραμόρφωσης υλικών και κατασκευών αλλά και στην μηχανική των ρευστών. Σήμερα οι υπολογιστές είναι εξαιρετικά διαδεδομένοι και η διαθέσιμη υπολογιστική ισχύς είναι φθηνή και πολύ μεγαλύτερη από αυτήν που υπήρχε τις δεκαετίες του 1980 και 1990. Σαν αποτέλεσμα, είναι δυνατόν να επιλυθούν αριθμητικά προβλήματα πολύ μεγαλύτερου μεγέθους με μεγαλύτερη ακρίβεια στον βαθμό που πολλές διατάξεις πειραματικών μετρήσεων και δοκιμών κατέστησαν απαρχαιωμένες. Η ανάπτυξη της επιστήμης των υπολογιστών είναι διαρκής και η αύξηση της υπολογιστικής ταχύτητας είναι σχεδόν εκθετική αναμένεται λοιπόν ότι στο εγγύς μέλλον οι αριθμητικές μέθοδοι θα συνεχίσουν να έχουν ακόμη μεγαλύτερο αντίκτυπο στον σχεδιασμό και γρήγορα θα αποτελέσουν αναπόσπαστο κομμάτι της παραγωγικής διαδικασίας.

Τα περισσότερα προβλήματα που αντιμετωπίζουμε με αριθμητικές μεθόδους, δίνεται συνήθως κάποια πληροφορία για μια συνάρτηση $f(x)$ ή $f(\bar{x}, t) = f(x, y, z, t)$ στην γενική περίπτωση χρονομεταβλητού προβλήματος στις τρεις διαστάσεις. Η πληροφορία αυτή πρέπει να έχει τέτοια μορφή ώστε να μπορεί να εκφρασθεί αριθμητικά. Συνεπώς η συνάρτηση $f(x)$ ή $f(\bar{x}, t)$ πρέπει να είναι συνεχής στο πεδίο ορισμού της ή στην περιοχή όπου ενδιαφερόμαστε για την αριθμητική επίλυση του προβλήματος. Πράγματι οι περισσότερες μεταβλητές που εκφράζουν φυσικές ποσότητες όπως η θερμοκρασία, η κατανομή τάσης σε στερεό ε υπό την επίρεια φορτίων, ή η ταχύτητα ροής και η κατανομή πίεσης ασυμπίεστου ρευστού είναι συνεχείς συναρτήσεις των χωρικών

μεταβλητών και του χρόνου ταυτόχρονα. Υπάρχουν όμως και περιπτώσεις όπου οι μεταβλητές αυτές δεν είναι συνεχείς συναρτήσεις όπως παραδείγματος χάριν είναι η πίεση, θερμοκρασία, πυκνότητα και ταχύτητα συμπιεστού ρευστού σε μεγάλες ταχύτητες όπου υπάρχουν ωστικά κύματα. Στην τελευταία περίπτωση απαιτείται ειδική να εφαρμόσουμε διαδικασία αριθμητικής επίλυσης που αποτελεί αντικείμενο ειδικών κεφαλαίων σε υπολογιστικές μεθόδους και δεν θα μας απασχολήσουν προς το παρόν.

Δεδομένης της αρχικής πληροφορίας για την συνάρτηση $f(\bar{x})$ που αντιστοιχεί σε κάποια μεταβλητής, π.χ. κατανομή θερμοκρασίας υπάρχουν φυσικοί νόμοι που διέπουν την συμπεριφοράς αυτής. Οι νόμοι αυτοί είναι συνήθως διαφορικές εξισώσεις απλές ή με μερικές παραγώγους, π.χ. η κατανομή θερμοκρασίας, T , σε ένα σώμα βρίσκεται από την λύση της εξίσωσης $\nabla^2 T = 0$ ή $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0$. Σε άλλες

περιπτώσεις από την κατανομή μιας φυσικής ποσότητας απαιτείται να υπολογίσουμε ολοκληρώματα, π.χ. για να βρούμε το κέντρο βάρους ή τις ροπές αδράνειας απαιτείται να υπολογίσουμε ολοκληρώματα της κατανομής της μάζας. Η πληροφορία που δίνεται σχετικά με την μεταβλητή πρέπει να έχει μορφή κατάλληλη για αριθμητικό υπολογισμό παραγώγων και ολοκληρωμάτων.

Ένας τρόπος καταχώρησης της αρχικής πληροφορίας είναι η δημιουργία πλέγματος υπολογισμού στους κόμβους του οποίου ορίζεται η συνάρτηση $f(\bar{x})$. Η παραπάνω διαδικασία είναι η βάση της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών την οποία θα διαπραγματευτούμε με μεγάλη λεπτομέρεια. Μια άλλη τεχνική που έχει γενικότερη εφαρμογή είναι η ακόλουθη. Καθορίζουμε αρχικά ένα κατάλληλο σύνολο $n+1$ συναρτήσεων βάσεις ή συναρτήσεων συντεταγμένων $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$. Κατόπιν βάσει μιας καθορισμένης διαδικασίας εκφράζουμε την αρχική πληροφορία για την συνάρτηση $f(x)$ σε σχέση με τις νέες συντεταγμένες $\varphi_0(x) \dots \varphi_n(x)$ π.χ., ως γραμμικό συνδυασμό αυτών. Τελικά εφαρμόζουμε μια μέθοδο που θα ελαχιστοποιήσει το σφάλμα της προσέγγισης που κάναμε στο δεύτερο βήμα. Ο δεύτερος τρόπος προσέγγισης μιας ποσότητας με συναρτήσεις βάσης είναι ουσιαστικά η ιδέα των πεπερασμένων στοιχείων και μεθόδων αριθμητικής ολοκλήρωσης που θα διαπραγματευτούμε στις αριθμητικές μεθόδους.

Οι συναρτήσεις βάσεις που θα επιλεχθούν για την προσέγγιση μιας ποσότητας πρέπει να είναι απλές και να διευκολύνουν τους αριθμητικούς υπολογισμούς. Τα αλγεβρικά πολυώνυμα είναι μια ιδιαίτερα καλή επιλογή επειδή οι παραγωγοί τους και τα ολοκληρώματά τους είναι

επίσης πολυώνυμα, π.χ. ένα σύνολο $(n+1)$ συναρτήσεων βάσης είναι $1, x, x^2, \dots, x^n$. Αυτή η συνάρτηση βάσης εκφράζει ως γνωστό με ικανοποιητικά ακρίβεια την συνάρτηση $f(x) = e^{\pm x} = 1x + \frac{1}{2!}x^2 \pm \frac{1}{3}x^3 + \dots$ και όταν $|x| \leq 1$ μόνο οι λίγοι από τους πρώτους όρους του αναπτύγματος είναι αρκετοί για να μας δώσουν την τιμή $e^{\pm x}$ με ικανοποιητική προσέγγιση. Ένα από τα βασικά κριτήρια εκλογής των συναρτήσεων βάσης είναι να μπορούν να εκφράσουν με ικανοποιητική ακρίβεια την μεταβλητή με μικρό πλήθος αυτών n ενώ όταν ο αριθμός τους γίνει αρκετά μεγάλος να βελτιώνεται συνεχώς το σφάλμα προσέγγισης. Η πολυωνυμική προσέγγιση συνεχών μεταβλητών είναι ένα από τα θέματα που επίσης θα πραγματευτούμε στα επόμενα κεφάλαια.

Το βασικό μειονέκτημα των αριθμητικών μεθόδων έναντι των αναλυτικών είναι όπως φαίνεται και από παραπάνω το σφάλμα που προκύπτει από την διαδικασία προσέγγισης και από την διαδικασία αριθμητικής επίλυσης που εκτός των άλλων περιέχει και σφάλμα στρογγυλοποίησης. Το σφάλμα στρογγυλοποίησης (round-off error) είναι αναπόφευκτο σε κάθε αριθμητικό υπολογισμό που εκτελείται στον υπολογιστή διότι μόνο ένας καθορισμένος αριθμός σημαντικών ψηφίων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να αναπαραστήσει κάποιον αριθμό. Το σφάλμα στρογγυλοποίησης μειώνεται όταν χρησιμοποιήσουμε υπολογισμούς διπλής ακρίβειας (με κόστος την αύξηση της απαιτούμενης μνήμης και μείωση της ταχύτητας υπολογισμών). Το σφάλμα στρογγυλοποίησης πάντα παραμένει και η συμπεριφορά του είναι τυχαία όπως ο λευκός θόρυβος. Ένας άλλο συστατικό του σφάλματος υπολογισμών είναι το σφάλμα αποκοπής που προκύπτει από την προσεγγιστική διαδικασία. Παρακάτω θα περιγραφεί το σφάλμα αποκοπής χρησιμοποιώντας σαν παράδειγμα τις σειρές Taylor, που αποτελούν το βασικό θεωρητικό υπόβαθρο των μεθόδων πεπερασμένων διαφορών. Μια συνεχής συνάρτηση $f(x)$ με n συνεχείς παραγώγους στο διάστημα (α, x) μπορεί να αναπαρασταθεί με μια πεπερασμένη σειρά Taylor με n όρους της μορφής

$$f(x) = f(\alpha) + \frac{f'(\alpha)}{1!}(x-\alpha) + \frac{f''(\alpha)}{2!}(x-\alpha)^2 + \dots$$

$$\dots + \frac{f^{(n-1)}(\alpha)}{(n+1)!}(x-\alpha)^n + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}(x-\alpha)^n, \quad \alpha < \xi < x$$

Παραδείγματος χάριν η προσέγγιση της συνάρτησης e^{-x} με τρεις όρους είναι :

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + E_T$$

Όπου ο όρος $E_T = \frac{1}{24} e^{-\xi} x^4$, $0 < \xi < x$ είναι το σφάλμα αποκοπής, το οποίο είναι μικρό όταν x είναι θετικό και μικρότερο της μονάδας. Η προσέγγιση λοιπόν είναι :

$$e^{-x} \approx 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6}$$

που όταν υπολογισθεί για την τιμή $x = -1/3$ δίνει μέγιστο σφάλμα $\frac{1}{24} e (-1/3)^4 \doteq 0.0005144$ δηλαδή μικρότερο από 5.2×10^{-4} και η τιμή του είναι

$$e^{-1/3} \approx 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{18} - \frac{1}{162} = \frac{1}{162} = 0.7160$$

Όπου η τιμή της διαίρεσης $1/116$ στρογγυλοποιήθηκε στα τέσσερα ψηφία και η διαφορά από την 'ακριβή' τιμή είναι $.71653131 - .7160 = 5.313 \times 10^{-4}$. Είναι φανερό από το παραπάνω παράδειγμα ότι η αριθμητική τιμή που βρίσκουμε από την προσέγγιση του e^{-x} για $x = 1/3$ είναι :

Ακριβής τιμή = προσέγγιση + σφάλμα

όπου το σφάλμα περιέχει το σφάλμα αποκοπής και το σφάλμα στρογγυλοποίησης εφ' όσον ακόμα και η τιμή $1/3$ στον υπολογιστή είναι $0.333\dots$ με συγκεκριμένο μόνο αριθμό ψηφίων.

Η αναπαράσταση των αριθμών στον ηλεκτρονικό υπολογιστή γίνεται σε δυαδική μορφή (binary form). Επειδή όμως η δεκαδική αναπαράσταση των αριθμών είναι πιο προσφιλής στους μηχανικούς θα χρησιμοποιηθεί στα παρακάτω παραδείγματα χωρίς αυτό να σημαίνει ότι χάνεται η γενικότητα παρουσίασης του θέματος σφάλματος στρογγυλοποίησης. Έστω λοιπόν ότι ο αριθμός $A \neq 0$ έχει την παρακάτω ακριβή αριθμητική αναπαράσταση στο δεκαδικό σύστημα.

$$A = \pm 10^q \times (0.d_1 d_2 \dots)$$

όπου q είναι ακέραιος αριθμός και d_1, d_2, \dots είναι ακέραια δεκαδικά ψηφία. Η δεκαδική αναπαράσταση του αριθμού A στον υπολογιστή με t ακέραια δεκαδικά ψηφία (t floating point domical representation) είναι :

$$fl(A) = \pm 10^q (\delta_1 \delta_2 \dots \delta_t)$$

όπου πάλι $\delta_1 \delta_2 \dots \delta_t$ είναι δεκαδικά ψηφία και ο αριθμός $(\delta_1 \delta_2 \dots \delta_t)$ ονομάζεται mantissa ενώ ο ακέραιος q είναι ο εκθέτης (exponent) του $fl(A)$. Συνήθως $-M \leq q \leq N$ όπου M, N είναι μεγάλοι ακέραιοι και ο αριθμός A δεν μπορεί να αναπαρασταθεί όταν ο εκθέτης q είναι πέραν αυτού του εύρους. Η στρογγυλοποίηση του αριθμού A μπορεί να γίνει με δυο τρόπους.

a) $\delta_j = d_j \quad j = 1, 2, \dots, t$

b) $\delta_1 \delta_2 \dots \delta_t = [d_1 d_2 \dots d_t (d_{t+1} + 0.5)]$

όπου η αγκύλη σημαίνει ακέραιο μέρος.

Το σφάλμα στρογγυλοποίησης σε κάθε περίπτωση είναι

$$|A - fl(A)| \leq 5|A|10^{-t} \begin{cases} (b) & p = 1 \\ (a) & p = 2 \end{cases}$$

Σε σχέση με την παραπάνω παρουσίαση της αναπαράστασης των αριθμών είναι χρήσιμο να ορίσουμε πότε ένα υπολογιστικό πρόβλημα είναι καλώς ορισμένο (well posed). Η έννοια του καλώς ορισμένου προβλήματος θα μας απασχολήσει σε περισσότερη λεπτομέρεια στην αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Όσον αφορά όμως συνήθη υπολογιστικά προβλήματα ο καθορισμός της έννοιας των καλών ορισμένων υπολογισμών απαιτεί τον ορισμό του υπολογιστικού προβλήματος που ουσιαστικά σημαίνει την χρήση κάποιου αλγορίθμου. Ο αλγόριθμος είναι ένα σύνολο κανόνων που καθορίζουν την σειρά και το είδος των αριθμητικών διαδικασιών (συμπεριλαμβανομένης και της στρογγυλοποίησης) που εκφράζονται στα συγκεκριμένα δεδομένα.

Ένα υπολογιστικό πρόβλημα μπορεί να έχει σαν τελικό στόχο τον προσδιορισμό των ριζών μια εξίσωσης ή την αριθμητική επίλυση μιας διαφορικής. Σε κάθε περίπτωση όμως χρησιμοποιεί ένα συγκεκριμένο αριθμό δεδομένων που έστω ότι είναι οι ποσότητες A_1, A_2, \dots, A_m που συνιστούν ένα διάνυσμα m διαστάσεων \vec{A} . Οι ποσότητες που θέλουμε να υπολογίσουμε x_1, x_2, \dots, x_n επίσης συνιστούν ένα διάνυσμα n διαστάσεων που συνδέεται με τα δεδομένα μέσω της σχέσης

$$\vec{x} = f(\vec{A})$$

Το υπολογιστικό πρόβλημα είναι καλώς ορισμένο όταν πληρεί τις παρακάτω τρεις προϋποθέσεις.

- 1) Η λύση \bar{x} πρέπει να υπάρχει για τα δεδομένα \bar{A} (existence)
- 2) Ο αριθμητικός υπολογισμός έχει ένα και μοναδικό αποτέλεσμα (uniqueness).
- 3) Το αποτέλεσμα του αριθμητικού υπολογισμού πρέπει να εξαρτάται από τα δεδομένα με ένα συνεχή τρόπο.

Η τελευταία απαίτηση σημαίνει ότι μικρές μεταβολές στα δεδομένα \bar{A} πρέπει να προκαλούν μικρές μεταβολές στο αποτέλεσμα \bar{x} , δηλαδή

$$\bar{x} + \delta\bar{x} = f(\bar{A} + \delta\bar{A})$$

Όταν δεν υπάρχει σταθερά M τέτοια ώστε για κάθε $\delta\bar{A}$ ισχύει :

$$\|\delta\bar{x}\| \leq M \|\delta\bar{A}\|$$

Τότε ο υπολογισμός εξαρτάται από τα δεδομένα κατά τρόπο συνέχειας Lipschitz (Lipschitz continuously).

Ένα υπολογιστικό πρόβλημα είναι καλώς ορισμένο όταν οι παραπάνω τρεις συνθήκες ισχύουν και η σταθερά M που εξαρτάται γενικά από το διάνυσμα δεδομένων και μια σταθερά $n > 0$ που καθορίζεται από τον αλγόριθμο δεν είναι μεγάλη και όλες οι μεταβολές $\delta\bar{A}$ είναι τέτοιες ώστε $\|\delta\bar{A}\| < n$. Συνεπώς το υπολογιστικό πρόβλημα μπορεί να είναι καλώς ορισμένο για συγκεκριμένα σύνολα δεδομένων \bar{A} αλλά όχι για όλα.

Έστω τώρα ότι $\bar{x} = g(\bar{A})$ είναι η μοναδική λύση του υπολογιστικού προβλήματος $p(\bar{A})$ και εφ' όσον το πρόβλημα είναι καλώς ορισμένο

$$\|g(\bar{A} + \delta\bar{A}) - g(\bar{A})\| \leq N \|\delta\bar{A}\|$$

Ο αλγόριθμος επίλυσης συγκλίνει όταν υπάρχει μια σταθερά ε (που μπορεί να εξαρτάται από τα σφάλματα στρογγυλοποίησης), τέτοια ώστε για κάθε μικρό $\varepsilon > 0$ ισχύει :

$$\|f(\bar{A} + \delta\bar{A}) - g(\bar{A} + \delta\bar{A})\| \leq \varepsilon$$

δηλαδή

$$\begin{aligned} \|f(\bar{A}) - f(\bar{A} + \delta\bar{A})\| &\leq \|f(\bar{A}) - g(\bar{A})\| + \|g(\bar{A}) - g(\bar{A} + \delta\bar{A})\| \\ &\quad + \|g(\bar{A} + \delta\bar{A}) - f(\bar{A} + \delta\bar{A})\| \leq \varepsilon + M \|\delta\bar{A}\| + \varepsilon \end{aligned}$$

που σημαίνει ότι όταν $p(\bar{A})$ είναι ένα καλώς ορισμένο πρόβλημα η αναγκαία συνθήκη σύγκλισης του αλγόριθμου είναι η ύπαρξη ενός καλώς ορισμένου υπολογισμού.

Αντίστροφα όταν $p(\bar{A})$ είναι ένα μη καλώς ορισμένο πρόβλημα τότε η αναγκαία συνθήκη ύπαρξης ενός ακριβούς αλγόριθμου είναι η συνέπεια ενός μη καλώς ορισμένου υπολογισμού.

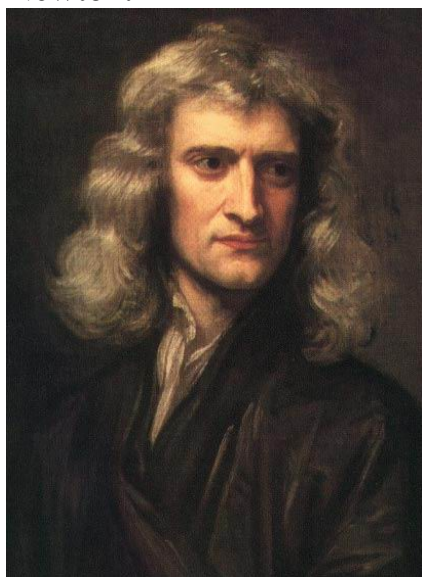
Τα σφάλματα στρογγυλοποίησης δε θα μας απασχολήσουν είναι όμως σημαντικό να μπορούμε να εκτιμήσουμε το σφάλμα αποκοπής ή το σφάλμα προσέγγισης και συχνά θα αναφερθούμε με περισσότερη λεπτομέρεια σ' αυτό στα επόμενα κεφάλαια και ιδιαίτερα στην αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων.

2. Αριθμητική Παρεμβολή

Η παρεμβολή τιμών από δεδομένα υπό μορφή πίνακα είναι αναγκαία σε πολλές περιπτώσεις. Η πιο απλή μέθοδος παρεμβολής είναι η γραμμική παρεμβολή. Η παρεμβολή δεν περιορίζεται όμως σε δεδομένα από πίνακες αλλά απαιτείται πολύ συχνά στην αριθμητική επεξεργασία δεδομένων και σε πολλές εφαρμογές αριθμητικών μεθόδων όπου μάλιστα απαιτείται μεγαλύτερη αξιοπιστία από αυτής που μπορεί να παρέχει η απλή γραμμική παρεμβολή. Μεγαλύτερη αξιοπιστία παρεμβολής από αυτήν που παρέχει η γραμμική παρεμβολή, που χρησιμοποιεί μόνο δυο διαδοχικές τιμές μιας μεταβλητής, μπορεί να επιτευχθεί όταν χρησιμοποιηθεί επιπρόσθετη πληροφορία. Η επιπρόσθετη πληροφορία για ακριβέστερη παρεμβολή μπορεί να προέλθει από την χρήση περισσότερων τιμών από τις γειτονικές ή των παραγώγων της μεταβλητής. Όταν οι τιμές της μεταβλητής είναι γνωστές σε ένα διάστημα που είναι ίσοκατανομημένο ακριβέστερη μεταβολή μπορεί να γίνει με πολλούς τρόπους, παραδείγματος χάριν με την χρήση πολυωνυμικών προσεγγίσεων ή πεπερασμένων διαφορών. Στην γενική περίπτωση που το διάστημα ορισμού τιμών δεν είναι ίσοκατανομημένο η παρεμβολή μπορεί να γίνει με την μέθοδο των διαιρεμένων διαφορών (divided differences) που θα παρουσιάσουμε σ' αυτό το κεφάλαιο αρχίζοντας με την γραμμική παρεμβολή που είναι ειδική περίπτωση διαιρεμένων διαφορών. Άλλες μέθοδοι παρεμβολής θα παρουσιασθούν στα επόμενα κεφάλαια.

2.1 Γραμμική παρεμβολή

Η παρεμβολή με διαιρεμένες διαφορές αναπτύχθηκε από τον Newton.



Sir **Isaac Newton** (1642–1727) είναι ίσως ο πιο γνωστός Φυσικός Μαθηματικός και αστρονόμος. Το 1687 δημοσίευσε το έργο του “*Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica*,” που θεωρείται το σπουδαιότερο δημοσίευμα στην ιστορία της επιστήμης. Στα *Principia* περιγράφει τους νόμους κίνησης, την βαρύτητα, και βάζει τα θεμέλια για την κλασική μηχανική που αποτέλεσε την βάση της σύγχρονης επιστήμης των μηχανικών. Η ανακάλυψη του διαφορικού λογισμού επίσης αποδίδεται στον Newton μαζί με τον Gottfried Leibniz. Διετύπωσε την αρχή διατήρησης της γραμμικής και γωνιακής ορμής. Στα μαθηματικά διετύπωσε το δυνωμικό θεώρημα και την μέθοδο Newton για την εύρεση ριζών εξισώσεων.

Η γραμμική παρεμβολή μιας συνάρτησης $f(x)$ στο διάστημα (x_0, x_1) είναι καλή προσέγγιση όταν ο λόγος

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \quad (2.1.1)$$

είναι ανεξάρτητος από την εκλογή των x_0 και x_1 το οποίο είναι αληθές όταν η συνάρτηση $f(x)$ έχει γραμμική μεταβολή στο διάστημα παρεμβολής. Ο λόγος της Εξ. (2.1.1) ονομάζεται πρώτη διαιρεμένη διαφορά ή διαιρεμένη διαφορά πρώτης τάξης της συναρτήσεως $f(x)$ σχετικά με τα σημεία x_0 και x_1 . Η διαιρεμένη διαφορά πρώτης τάξης συμβολίζεται ως $f[x_0, x_1]$, και είναι:

$$f[x_0, x_1] \equiv \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \quad (2.1.2)$$

προφανώς $f[x_0, x_1] = f[x_1, x_0]$ δηλαδή η διαιρεμένη διαφορά πρώτης τάξης είναι συμμετρικός τελεστής. Η γραμμική προσέγγιση στο διάστημα x_0, x_1 μπορεί να εκφρασθεί ως :

$$f[x_0, x] \approx f[x_0, x_1] \quad (2.1.3)$$

και η γραμμική παρεμβολή είναι :

$$f(x) \approx f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] \quad (2.1.4)$$

ή

$$f(x) \approx f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} [f(x_1) - f(x_0)]$$

ή

$$f(x) \approx \frac{1}{x_1 - x_0} [(x_1 - x) f(x_0) - (x_0 - x) f(x_1)]$$

Η παραπάνω σχέση μπορεί ακόμη να γραφεί με την χρήση της ορίζουσας πινάκων που είναι πιο βολικοί στους υπολογισμούς ως :

$$f(x) \approx \frac{1}{x_1 - x_0} \begin{vmatrix} f(x_0) & (x_0 - x) \\ f(x_1) & (x_1 - x) \end{vmatrix} \quad (2.1.5)$$

Η διαιρεμένη διαφορά μηδενικής τάξης συμβολίζεται ως :

$$f[x_0] = f(x_0) \quad (2.1.6)$$

και είναι η τιμή της συνάρτησης σε σημείο x_0 ή το πολυώνυμο $p_0(x)$ μηδενικού βαθμού που προσεγγίζει την συνάρτηση στο σημείο x_0 . Αντίστοιχα το πολυώνυμο πρώτου βαθμού (γραμμική παρεμβολή) που προσεγγίζει την συνάρτηση στο σημείο x και χρησιμοποιεί διακριτές τιμές δεδομένων $f(x_0), f(x_1)$ στα σημεία x_0 και x_1 συμβολίζεται ως $y_{0,1}(x)$ ή $p_{0,1}(x)$ οπότε :

$$f(x) \approx p_{0,1}(x) \equiv f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] \quad (2.1.7)$$

και

$$p_{0,1}(x) = \frac{1}{x_1 - x_0} \begin{vmatrix} y_0(x) & (x_0 - x) \\ y_1(x) & (x_1 - x) \end{vmatrix} \quad (2.1.8)$$

2.2 Παρεμβολή ανώτερης τάξης

Οι γραμμικές προσεγγίσεις $f(x) \approx y_{0,1}(x)$ είναι ακριβής για όλες τις τιμές x όταν η συνάρτηση $f(x)$ είναι γραμμική δηλαδή $f(x) = A_0 + A_1x$. Όταν όμως η συνάρτηση $f(x)$ είναι ένα πολυώνυμο δεύτερου βαθμού τότε η κλίση της συνάρτησης διαιρεμένων διαφορών $f[x_1, x]$ είναι γραμμική συνάρτηση του x δηλαδή ο λόγος

$$\frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x]}{x_2 - x_0}$$

είναι σταθερός. Ο παραπάνω λόγος ονομάζεται διαιρεμένη διαφορά δεύτερης τάξης και συμβολίζεται ως $f[x_0, x_1, x_2]$

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} \quad (2.2.1)$$

και η αντίστοιχη προσέγγιση με διαιρεμένες διαφορές δεύτερης τάξης είναι :

$$f(x) \approx f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] \quad (2.2.2)$$

Προφανώς, το σφάλμα προσέγγισης $E(x)$ το οποίο προκύπτει όταν προσεγγίζουμε ένα πολυώνυμο δεύτερου βαθμού με μια γραμμική συνάρτηση, ή πολυώνυμο παρεμβολής πρώτου βαθμού $y_{0,1}(x)$ είναι :

$$E(x) \equiv f(x) - y_{0,1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] \quad (2.2.3)$$

Ο ορισμός των διαιρεμένων διαφορών k τάξης δίνεται από την παρακάτω επαναληπτική σχέση :

$$\begin{aligned} f[x_0] &= f(x_0) \\ f[x_0, x_1] &= \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} \\ f[x_0, x_1, x_2] &= \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

.....

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f[x_1, \dots, x_k] - f[x_0, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}$$

Δηλαδή η διαιρεμένη διαφορά k τάξης είναι ένας γραμμικός συνδυασμός $k+1$ τιμών $f(x_0), \dots, f(x_k)$ με συντελεστές που εξαρτώνται από την υποδιαίρεση του διαστήματος $[x_0, x_k]$ σε k υποδιαστήματα. Πρέπει να σημειωθεί ότι ο υπολογισμός της διαιρεμένης διαφοράς k τάξης απαιτεί τον υπολογισμό όλων των διαιρεμένων διαφορών τάξης $\leq k-1$

Η διαιρεμένες διαφορές είναι ουσιαστικά διακριτές τιμές της παραγώγου μιας συνάρτησης. Πράγματι από τον ορισμό των διαιρεμένων διαφορών πρώτης τάξης για $x_0 = x$ και $x_1 = x + \varepsilon$ έχουμε

$$f[x + \varepsilon, x] = \frac{f(x + \varepsilon) - f(x)}{\varepsilon} \quad (2.2.5)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f[x + \varepsilon, x] = f[x, x] = f'(x)$$

Η διαιρεμένη διαφορά πρώτης τάξης είναι συμμετρική, $f[x_0, x_1] = f[x_1, x_0]$. Η συμμετρία διατηρείται και για διαιρεμένες διαφορές ανώτερης τάξης π.χ.

$$\begin{aligned} f[x_0, x_1, x_2] &= \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{1}{x_2 - x_0} \left[\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \right] \\ &= \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)(x_2 - x_0)} + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \quad (2.2.6) \\ &= f[x_1, x_2, x_0] = f[x_2, x_0, x_1] \end{aligned}$$

Όταν η ακρίβεια γραμμικής παρεμβολής δεν είναι επαρκής, όπως π.χ. όταν η μεταβολή της συνάρτησης $f(x)$ είναι ένα πολυώνυμο δευτέρου ή ανώτερου βαθμού, τότε απαιτείται παρεμβολή με μεγαλύτερη τάξη ακρίβειας. Παρεμβολή δεύτερης τάξης ακρίβειας επιτυγχάνεται όταν η διαιρεμένη διαφορά πρώτης τάξης, $f[x_0, x]$, στο διάστημα $[x_0, x]$ είναι μια γραμμική συνάρτηση του x για σταθερό x_0 ή όταν η διαιρεμένη διαφορά δεύτερης τάξης $f[x, x_0, x_1]$ είναι σταθερή.

$$f[x, x_0, x_1] \approx f[x_2, x_0, x_1] \equiv f[x_0, x_1, x_2] = \text{const}$$

$$\text{ή} \quad (2.2.7)$$

$$\frac{f[x, x_0] - f[x_0, x_1]}{x - x_1} \approx f[x_0, x_1, x_2]$$

δηλαδή η παρεμβολή δεύτερης τάξης ακρίβειας είναι :

$$f(x) \approx p_{0,1,2}(x) \equiv f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] \quad (2.2.8)$$

Το σφάλμα προσέγγισης είναι :

$$E(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)f[x_0, x_1, x_2, x] \quad (2.2.9)$$

και όταν η συνάρτηση $f(x)$ είναι πολυώνυμο δευτέρου βαθμού, ή μικρότερου, το σφάλμα προσέγγισης είναι μηδενικό $E(x) \equiv 0$

Η διαδικασία εύρεσης διαιρεμένων διαφορών τάξης, k , απαιτεί την εύρεση όλων των διαιρεμένων διαφορών τάξης $k-1, k-2, \dots, 1$ από την σχέση ορισμού

$$f[x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+k}] = \frac{f[x_{j+1}, \dots, x_k] - f[x_j, \dots, x_{j+k-1}]}{x_{j+k} - x_j}$$

σε κάθε σημείο του πεδίου ορισμού των δεδομένων. Πρέπει να σημειωθεί ότι ο υπολογισμός διαιρεμένων διαφορών τάξης k είναι δυνατή μέχρι k σημεία πριν από το πέρας του πεδίου ορισμού.

Η διαδικασία εύρεσης διαιρεμένων διαφορών διευκολύνεται με την κατάστρωση του παρακάτω πίνακα.

		Πίνακας Διαιρεμένων Διαφορών				
	0^{th}	1^{st}	2^{nd}	3^{rd}	4^{th}	
x_0	$f[x_0]$					
		$f[x_0, x_1]$				
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$			
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$		
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$	
		$f[x_2, x_3]$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$		
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4]$			
		$f[x_3, x_4]$				
x_4	$f[x_4]$					

Η παρεμβολή δεύτερης τάξης της Εξ. (2.2.3) γενικεύεται σε παρεμβολή k τάξης ως ακολούθως :

$$f(x) \approx f[x_0] + (x-x_0)f[x_0, x_1] + (x-x_0)(x-x_1)f[x_0, x_1, x_2] + \dots + (x-x_0)\dots(x-x_{k-1})f[x_0, x_1, \dots, x_k] + E(x) \tag{2.2.10}$$

όπου το σφάλμα προσέγγισης είναι :

$$E(x) = (x-x_0)\dots(x-x_k)f[x_0, x_1, \dots, x_k, x] \tag{2.2.11}$$

Η παραπάνω σχέση προσέγγισης είναι γνωστή ως εξίσωση παρεμβολής του Newton με διαιρεμένες διαφορές. Στο δεξί μέλος της Εξ. (2.2.10)

έχουμε ένα πολυώνυμο βαθμού k που συμβολίζεται ως $p_{0,1,\dots,k}(x)$ και είναι ακριβώς η συνάρτηση $f(x)$ δεδομένου ότι $f(x)$ είναι μια πολυωνυμική συνάρτηση βαθμού k ή μικρότερου και παρεμβάλει ακριβώς την συνάρτηση $f(x)$ σε $k+1$ σημεία x_0, x_1, \dots, x_k ανεξάρτητα από την μορφή της συνάρτησης $f(x)$.

Αλγόριθμος Παρεμβολής Διαιρεμένων Διαφορών

Η παρεμβολή με διαιρεμένες διαφορές μπορεί να υλοποιηθεί στον υπολογιστή με τον παρακάτω αλγόριθμο ο οποίος είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθεί σε οποιαδήποτε γλώσσα προγραμματισμού C, C++, FORTRAN, MATLAB.

```
for j=0; to j=k
read table of x(j), f(j) data and store
end loop
```

```
for j=0; to j=k-1
compute 1st order divided difference
 $f[x_j, x_{j+1}] = (f[x_{j+1}] - f[x_j]) / (x_{j+1} - x_j)$ 
and store as dd_1(j)
end loop
```

```
for j=0; to j=k-2
compute 2nd order divided difference
 $f[x_j, x_{j+1}, x_{j+2}] = (f[x_{j+1}, x_{j+2}] - f[x_j, x_{j+1}]) / (x_{j+2} - x_j)$ 
and store as dd_2(j)
end loop
```

```
.....
for j=0; to j<k-N
compute Nth order divided difference ( $N \leq k$ )
 $f[x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+N}] = (f[x_{j+1}, \dots, x_{j+N}] - f[x_j, \dots, x_{j+N-1}]) / (x_k - x_0)$ 
and store as dd_N(j)
end loop
```

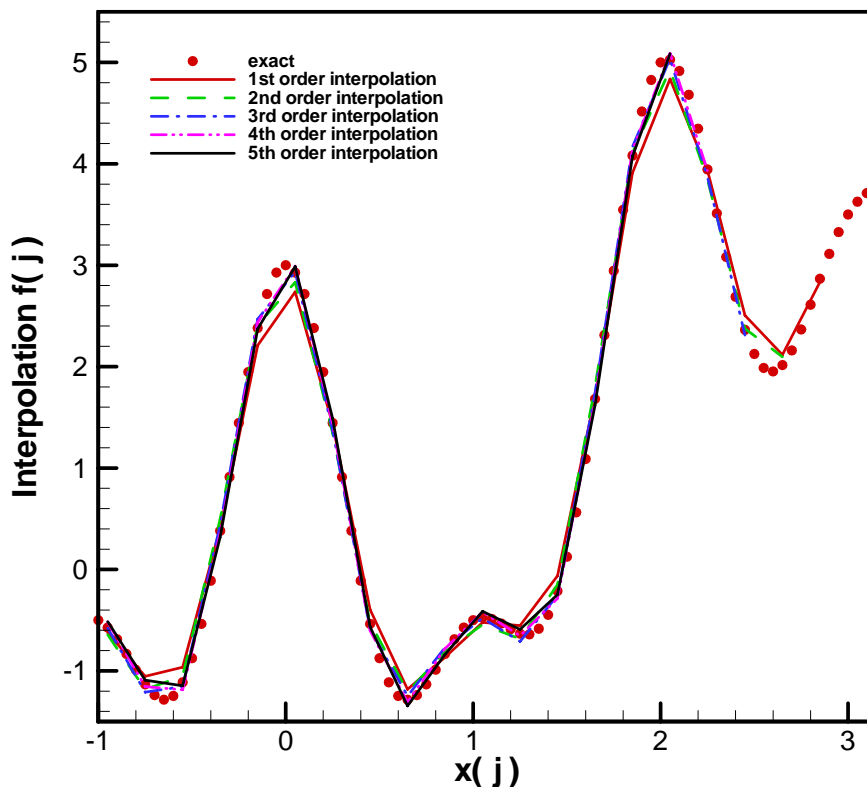
```
for j=0; to j<k-N
compute Nth order interpolation ( $N \leq k$ ) at the
point x
```

$$\begin{aligned}
f(x) \approx & f[x_0] + (x-x_0)f[x_0, x_1] \\
& + (x-x_0)(x-x_1)f[x_0, x_1, x_2] + \\
& \dots \\
& + (x-x_0)\dots(x-x_{N-1})f[x_0, x_1, \dots, x_N]
\end{aligned}$$

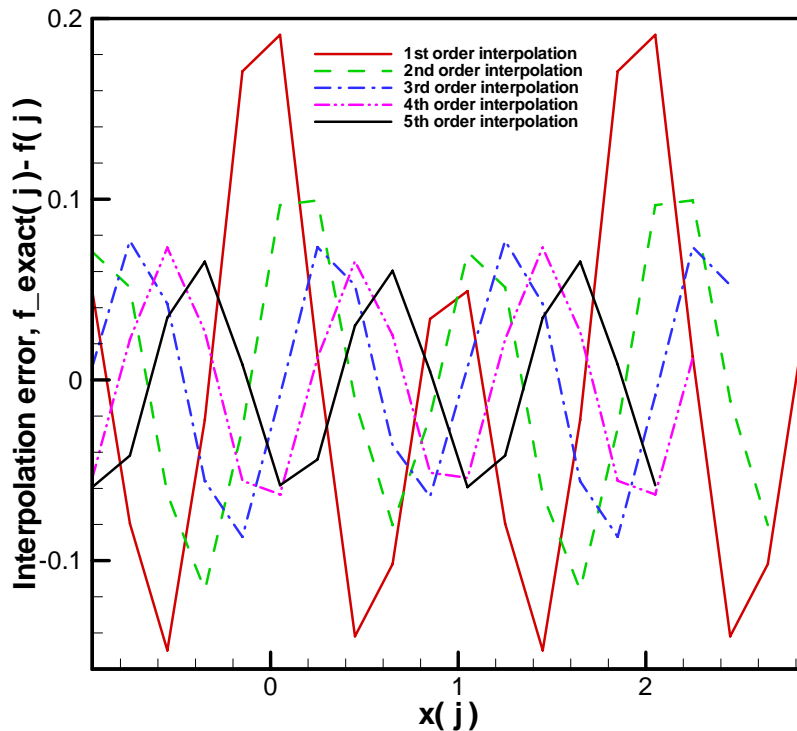
end loop

Η υλοποίηση του παραπάνω αλγορίθμου σε λογισμικό FORTRAN και C δίνεται στο Παράρτημα 1.

Η παρεμβολή 1^{ns} , 2^{ns} μέχρι και 5^{ns} τάξης της γνωστής αναλυτικής συνάρτησης $f(x) = 2\cos(\pi x) + \cos(2\pi x) + 0.5x^2$ φαίνεται στο Σχ. 2.1. Όπως αναμένεται ο σφάλμα παρεμβολής (δες Σχ. 2.2) ελαττώνεται όταν η τάξη παρεμβολής αυξάνεται ενώ 'σο αυξάνει η τάξη παρεμβολής απομακρυνόμαστε από το πέρασ του ορισμού του διαστήματος παρεμβολής.

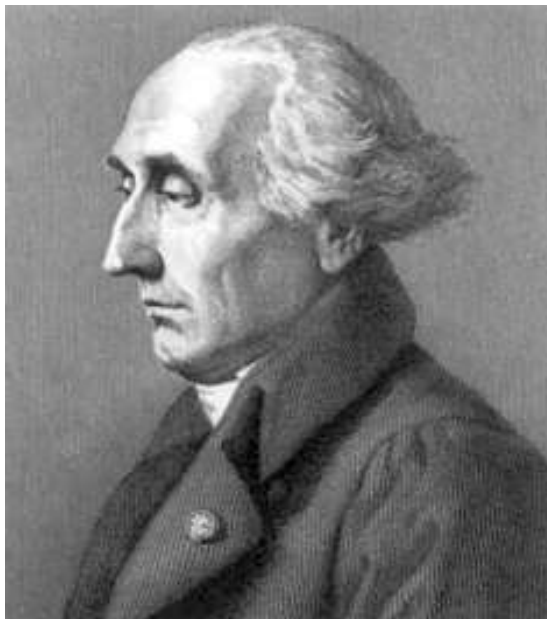


Σχήμα 2.1 Παρεμβολή της συνάρτησης $f(x) = 2\cos(\pi x) + \cos(2\pi x) + 0.5x^2$ με 1^{ns} μέχρι και 5^{ns} τάξης διαιρεμένες διαφορές.



Σχήμα 2.2 Σφάλμα (a posteriori error estimate) από την παρεμβολή της γνωστής συνάρτησης $f(x) = 2 \cos(\pi x) + \cos(2\pi x) + 0.5x^2$ με διαιρεμένες διαφορές 1^{ης} μέχρι και 5^{ης} τάξης.

2.3. Παρεμβολή Lagrange



Ο **Joseph Louis Lagrange** (1736–1813) είναι γνωστός για την συμβολή του στην αναλυτική μηχανική, την αστρονομία, την μαθηματική και αριθμητική ανάλυση, και την θεωρία αριθμών. Ο Lagrange υπήρξε καθηγητής στο École Polytechnique από την αρχή της ιδρύσεως του 1794. Έλαβε πολλές τιμητικές διακρίσεις κατά την διάρκεια της σταδιοδρομίας του όπως διευθυντής της Prussian Academy of Sciences (1766), κατόπιν συστάσεως των Euler και D'Alembert, και του τίτλου του Count of the Empire που του απένειμε ο Napoleon το 1808. Το πιο γνωστό του έργο είναι “Treatise on Analytical Mechanics” (Mécanique Analytique), Paris, 1888-1889.

Η παρεμβολή με διαιρεμένες διαφορές είναι ενδεδειγμένη για παρεμβολή πινακοποιημένων τιμών ή τιμών από υπολογισμούς. Σε πολλές περιπτώσεις όμως χρειαζόμαστε μια σχέση παρεμβολής ως προς την ανεξάρτητη μεταβλητή x . Η παρεμβολή Lagrange είναι μια τεχνική παρεμβολή με πολυώνυμο βαθμού k, p^k που παρεμβάλει ακριβώς την συνάρτηση $f(x)$ σε $k+1$ σημεία x_0, x_1, \dots, x_k . Το πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange $p^k = p_{0,1,\dots,k}(x)$ είναι βολικό για αριθμητική παραγωγή και ολοκλήρωση που απαιτείται στις μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων και έχει την μορφή.

$$p^k(x) = A_0 + A_1x + \dots + A_kx^k = \sum_{n=0}^k A_nx^n \quad (2.3.1)$$

όπου συντελεστές $A_n, n=0, \dots, k$ πρέπει να προσδιορισθούν με τέτοιο τρόπο ώστε $p^k(x_j) = f(x_j), j=0, 1, \dots, k$. Δηλαδή πρέπει :

$$\begin{aligned} A_0 + A_1x_0 + A_2x_0^2 + \dots + A_kx_0^k &= f(x_0) \\ A_0 + A_1x_1 + A_2x_1^2 + \dots + A_kx_1^k &= f(x_1) \\ \dots & \dots \\ A_0 + A_1x_k + A_2x_k^2 + \dots + A_kx_k^k &= f(x_k) \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Οι εξ. (2.3.1) και (2.3.2) γράφονται υπό μορφή μητρώων ως :

$$\begin{bmatrix} p^k & 1 & x & x^2 & \dots & x^k \\ f(x) & 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^k \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ f(x_k) & 1 & x_k & x_k^2 & \dots & x_k^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ A_0 \\ \dots \\ A_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.3.3)$$

ή

$$[M][1, A_0, \dots, A_k]^T = 0$$

και έχουν λύση όταν η ορίζουσα του τετραγωνικού μητρώου M είναι μηδέν. Το ανάστροφο (transpose) του μητρώου που προκύπτει όταν παραλείψουμε την πρώτη στήλη του μητρώου της Εξ. (2.3.3) είναι ένα τετραγωνικό μητρώο η ορίζουσα του οποίου ονομάζεται ορίζουσα van der Monde και είναι της μορφής

$$\prod_{1 \leq i < j \leq n} (x_j - x_i) = \det \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & \dots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & \dots & x_n^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \dots & \dots & x_n^{n-1} \end{bmatrix}$$

Θεωρούμε την ειδική περίπτωση που η αρχική συνάρτηση $f(x)$ είναι γραμμικός συνδυασμός των μονώνυμων $1, x, x^2, \dots, x^k$.

Το πολυώνυμο $p^k(x)$ μπορεί επίσης να γραφεί ως :

$$p^k(x) = l_0(x)f(x_0) + l_1(x)f(x_1) + \dots + l_k(x)f(x_k)$$

$$= \sum_{n=0}^k l_n(x)f(x_n)$$
(2.3.4)

όπου $l_0(x), \dots, l_k(x)$ είναι πολυώνυμα βαθμού k ή μικρότερου και προσδιορίζονται από τις συνθήκες:

$$l_0(x) + l_1(x) + \dots + l_k(x) = 1$$

$$x_0 l_0(x) + x_1 l_1(x) + \dots + x_k l_k(x) = x$$

.....

$$x_0^k l_0(x) + x_1^k l_1(x) + \dots + x_k^k l_k(x) = x^k$$
(2.3.5)

Ο προσδιορισμός του πολυώνυμου p^k από την Εξ. (2.3.3) ή από την Εξ. (2.3.5) απαιτεί μακροσκελείς υπολογισμούς. Επειδή όμως το πολυώνυμο p^k παρεμβάλει ακριβώς την συνάρτηση $f(x)$ στα σημεία $x_j, j=0, 1, \dots, k$ πρέπει να ισχύει $l_i(x_j) = 1$ και $l_i(x_j) = 0$ δηλαδή:

$$l_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$$
(2.3.6)

Τα σημεία παρεμβολής $x_j, j=0, 1, \dots, k$ είναι λοιπόν ρίζες των πολυωνύμων $l_i(x)$ που γράφονται ως :

$$l_i(x) = C_i [(x-x_0) \dots (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \dots (x-x_k)]$$
(2.3.7)

και πληρούν την συνθήκη $l_i(x_i) = 1$ όταν :

$$C_i = \frac{1}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_k)}$$
(2.3.8)

Οι συντελεστές C_i ονομάζονται συντελεστές Lagrange και τα πολυώνυμα παρεμβολής $l_i(x)$ είναι τα πολυώνυμα Lagrange που δίνονται από την σχέση :

$$l_i(x) = \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_k)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_k)} \quad (2.3.9)$$

Εισάγοντας τον συμβολισμό $\Pi(x)$ για το πολυώνυμο $k+1$ βαθμού υπό μορφή γινομένου

$$\Pi(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_k) \quad (2.3.10)$$

η τιμή της παραγώγου $\Pi'(x)$ του $\Pi(x)$ στο σημείο παρεμβολής x_i είναι :

$$\Pi'(x_i) = (x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_k) = \frac{1}{C_i} \quad (2.3.11)$$

Δηλαδή το πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange βαθμού k γράφεται ως :

$$P^k(x) = \sum_{n=0}^k \frac{\Pi(x)}{(x-x_n)\Pi'(x_n)} f(x_n) = \sum_{n=0}^k l_n(x) f(x_n) \quad (2.3.12)$$

όπου

$$l_i(x) = \frac{\Pi(x)}{(x-x_i)\Pi'(x_i)} \quad (2.3.13)$$

Οι συντελεστές Lagrange ικανοποιούν την ταυτότητα

$$\sum_{j=0}^n x_j^m l_j(x) = x^m, \quad m = 0, 1, \dots, n \quad (2.3.14)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι η σχέση παρεμβολής Lagrange είχε παρόμοια μορφή με την σχέση παρεμβολής διαιρεμένων διαφορών της Εξ. (2.2.2) και η συνάρτηση $f(x)$ γράφεται ως :

$$f(x) = \sum_{n=0}^k l_n(x) f(x_n) + E(x) \quad (2.3.15)$$

όπου :

$$E(x) = \Pi(x) f[x_0, x_1, \dots, x_k, x] = \Pi(x) \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} \quad (2.3.16)$$

Παράδειγμα

Αναζητούμε το πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange για την συνάρτηση $f(x)$ που ορίζεται υπό μορφή πίνακα ως

j	0	1	2	3
x_j	-1	0	1	2
$f(x_j)$	1	1	1	-5

Το πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange είναι ένα πολυώνυμο 3^{ου} βαθμού που ορίζεται ως

$$p^3(x) = \frac{(x-0)(x-1)(x-2)}{(-1-0)(-1-1)(-1-2)} \times 1 + \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(0+1)(0-1)(0-2)} \times 1$$

$$+ \frac{(x+1)(x-0)(x-2)}{(1+1)(1-0)(1-2)} \times 1 + \frac{(x+1)(x-0)(x-1)}{(2+1)(2-0)(2-1)} \times (-5)$$

ή

$$p^3(x) = \frac{1}{6} x(x-1)(x-2) + \frac{1}{2}(x-1)(x-1)(x-2)$$

$$- \frac{1}{2}(x+1)x(x-2) - \frac{5}{6}(x+1)x(x-1) = -x^3 + x + 1$$

Το πολυώνυμο παρεμβολής βρίσκεται όταν υπολογίσουμε τις διαιρεμένες διαφορές τρίτης τάξης με τον παρακάτω πίνακα διαιρεμένων διαφορών.

x_i	$f[x_i]$			
-1	1			
		\searrow	$f[x_i, x_{i+1}]$	
		0		
		\nearrow		\searrow
			$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$	
0	1		0	
		\searrow	\nearrow	\searrow
			$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}]$	
		0		-1
		\nearrow	\searrow	\nearrow
1	1		-3	
		\searrow	\nearrow	
		-6		
		\nearrow		
2	-5			

Το πολυώνυμο παρεμβολής είναι

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

Ο αλγόριθμος κατασκευής πολυωνύμου παρεμβολής Lagrange

specify the polynomial degree N

```
for j=0; to j=N
```

```
read table of x(j), f(j) data and store
```

```
end loop
```

```
\* compute the denominator product
```

```
\*  $(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_N)$  of the Lagrange
```

```
\* polynomial  $l_i(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_N)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_N)}$ 
```

```
for i=0; to i=N
```

```
denominator_prod = 1.0
```

```
for j=0; to j=N
```

```
if ( i=j) prod = 1.0
```

```
if ( i≠j) prod = x(i)-x(j)
```

```
denominator_prod = denominator_prod *prod
```

```
end loop j
```

```
end loop i
```

```
\* compute the nominator product
```

```
\*  $(X - x_0) \dots (X - x_{i-1})(X - x_{i+1}) \dots (X - x_N)$  of the Lagrange
```

```
\* polynomial
```

specify Kmax interpolation points X=**xx**

```
for i=0; to k=Kmax
```

```
define interpolation point xx
```

```
prod = 1.0
```

```
for i=0; to i=N+1
```

```
if ( i=j) prod = 1.0
```

```
if ( i≠j) prod = xx-x(j)
```

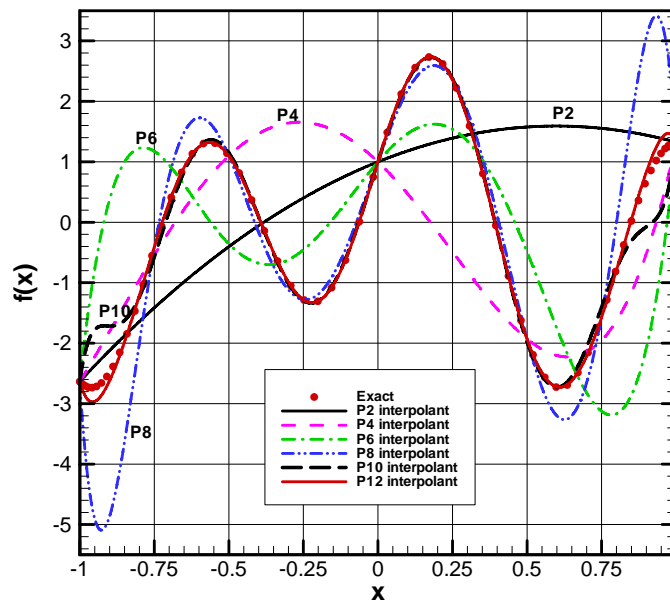
```
nominator_prod = nominator_prod *prod
```

```
end loop j
```

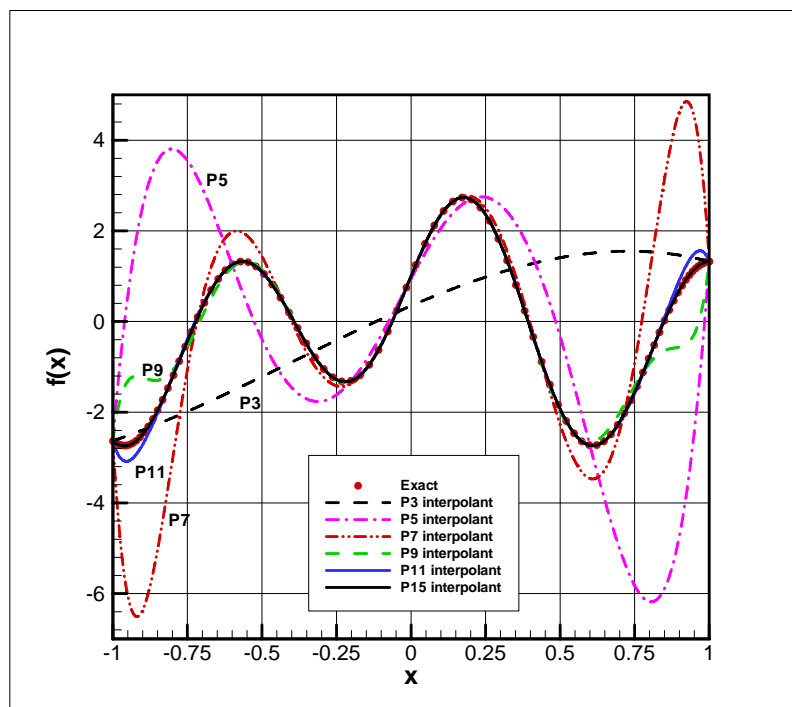
```
end loop k
```

Η υλοποίηση του παραπάνω αλγορίθμου σε λογισμικό FORTRAN και C δίνεται στο Παράρτημα 1.

Η παρεμβολή Lagrange $2^{\text{ης}}$, $3^{\text{ης}}$, ..., $15^{\text{ης}}$ τάξης της γνωστής συνάρτησης $f(x) = \cos(4x) + 2\sin(8x)$ φαίνεται στα Σχ. 2.3 και 2.4.



Σχήμα 2.3 Παρεμβολή της συνάρτησης $f(x) = \cos(4x) + 2\sin(8x)$ στο διάστημα $[-1, 1]$ με πολυώνυμο Lagrange άρτιου βαθμού.



Σχήμα 2.4 Παρεμβολή της συνάρτησης $f(x) = \cos(4x) + 2\sin(8x)$ στο διάστημα $[-1, 1]$ με πολυώνυμο Lagrange περιττού βαθμού.

Παρατηρούμε ότι για την συνάρτηση $f(x) = \cos(4x) + 2\sin(8x)$ που έχει σημαντική μεταβολή στο διάστημα $[-1,1]$ η παρεμβολή Lagrange με πολυώνυμα χαμηλού βαθμού δεν είναι ικανοποιητική. Το σφάλμα παρεμβολής μειώνεται με την αύξηση του βαθμού του πολυωνύμου. Η παρεμβολή με τα πολυώνυμα $P^{12}(x)$ και $P^{15}(x)$ ελάχιστα διαφέρουν από την αναλυτική συνάρτηση. Οι παρεμβολές με άρτιου ή περιττού βαθμού πολυώνυμα διαφέρουν ελάχιστα. Σε όλες τις παρεμβολές η μεγαλύτερη απόκλιση παρατηρείται στα άκρα του διαστήματος όπου τα πολυώνυμα Lagrange παρουσιάζουν την μεγαλύτερη ταλάντευση.

2.3.1 Παρεμβολή Hermite

Η γενίκευση του πολυωνύμου παρεμβολής Lagrange είναι η παρεμβολή Hermite που απαιτεί συμφωνία όχι μόνον των τιμών του πολυωνύμου παρεμβολής στα διακεκριμένα σημεία παρεμβολής, x_j αλλά και συμφωνία των πρώτων $r_j - 1$ παραγώγων της συνάρτησης. Τα πολυώνυμα παρεμβολής Hermite αναφέρονται και ως εφαπτομενικά πολυώνυμα (osculating polynomials). Το πρόβλημα παρεμβολής Hermite ορίζεται ως ακολούθως. Αναζητούμε ένα πολυώνυμο βαθμού $2n + 1$, $H_{2n+1}(x)$ τέτοιο ώστε

$$F(x_j) = H_{2n+1}(x_j) \quad j = 0, 1, \dots, n \quad (2.3.17)$$

$$F'(x_j) = H'_{2n+1}(x_j)$$

και επειδή απαιτείται να ικανοποιήσουμε $2n + 2$ συνθήκες το πλήθος των συντελεστών του πολυωνύμου μπορεί να είναι $2n + 2$ δηλαδή το πολυώνυμο είναι $2n + 1$ βαθμού. Κατ' αναλογία με την παρεμβολή Lagrange του προηγούμενου κεφαλαίου αναζητούμε μια αναπαράσταση του πολυωνύμου παρεμβολής που έχει την μορφή

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) q_j(x) + \sum_{j=0}^n f'(x_j) Q_j(x) \quad (2.3.18)$$

όπου τα πολυώνυμα $q_j(x)$ και $Q_j(x)$ απαιτείται να είναι βαθμού $2n + 1$ το μέγιστο και να ικανοποιούν τις παρακάτω συνθήκες

$$q_j(x_i) = \delta_{ij} \quad Q_j(x_i) = 0 \quad (2.3.19)$$

$$q'_j(x_i) = 0 \quad Q'_j(x_j) = \delta_{ij}$$

Τα πολυώνυμα $q_j(x)$ και $Q_j(x)$ είναι συναρτήσεις των συντελεστών παρεμβολής Lagrange της Εξ. (2.3.9) και δίνονται από

$$q_j(x) \equiv [1 - 2l'_j(x_j)(x - x'_j)]l_j^2(x)$$

$$Q_j(x) \equiv (x - x_j)l_j^2(x)$$

το σφάλμα παρεμβολής της Εξ. (2.3.16) είναι

$$F(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{[(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)]^2}{(2n + 2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \quad (2.3.20)$$

$$x_0 < \xi < x_n$$

Τα πολυώνυμα $q_j(x)$ και $Q_j(x)$ της παρεμβολής Hermite ικανοποιούν επίσης την ταυτότητα

$$\sum_{j=0}^n x_j^m q_j(x) + m \sum_{j=0}^n x_j^{m-1} Q_j(x) = x^m \quad (2.3.21)$$

$$m = 0, 1, \dots, 2n + 1$$

2.4 Παρεμβολή με πολυώνυμα για συναρτήσεις που ορίζονται ισοκατανεμημένα διαστήματα

Όταν η συνάρτηση ή τα δεδομένα μας ορίζονται σε ισοκατανεμημένα διαστήματα δηλαδή όταν οι διαφορές $x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = x_3 - x_2 = \dots = x_n - x_{n-1} = h$ είναι σταθερές τότε όπως αναμένεται ότι οι σχέσεις παρεμβολής με διαιρεμένες διαφορές ή με πολυώνυμα Lagrange είναι απλούστερες. Στην περίπτωση ισοκατανεμημένων δεδομένων η παρεμβολή μπορεί να γίνει με την χρήση των γραμμικών τελεστών κεντρικών, δ , κανταντή (forward), Δ , και ανάντη (backward), ∇ , διαφορών. Οι τελεστές αυτοί είναι γραμμικοί διότι

κατάντη $\Delta(\alpha f(x) + \beta g(x)) = \alpha \Delta f(x) + \beta \Delta g(x)$ (2.4.1)

ανάνη $\nabla(a f(x) + \beta g(x)) = a \nabla f(x) + \beta \nabla g(x)$ (2.4.2)

κεντρικός $\delta(\alpha f(x) + \beta g(x)) = \alpha \delta f(x) + \beta \delta g(x)$ (2.4.3)

Οι τελεστές διαφορών κατάντη ανάνη και κεντρικών ορίζονται ως

κατάντη $\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$ (2.4.4)

ανάνη $\nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$ (2.4.5)

κεντρικών $\delta f(x) = f(x+h) - f(x-h)$ (2.4.6)

με διαδοχική εφαρμογή των παραπάνω τελεστών ορίζονται τελεστές διαφορών ανώτερης τάξης, παραδείγματος χάριν

$$\begin{aligned} \Delta^2 f(x) &= \Delta(\Delta f(x)) = \Delta[f(x+h) - f(x)] \\ &= f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x) \end{aligned}$$

Οι πεπερασμένες διαφορές δ , Δ , ή ∇ μπορεί να υπολογισθούν και να αποθηκευτούν υπό μορφή πίνακα όπως οι διαιρεμένες διαφορές.

Παράδειγμα

θεωρούμε πολυώνυμο $x^3 - 2x^2 + 7x - 5$ που οι τιμές δίνονται στα σημεία 0, 1, 2, 3, 4 τότε ο πίνακας κατάντη διαφορών είναι

i	x_i	$f(x_i)$	Δf	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$	$\Delta^4 f$
0	0	-5				
			6			
1	1	1		2		
			8		6	
2	2	9		8		0
			16		6	
3	3	25		14		
4	4	55	30			

Όπως αναμένεται η τέταρτη τάξης κατάντη διάφορα τέταρτης τάξης, $\Delta^4 f$, είναι μηδέν επειδή το αρχικό πολυώνυμο είναι τρίτου βαθμού.

Οι πεπερασμένες διαφορές μπορεί να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή πολυώνυμων παρεμβολής. Η διαδικασία κατασκευής των πολυωνύμων παρεμβολής με την χρήση των κανταντή (forward), ανάντη (backward), και κεντρικών διαφορών συνοψίζεται παρακάτω.

Κατάντη διαφορές (forward differences) Δ

Η συσχέτιση μεταξύ του κατάντη (forward) τελεστή των πεπερασμένων διαφορών και των διαιρεμένων διαφορών είναι απλή

$$f[x_1, x_0] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{\Delta f(x_0)}{h}$$

παρόμοια

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0} = \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2} \quad (2.4.7)$$

και γενικά

$$f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_0] = \frac{\Delta^n f(x_0)}{n! h^n} \quad (2.4.8)$$

Εισάγοντας τον συμβολισμό

$$x = x_0 + a h, \quad 0 \leq a \leq n \quad (2.4.9)$$

για κάθε x στο διάστημα $[x_0, x_n]$, $x_0 \leq x \leq x_n$ έχουμε

$$\begin{aligned} x - x_0 &= \alpha h \\ x - x_1 &= x - x_0 - (x_1 - x_0) \\ &= \alpha h - h = h(\alpha - 1) \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

.....

$$x - x_n = h(\alpha - n)$$

Η παρεμβολή της συνάρτησης $f(x)$ με διαιρεμένες διαφορές είναι

$$f(x) = p_n(x) + R_n(x) \quad (2.4.11)$$

όπου

$$\begin{aligned} p_n(x) = & f[x_0] + (x-x_0)f[x_1, x_0] \\ & + (x-x_0)(x-x_1)f[x_2, x_1, x_0] \\ & + \dots \\ & + (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_0] \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

και

$$\begin{aligned} R_n(x) = & (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})(x-x_n)f[x, x_n, \dots, x_0] \\ & = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})(x-x_n)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \end{aligned} \quad (2.4.13)$$

όπου $\xi \in (x, x_n, \dots, x_0)$

Οι παραπάνω σχέσεις με την βοήθεια των κατάντη διαφορών γράφονται:

$$\begin{aligned} f(x_0 + \alpha h) = & f(x_0) + \alpha \Delta_0 f(x_0) + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!} \Delta^2 f(x_0) \\ & + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!} \Delta^3 f(x_0) \\ & \dots \\ & + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)\dots(\alpha-n+1)}{n!} \Delta^n f(x_0) + R_n(x_0 + \alpha h) \\ = & p_n(x_0 + \alpha h) + R_n(x_0 + \alpha h) \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

όπου

$$R_n(x_0 + \alpha h) = h^{n+1} a(a-1)(a-2)\dots(a-n)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad (2.4.15)$$

$\xi \in (x, x_0, x_1, \dots, x_n)$

Η Εξ. (2.4.14) είναι γνωστή ως κατάντη Newton σχέση παρεμβολής (Newton's forward formula)

Ανάντη διαφορές (backward differences) ∇

Ο τελεστής των ανάντη διαφορών ορίζεται ως :

$$\begin{aligned}\nabla f(x) &= f(x) - f(x-h) \\ \nabla^2 f(x) &= \nabla f(x) - \nabla f(x-h) \\ &= f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h) \\ \nabla^3 f(x) &= \nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(x-h)\end{aligned}\tag{2.4.16}$$

.....

$$\nabla^n f(x) = \nabla^{n+1} f(x) - \nabla^{n+1} f(x-h)$$

όπου $\nabla f(x)$ είναι η πρώτη τάξης ανάντη διαφορά (first backward difference) $\nabla^2 f(x)$ η δεύτερης τάξης ανάντη διαφορά κλπ.

Ορίζουμε όπως και προηγουμένως για κάθε $x \in [x_0, x_n]$ την αναπαράσταση $x = x_n + ah$ τότε η τιμή της συνάρτησης $f(x_n + ah)$ βρίσκεται από την παρεμβολή.

$$\begin{aligned}f(x_n + ah) &= f(x_n) + a\nabla f(x_n) + \frac{a(a+1)}{2!} \nabla^2 f(x_n) \\ &\quad + \frac{a(a+1)(a+2)}{3!} \nabla^3 f(x_n) + \dots + \frac{a(a+1)\dots(a+n-1)}{n!} \nabla^n f(x_n) \\ &\quad + R_n(x + ah)\end{aligned}\tag{2.4.17}$$

όπου

$$R_n(x + ah) = h^{n+1} a(a+1)(a+2)\dots(a+h) \frac{f^{(n+1)}}{(n+1)!}, \quad x_0 < \xi < x_n \tag{2.4.18}$$

Κεντρικές διαφορές δ

Ο τελεστής των κεντρικών διαφορών δ ορίζεται ως ακολούθως

$$\begin{aligned}\delta f(x) &= f\left(x + \frac{h}{2}\right) - f\left(x - \frac{h}{2}\right) \\ \delta^2 f(x) &= \delta f\left(x + \frac{h}{2}\right) - \delta f\left(x - \frac{h}{2}\right) = f(x+h) - 2f(x) + f(x-h) \\ \delta^3 f(x) &= \delta^2 f\left(x + \frac{h}{2}\right) - \delta^2 f\left(x - \frac{h}{2}\right)\end{aligned}\tag{2.4.19}$$

.....

$$\delta^n f(x) = \delta^{n+1} f\left(x + \frac{h}{2}\right) - \delta^{n+1} f\left(x - \frac{h}{2}\right)$$

Η κεντρική διαφορά σχηματίζεται όπως φαίνεται και από τον ορισμό της από τιμές της συνάρτησης και από τις δυο πλευρές ($x-h/2$ και $x+h/2$) του σημείου x από το οποίο ορίζουμε την κεντρική διαφορά. Μπορεί δε να αποδειχθεί ότι τα λάθη παρεμβολής από πολυώνυμα που σχηματίζονται από κεντρικές διαφορές είναι μικρότερα σε σύγκριση με πολυώνυμα παρεμβολής που σχηματίζονται από ανάντι ή κατάντη διαφορές. Σαν αποτέλεσμα, μια χαμηλότερης τάξης παρεμβολή που βασίζεται σε κεντρικές διαφορές μπορεί να έχει από μικρό σφάλμα από μια παρεμβολή υψηλότερης τάξης που βασίζεται σε ανάντι ή κατάντη διαφορές. Ο υπολογισμός κεντρικών διαφορών μπορεί να γίνει με την βοήθεια του παρακάτω πίνακα

i	X_i	$F(x_i)$	δ	δ^2	δ^3	δ^4
-3	x_{-3}	$f(x_{-3})$	$f(x_{-2}-\frac{h}{2})$			
-2	x_{-2}	$f(x_{-2})$	$f(x_{-1}-\frac{h}{2})$	$\delta^2 f(x_{-2})$	$\delta^3 f\left(x_{-1}-\frac{h}{2}\right)$	
-1	x_{-1}	$f(x_{-1})$	$f(x_0-\frac{h}{2})$	$\delta^2 f(x_{-1})$	$\delta^3 f\left(x_0-\frac{h}{2}\right)$	$\delta^4 f(x_{-1})$
0	x_0	$f(x_0)$	$f(x_0+\frac{h}{2})$	$\delta^2 f(x_0)$	$\delta^3 f\left(x_0+\frac{h}{2}\right)$	$\delta^4 f(x_0)$
1	x_1	$f(x_1)$	$f(x_1+\frac{h}{2})$	$\delta^2 f(x_1)$	$\delta^3 f\left(x_1+\frac{h}{2}\right)$	$\delta^4 f(x_1)$
2	x_2	$f(x_2)$	$f(x_2+\frac{h}{2})$			
3	x_3	$f(x_3)$	$f(x_3+\frac{h}{2})$	$\delta^2 f(x_2)$	$\delta^3 f\left(x_1+\frac{h}{2}\right)$	

Παρεμβολή μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας ανάντι τιμές της συνάρτησης, δηλαδή $a = (x - x_0)/h$, ως

$$\begin{aligned}
 f(x_0 + ah) = & f(x_0) + a\delta f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) + a(a-1)\delta^2 \frac{f(x_0)}{2!} \\
 & + a(a-1)(a+1)\frac{\delta^2 f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right)}{3!} + \dots R_n(x_0 + ah)
 \end{aligned}
 \tag{2.4.20}$$

με κατάντη τιμές

$$\begin{aligned}
f(x+ah) = & f(x_0) + a\delta f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right) + a(a-1)\delta^2 \frac{f(x_0)}{2!} \\
& + a(a-1)(a+1)\frac{\delta^3 f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{3!} + \dots + R_n(x_0 + ah)
\end{aligned}
\tag{2.4.21}$$

ή με κεντρικές τιμές όταν πάρουμε τον μέσο όρο των Εξ. (2.4.20) και (2.4.21).

$$\begin{aligned}
f(x+ah) = & f(x_0) + \frac{a}{2}\left[\delta f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) + \delta f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)\right] + a^2 \frac{\delta^2 f(x_0)}{2!} \\
& + \frac{a(a-1)(a+1)}{2}\left[\frac{\delta^3 f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) - \delta^3 f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{3!}\right] + \dots
\end{aligned}$$

2.5 Παρεμβολή με πολυώνυμα ειδικών μορφών

Παρεμβολή μπορεί να πραγματοποιηθεί και με πολυώνυμο που χρησιμοποιούν πληροφορία που σχετίζεται όχι μόνο με την τιμή της συνάρτησης αλλά και με τις παραγώγους αυτής. Παραδείγματος χάριν μπορούμε να βρούμε ένα πολυώνυμο παρεμβολής τρίτου βαθμού σε διάστημα $[x_0, x_1]$ στα άκρα του διαστήματος αναπαριστά επ' ακριβώς τις τιμές της συνάρτησης $f(x_0)$ και $f(x_1)$ όπως και τις τιμές των παραγώγων αυτής $f'(x_0)$ και $f'(x_1)$. Το πολυώνυμο αυτό βρίσκεται από την λύση του συστήματος

$$a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + a_3 x_0^3 = f(x_0)$$

$$a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + a_3 x_1^3 = f(x_1)$$

$$a_1 x_0 + 2a_2 x_0 + 3a_3 x_0^2 = f'(x_0)$$

$$a_1 x_1 + 2a_2 x_1 + 3a_3 x_1^2 = f'(x_1)$$

Το σύστημα αυτό έχει λύση όταν η ορίζουσα των συντελεστών είναι διαφορετική του μηδενός. Πολυώνυμο παρεμβολής ανώτερου βαθμού μπορεί να βρεθούν όταν οι παράγωγοι ανώτερης τάξης είναι γνωστές και η ορίζουσα του συστήματος που προκύπτει δεν μηδενίζεται.

Δεν υπάρχουν γενικοί κανόνες που να καθορίζουν ποιος βαθμός η τάξη παρεμβολής δίνει τα καλύτερα αποτελέσματα. Το σφάλμα παρεμβολής είναι

$$R_n(x) = \left[\prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] f[x, x_n, x_{n-1}, \dots, x_0]$$

$$= \left[\prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

όπου $\xi \in [x, x_n, \dots, x_0]$

Καθώς ο βαθμός του πολυωνύμου παρεμβολής μεγαλώνει αφενός το μέγεθος του όρου $\prod_{i=0}^n (x - x_i)$ τείνει να αυξηθεί αφ' ετέρου δε η δεξαμενές διαφορές ή η παράγωγος δεν γίνονται κατ' ανάγκη πιο μικρές.

Στην πραγματικότητα για πολλές συναρτήσεις αρχικά το μέγεθος των διαιρεμένων διαφορών ελαττώνεται τελικά όμως καθώς ο βαθμός ή

γίνεται μεγαλύτερος γίνονται μεγαλύτερες. Σαν αποτέλεσμα το σφάλμα μπορεί να αυξηθεί καθώς αυξάνεται ο βαθμός των πολυωνύμων παρεμβολής. Επ' πλέον η διαδοχική χρήση τελεστών πεπερασμένων διαφορών διαιρεμένων διαφορών για τιμές της συνάρτησης που είναι γνωστές μόνο με πεπερασμένο αριθμό ψηφίων δεν έχει κανένα νόημα.

2.5.1 Πολύωνυμα Chedyshev

Μέχρι τώρα πραγματοποιήσαμε παρεμβολές δεδομένων ή συναρτήσεων χρησιμοποιώντας πολύωνυμα που είναι γραμμικοί συνδυασμοί όρων της μορφής $1, x, x^2, \dots, x^n$. Τα μονώνυμα αυτά στο διάστημα $[-1, 1]$ έχουν μοναδιαίο μέγιστο μέτρο στα άκρα του διαστήματος $x = \pm 1$ και μηδενικό ελάχιστο μέτρο στο σημείο $x = 0$. Υποθέτουμε ότι μια συνάρτηση $f(x)$ στο διάστημα $[-1, 1]$ παρεμβάλλεται ικανοποιητικοί από ένα πολύωνυμο n βαθμού.

$$f(x) \approx p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$$

Τότε η παράλειψη των ανώτερης τάξης όρων έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία μικρού σφάλματος για τιμές x κοντά στο μηδέν και δημιουργία μεγαλύτερου σφάλματος για x κοντά στα άκρα $x = \pm 1$. Η συμπεριφορά αυτή δεν περιορίζεται μόνο για συναρτήσεις που έχουν το πεδίο ορισμού του στο διάστημα $[-1, 1]$ αλλά για οποιεσδήποτε συναρτήσεις εφ' όσον μια συνάρτηση $f(z)$ που ορίζεται στο διάστημα $a \leq z \leq b$ μετασχηματίζεται στην συνάρτηση $f(x)$ που ορίζεται στο διάστημα $-1 \leq x \leq 1$ με την αντικατάσταση $x = (2z - b - a)/(b - a)$.

Είναι λοιπόν αναγκαίο να αναζητήσουμε αλλά πολύωνυμα τα οποία στο διάστημα $[-1, 1]$ να έχουν τις ακρότατες τιμές τους κατανομημένες κατά καλύτερο τρόπο. Η παρεμβολή με συναρτήσεις που έχουν αυτήν την ιδιότητα αναμένεται ότι θα δίνει σφάλμα που θα είναι πιο ομαλά κατανομημένο στο διάστημα παρεμβολής. Οι τριγωνομετρικές συναρτήσεις $\cos(x), \cos(2x), \dots, \cos(nx)$ έχουν τις ίδιες ακρότατες τιμές με τα μονώνυμα $1, x, x^2, \dots$ στο διάστημα $[-1, 1]$. Επί πλέον οι ακρότατες τιμές δυο διαφορετικών συναρτήσεων όπως $\cos(2x)$ και $\cos(4x)$ δεν συμπίπτουν στην ίδια θέση. Όπως γνωρίζουμε όμως οι τριγωνομετρικές συναρτήσεις προσεγγίζονται με την αριθμητική τους τιμή στον υπολογιστή. Είναι λοιπόν πιο βολικό στους υπολογισμούς να χρησιμοποιήσουμε ένα μετασχηματισμό της τριγωνομετρικής

συνάρτησης $\cos(n\theta)$ στο διάστημα $0 \leq \theta \leq \pi$ η οποία να παράγει κάποιο πολυώνυμο στο διάστημα $-1 \leq x \leq 1$. Η σειρά πολυωνύμων που παράγονται από τριγωνομετρικές συναρτήσεις και πληρούν τις παραπάνω προϋποθέσεις ονομάζονται πολυώνυμα Chebyshev και ορίζονται ως :

$$\begin{aligned} T_n(x) &= \cos(n\theta), \quad n = 0, 1, \dots \\ \theta &= \cos^{-1} x \end{aligned} \quad (2.5.1)$$

Δηλαδή

$$\begin{aligned} T_0(x) &= \cos(\theta) = 1 \\ T_1(x) &= \cos\theta = \cos(\cos^{-1} x) = x \\ T_2(x) &= \cos 2\theta = \cos(2\cos^{-1} x) = 2\cos^2(\cos^{-1} x) - 1 = 2x^2 - 1 \end{aligned} \quad (2.5.2)$$

με διαδοχική εφαρμογή της τριγωνομετρικής ταυτότητας $\cos n\theta = 2\cos\theta\cos[(n-1)\theta] - \cos[(n-2)\theta]$ βρίσκουμε την παρακάτω επαναληπτική σχέση ορισμού των πολυωνύμων Chebyshev

$$T_n(x) = 2x T_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \quad (2.5.3)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι τα μονώνυμα $1, x, x^2, \dots$ μπορεί να εκφραστούν με την βοήθεια των πολυωνύμων Chebyshev ως

$$\begin{aligned} 1 &= T_0 \\ x &= T_1 \\ x^2 &= \frac{1}{2}(T_0 + T_2) \\ x^3 &= \frac{1}{4}(3T_1 + T_3) \\ x^4 &= \frac{1}{8}(3T_0 + 4T_2 + T_4) \\ x^5 &= \frac{1}{16}(10T_1 + 5T_3 + T_5) \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

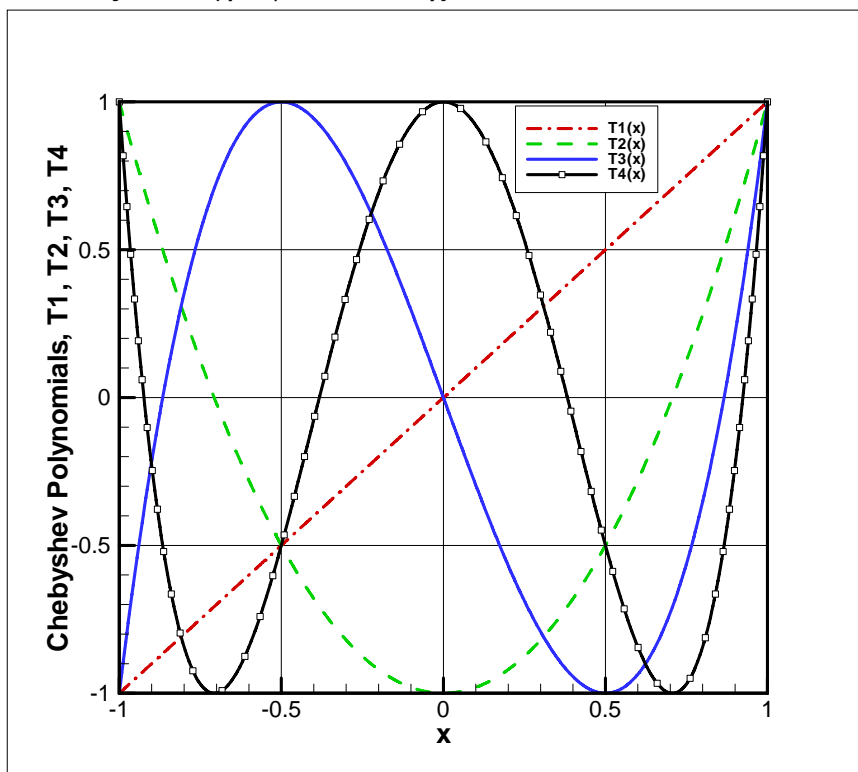
Οι ρίζες των πολυωνύμων Chebyshev βρίσκονται στο διάστημα $[-1, 1]$ είναι πραγματικές και δίνονται από την σχέση :

$$\lambda_j = \cos \left[\frac{(2j-1)\pi}{2n} \right], \quad j=1, \dots, n \quad (2.5.5)$$

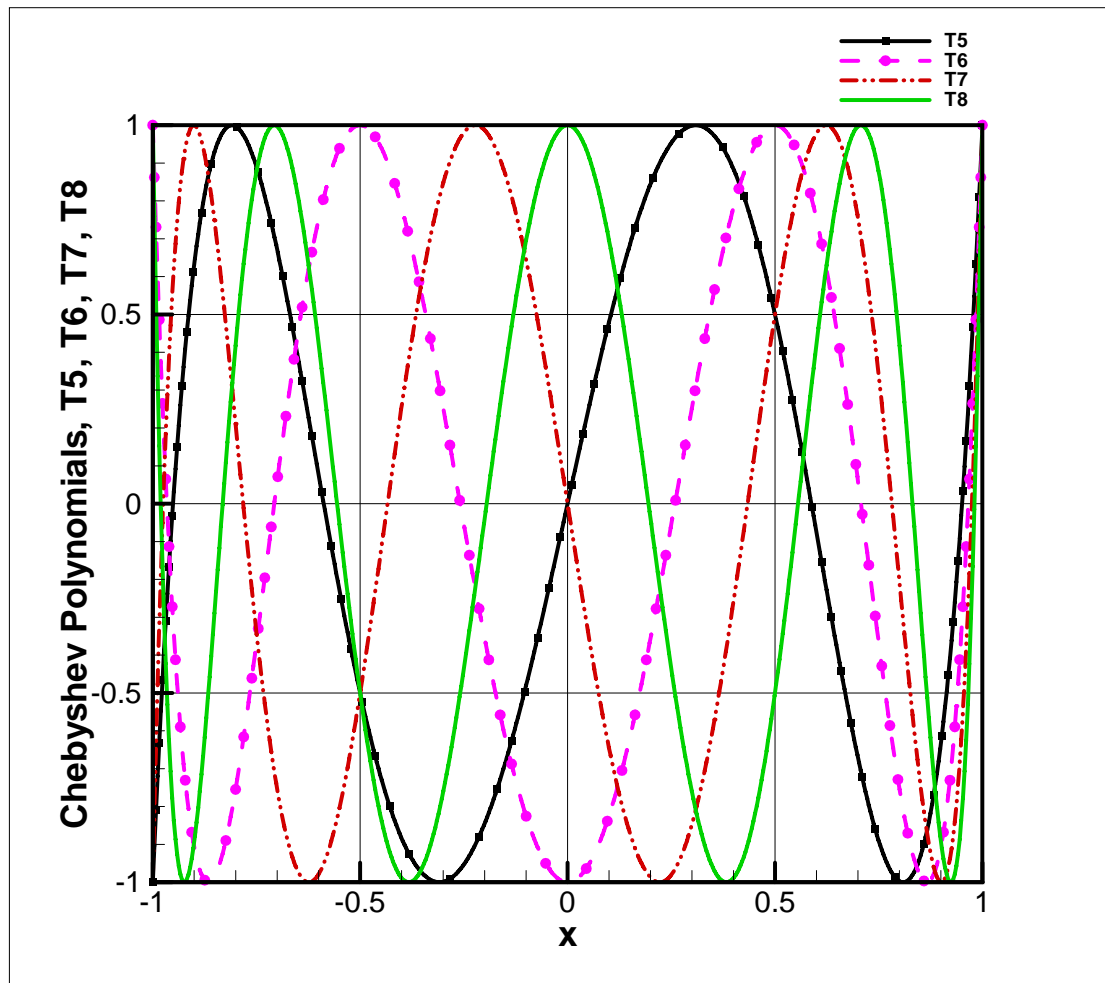
Εφαρμόζοντας την επαναληπτική σχέση της Εξ. (2.5.3) βρίσκουμε :

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1 \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x \\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1 \\ T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x \\ T_6(x) &= 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1 \\ T_7(x) &= 64x^7 - 112x^5 + 56x^3 - 7x \\ T_8(x) &= 128x^8 - 256x^6 + 160x^4 - 32x^2 + 1 \\ T_9(x) &= 256x^9 - 576x^7 + 432x^5 - 120x^3 + 9x \end{aligned} \quad (2.5.6)$$

Τα τέσσερα πρώτα πολυώνυμα Chebychev, $T_1(x)$, $T_2(x)$, $T_3(x)$, και $T_4(x)$ απεικονίζονται γραφικά στο Σχ. 2.5 και 2.6.



Σχήμα 2.5 Πολυώνυμα Chebychev $T_1(x)$, $T_2(x)$, $T_3(x)$ και $T_4(x)$



Σχήμα 2.6 Πολυώνυμα Chebychev $T_5(x)$, $T_6(x)$, $T_7(x)$ και $T_8(x)$.

Ανώτερου βαθμού πολυώνυμα Chebychev, $T_5(x)$, $T_6(x)$, $T_7(x)$, και $T_8(x)$ απεικονίζονται γραφικά στο Σχ. 2.6. Παρατηρείται ότι οι ρίζες των πολυωνύμων Chebychev συγκεντρώνονται προς τα άκρα του διαστήματος καθώς ο βαθμός των πολυωνύμων αυξάνεται. Παρατηρούμε ότι κάθε ένα από τα πολυώνυμα που απεικονίζονται έχει μοναδιαία μέγιστη τιμή και n ρίζες στο διάστημα $[-1, +1]$. Το ίδιο ισχύει και για όλα τα άλλα πολυώνυμα Chebyshev ανώτερης τάξης.

Στις Εξ. (2.5.6) παρατηρούμε ότι ο συντελεστής της μεγαλύτερης δύναμη σε κάθε πολυώνυμο $T_n(x)$ είναι δύναμη του δυο 2^{n-1} , π.χ. στο πολυώνυμο T_6 ο συντελεστής του όρου x^6 είναι $2^{6-1} = 2^5 = 32$. Συνεπώς μπορούμε να ορίσουμε πολυώνυμο της μορφής

$$\varphi_n(x) = \frac{T_n(x)}{2^{n-1}} \quad (2.5.7)$$

για τα οποία ο συντελεστής της μεγαλύτερης δύναμης είναι μονάδα. Αλλά το μέγιστο των πολυωνύμων Chebyshev στο διάστημα $-1 \leq x \leq 1$ είναι μονάδα συνεπώς το μέγιστο του πολυωνύμου $\phi_n(x)$ είναι $1/2^{n-1}$.

Μια συνάρτηση $f(x)$ μπορεί να γραφεί ως άπειρο ανάπτυγμα πολυωνύμων Chebyshev.

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i T_i(x) \quad (2.5.8)$$

αλλά το πεπερασμένο άθροισμα

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i T_i(x) \quad (2.5.9)$$

είναι πολύ καλή προσέγγιση του πολυωνύμου παρεμβολής $p_n^*(x)$ που έχει την ιδιότητα ότι ελαχιστοποιεί την μέγιστη απόκλιση D

$$D = \max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x) - p_n^*(x)| \leq \max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x) - p_n(x)|$$

Πρέπει να σημειωθεί ακόμα ότι το ανάπτυγμα της Εξ. 2.5.8 είναι ουσιαστικά ένα ανάπτυγμα παρόμοιο με το ανάπτυγμα Fourier το οποίο θα εξετάσουμε στο αμέσως παρακάτω κεφάλαιο. Το ανάπτυγμα μίας συνάρτησης με πολυώνυμα Chebyshev δεν περιορίζεται για την αναπαράσταση ή παρεμβολή μόνο περιοδικών συναρτήσεων όπως το ανάπτυγμα Fourier

2.6 Ο μετασχηματισμός Fourier και η σειρά Fourier



Jean Baptiste Joseph Fourier (1768–1830)
Γάλλος φυσικός και μαθηματικός που είναι γνωστός για τις σειρές Fourier που για πρώτη φορά χρησιμοποίησε και για τον αντίστοιχο μετασχηματισμό που προς τιμή του ονομάστηκε μετασχηματισμός Fourier. Συμμετείχε δραστήρια στην Γαλλική Επανάσταση. Το 1795 έγινε καθηγητής στο École Normale Supérieure, και αργότερα στο École Polytechnique. Ο Fourier συνόδευσε τον Napoleon Bonaparte στην εκστρατεία της Αίγυπτου όπου και έγινε κυβερνήτης το 1798. Διετέλεσε γραμματέας της French Academy of Sciences. Το 1822 δημοσίευσε το έργο του “Théorie analytique de la chaleur,” όπου έκανε σημαντικές συνεισφορές στην μετάδοση θερμότητας και ανέπτυξε τις σειρές Fourier.

Ο Fourier στις αρχές του 19 αιώνα κατά την διάρκεια των μελετών που αφορούσαν την διάχυση θερμότητας, που όπως γνωρίζουμε διέπεται από μια γραμμική εξίσωση ανέπτυξε τον ομώνυμο μετασχηματισμό. Το 1807 παρουσίασε τα αποτελέσματα των ερευνών του και ισχυρίστηκε ότι κάθε περιοδική συνάρτηση μπορεί να αναπαρασταθεί από μια σειρά αρμονικών τριγωνομετρικών συναρτήσεων της μορφής $\phi_k(x) = e^{ikx}$. Η ιδέα του Fourier είχε τεράστιο αντίκτυπο στην μαθηματική ανάλυση, τις φυσικές επιστήμες, και τις επιστήμες του μηχανικού και σήμερα η χρήση του μετασχηματισμού Fourier είναι πολύ εκτεταμένη στην μελέτη ταλαντώσεων την μηχανική ρευστών και την επεξεργασία σημάτων για να αναφέρουμε μόνο λίγους από τους τομείς όπου εφαρμόζεται. Η χρήση και εφαρμογή του μετασχηματισμού Fourier στην μηχανική υπήρξε άμεση αν και χρειάστηκε ενάμισι αιώνας για να αποδειχθεί η σύγκλιση των σειρών Fourier και να αναπτυχθεί από τους μαθηματικούς μια πλήρης θεωρία των ολοκληρωμάτων Fourier.

Η βασική ιδιότητα του μετασχηματισμού Fourier είναι ότι διαγωνιοποιεί όλους τους γραμμικούς και ανεξάρτητους από τον χρόνο τελεστές, που είναι χαρακτηριστικά συστατικά διαφορικών τελεστών συνήθων και με μερικές παραγώγους που απατώνται σε κλάδους της μηχανολογίας καθώς και στην επεξεργασία σημάτων. Αυτή η χαρακτηριστική ιδιότητα του μετασχηματισμού Fourier θα παρουσιασθεί μετά από τον ορισμό του που δίνεται αμέσως παρακάτω.

Γνωρίζουμε ότι οι μιγαδικές συναρτήσεις $\phi_k(x) = e^{ikx}$ είναι ορθογώνιες στο διάστημα $(0, 2\pi)$ δηλαδή

$$\int_0^{2\pi} \varphi_k(x) \varphi_m^*(x) dx = 2\pi \delta_{km} \begin{cases} 0 & k \neq m \\ 2\pi & k = m \end{cases} \quad (2.6.1)$$

Θεωρούμε μια οποιαδήποτε μιγαδική συνάρτηση u που ορίζεται στο διάστημα $(-\infty, \infty)$. Ο μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης u ορίζεται ως :

$$\mathfrak{F}\{u(x)\} = \hat{u}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} u(x) e^{-i\omega x} dx \quad (2.6.2)$$

και ο αντίστροφος του είναι

$$\mathfrak{F}^{-1}\{\hat{u}(\omega)\} = u(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(\omega) e^{i\omega x} dx \quad (2.6.3)$$

Ο μετασχηματισμός Fourier και οι σειρές Fourier που θα παρουσιάσουμε παρακάτω είναι ιδιαίτερα χρήσιμες για την επεξεργασία δεδομένων που παρουσιάζουν περιοδικότητα.

Θεωρούμε μια περιοδική ή μη περιοδική μιγαδική συνάρτηση που ορίζεται στο διάστημα $(0, 2\pi)$ και ορίζουμε τους συντελεστές Fourier ως

$$\hat{u}_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) e^{-ikx} dx \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.6.4)$$

Η παραπάνω σχέση ορίζει για την συνάρτηση $u(x)$ μια σειρά μιγαδικών αριθμών που είναι ο μετασχηματισμός της συνάρτησης $u(x)$ στον κυματικό χώρο k .

Θεωρούμε ένα ανεξάρτητο από το χρόνο γραμμικό τελεστή L . Οι ημιτονοειδείς κυματομορφές $e^{i\omega t}$

$$e^{i\omega t} = \cos(\omega t) + i \sin(\omega t),$$

$$\cos(\omega t) = \frac{1}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

$$\sin(\omega t) = \frac{1}{2i}(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

είναι τα ιδιοανύσματα του τελεστή L . Επί πλέον, ο τελεστής L είναι πλήρως καθορισμένος από τις ιδιοτιμές του $L_e^{i\omega t} = \hat{h}(\omega)e^{i\omega t} \quad \forall \omega \in \mathbb{R}$

Η εφαρμογή του τελεστή L σε μια συνάρτηση ή σήμα $f(t)$ αντιστοιχεί σε μια αποδόμηση της σε άθροισμα ημιτονοειδούς μορφής ιδιοδιανυσμάτων $e^{i\omega t}$ που είναι ουσιαστικά ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier όπως ορίστηκε παραπάνω, δηλαδή

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega)e^{i\omega t} d\omega$$

Όταν το ολοκλήρωμα της συνάρτησης $f(t)$ είναι πεπερασμένο, δηλαδή το σχήμα έχει πεπερασμένη ενέργεια, τότε

$$\hat{f}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt$$

Η εφαρμογή του τελεστή L στην συνάρτηση σε μια συνάρτηση ή σήμα $f(t)$ αντιστοιχεί σε μια αποδόμηση της σε άθροισμα ημιτονοειδούς μορφής ιδιοδιανυσμάτων $e^{i\omega t}$ που είναι ουσιαστικά ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier όπως ορίστηκε παραπάνω, δηλαδή

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega)e^{i\omega t} d\omega$$

Όταν το ολοκλήρωμα της συνάρτησης $f(t)$ είναι πεπερασμένο, δηλαδή το σήμα ή η συνάρτηση έχει πεπερασμένη ενέργεια, τότε

$$\hat{f}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt$$

Η εφαρμογή του τελεστή L στην συνάρτηση ή το σήμα $f(t)$ είναι

$$L f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega)\hat{h}(\omega)e^{i\omega t} dt$$

Δηλαδή η εφαρμογή του τελεστή L έχει σαν αποτέλεσμα την ενίσχυση ή απόσβεση κάθε συνιστώσας $\hat{f}(\omega)$ στον χώρο συχνοτήτων του σήματος κατά το ποσό $\hat{h}(\omega)$ που είναι όπως αναφέρθηκε η ιδιοτιμή του τελεστή L οι συντελεστές Fourier γράφονται και ως $\hat{u}_k = \alpha_k - ib_k$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ όπου α_k και b_k είναι ο μετασχηματισμός Fourier συνημιτόνου και ημιτόνου, αντίστοιχοι που δίνονται από τις σχέσεις

$$\alpha_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) \cos kx \, dx, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.6.5)$$

$$b_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) \sin kx \, dx, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.6.6)$$

όταν η συνάρτηση $u(x)$ είναι πραγματική τότε α_k και b_k είναι πραγματικοί αριθμοί και $\hat{u}_{-k} = \hat{u}_k^*$

Η σειρά Fourier για την μιγαδική συνάρτηση $u(x)$ ορίζεται ως :

$$S_u = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{u}_k \phi_k = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{u}_k e^{ikx} \quad (2.6.7)$$

και είναι ένα ανάπτυγμα της συνάρτησης με την βοήθεια των ορθογωνίων συναρτήσεων $\phi_k(x)$ ή των τριγωνομετρικών πολυωνύμων.

Το βασικό ερώτημα είναι πόσο καλά μπορούμε να προσεγγίσουμε την συνάρτηση $u(x)$ με μια πεπερασμένη σειρά P_N τριγωνομετρικών πολυωνύμων

$$P_N u(x) = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{u}_k e^{ikx} \quad (2.6.8)$$

Όταν η συνάρτηση u είναι περιοδική στο διάστημα $(0, 2\pi)$ τότε η σειρά S_u συγκλίνει ομοιόμορφα, δηλαδή

$$\max_{x \in [0, 2\pi]} |u(x) - P_N u(x)| \rightarrow 0 \quad \text{για } N \rightarrow \infty \quad (2.6.9)$$

Πρέπει να σημειωθεί όμως ότι ακόμα και όταν η συνάρτηση u είναι περιοδική αλλά ασυνεχής η σειρά Fourier Su δεν συγκλίνει κατ' ανάγκη σε κάθε σημείο $x \in [0, 2\pi]$

Παραδείγματα

Η συνάρτηση $u(x) = \sin(x/2)$ είναι συνεχής και παραγωγίσιμη στο διάστημα $[0, 2\pi]$ οι συντελεστές Fourier είναι

$$\hat{u}_k = \frac{2}{\pi} \frac{1}{1-4k^2} \quad k = 0, \pm 1, \dots$$

Η συνάρτηση $u(x) = 3/(5 - 4 \cos x)$ είναι επίσης παραγωγίσιμη και περιοδική και έχει συντελεστές Fourier

$$\hat{u}_k = 2^{-|k|} \quad k = 0, \pm 1, \dots$$

2.6.1 Η διακριτή σειρά Fourier

Σε πολλές πρακτικές εφαρμογές ακόμα και όταν γνωρίζουμε ότι τα δεδομένα μας παρουσιάζουν περιοδικότητα δεν είναι δυνατόν να βρούμε την σειρά Fourier όπως παρουσιάστηκε στην Εξ. (2.6.7) ή (2.6.8) διότι οι συντελεστές Fourier δεν μπορεί να βρεθούν όπως στα παραδείγματα μας για τα οποία η συνάρτηση u είχε κάποια αναλυτική έκφραση. Στην περίπτωση αυτή θεωρούμε N σημεία

$$x_j = \frac{2\pi j}{N} \quad j = 0, \dots, N-1 \tag{2.6.10}$$

που ονομάζονται κόμβοι. Οι διακριτοί συντελεστές Fourier βρίσκονται από τις διακριτές τιμές της συνάρτησης $u(x)$ που ορίζονται στα ισαπέχοντα σημεία $x_i = 2\pi_j / N$ ή τους κόμβους το μονοδιάστατου πλέγματος και δίνονται από την σχέση

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-ikx_j} \quad -\frac{N}{2} \leq k \leq \frac{N}{2} - 1 \tag{2.6.11}$$

Λόγω της ορθογωνιότητας των συναρτήσεων βάσης e^{iMx_j} έχουμε :

$$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^{iMx_j} = \begin{cases} 1 & \text{όταν } M = Nk, \quad k = 0, \pm 1, \dots \\ 0 & \text{όταν } M \neq Nk \end{cases} \quad (2.6.12)$$

Και η σχέση αντιστροφής είναι

$$u(x_j) = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \tilde{u}_k e^{ikx_j} \quad j = 0, \dots, N-1 \quad (2.6.13)$$

Δηλαδή το πολυώνυμο $I_N u(x)$

$$I_N u(x) = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \tilde{u}_k e^{ikx} \quad (2.6.14)$$

είναι ένα $N/2$ τριγωνομετρικό πολυώνυμο παρεμβολής της συνάρτησης u στους κόμβους $x_j = 2\pi j/N$, $j = 0, \dots, N-1$ όπου μάλιστα $I_N u(x_j) = u(x_j)$. Δηλαδή το πολυώνυμο παρεμβολής που βρίσκουμε από την πεπερασμένη σειρά Fourier διέρχεται από τις διακριτές τιμές $u(x_j)$ των δεδομένων που χρησιμοποιήσαμε για την εύρεση των συντελεστών Fourier με την Εξ. (2.6.11).

Οι συντελεστές της διακριτής σειράς Fourier \tilde{u}_k εξαρτώνται μόνο από N διακριτές τιμές της συνάρτησης u στους ισαπέχοντες κόμβους $x_j = 2\pi j/N$. Η διακριτή σειρά ή μετασχηματισμός Fourier (discrete Fourier transform DFT) είναι μια απεικόνιση μεταξύ N (γενικά μιγαδικών αριθμών) $u(x_j)$ $j = 0, \dots, N-1$ και N μιγαδικών συντελεστών

$$\tilde{u}_k, \quad k = -N/2, \dots, N/2 - 1.$$

Ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier μπορεί να υπολογισθεί αποδοτικά με την χρήση του αλγόριθμου FFT (Fast Fourier Transform) που παρουσιάστηκε από τους Cooley and Tukey το 1965. Ο αλγόριθμος FFT βασίζεται στην παρακάτω παρατήρηση. Οι εξισώσεις που ορίζουν το διακριτό ανάπτυγμα Fourier είναι δυνατόν να γραφούν υπό μορφή μητρώου. Η αναπαράσταση της συνάρτησης με διακριτή σειρά Fourier, Εξ. (2.6.13), και οι συντελεστές Fourier, Εξ. (2.6.11), μπορεί να γραφούν στην πιο συνήθη μορφή της ως

$$u(x_j) = \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{u}_k e^{ix_j k} \quad j = 0, \dots, N-1 \quad (2.6.15)$$

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-ix_j k} \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

Αντικαθιστώντας $e^{ix_j} = \omega$ και βρίσκουμε

$$u(x_i) = \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{u}_k \omega^k \quad j = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.6.16)$$

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) \omega^{-k} \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

Οι παραπάνω σχέσεις γράφονται υπό μορφή μητρώου ως

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \omega^3 & \dots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 & \dots & \omega^{2N-2} \\ \vdots & & & & & \\ \vdots & & & & & \\ 1 & \omega^{N-1} & \dots & \dots & \omega^{(N-1)^2} & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{u}_0 \\ \tilde{u}_1 \\ \tilde{u}_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \tilde{u}_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{bmatrix} \quad (2.6.17)$$

δηλαδή το πολυώνυμο

$$F_N(x) = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \tilde{u}_k e^{ikx} \quad (2.6.18)$$

είναι η $N/2$ βαθμού τριγωνομετρική παρεμβολή της συνάρτησης u στους κόμβους x_j

$$F_N(x_j) = u(x_j) \quad j = 0, 1, \dots, N-1$$

Ο γρήγορος μετασχηματισμός Fourier FFT αντικαθιστά το παραπάνω πλήρες μητρώο με ένα γινόμενο άλλων μητρώων με αραιή δομή (sparse matrices). Η παραγοντοποίηση του FFT είναι ιδιαίτερη αποδοτική όταν N είναι δύναμη του 2 δηλ. $N = 16, 32, 64, 128, \dots$ ή $N = 2^4, 2^5, 2^6, 2^7, \dots$

Το πολυώνυμο της Εξ. (2.6.18) είναι η διακριτή σειρά Fourier η οποία μπορεί να υπολογισθεί από $2^p = N$ σημειακές τιμές $u(x_i)$ με τον

αλγόριθμο Fast Fourier Transform (FFT) που απαιτεί $T = 5N \log_2 N - 6N$ προσθήσεις και πολλαπλασιασμούς εάν υποθέσουμε ότι το δείγμα $u(x_j)$ $j = 0, 1, 2, \dots, N-1$ αποτελείται από N μιγαδικές τιμές ενώ απαιτεί $T/2$ υπολογισμούς όταν δείγμα $u(x_j)$ $j = 0, 1, 2, \dots, N-1$ αποτελείται από N πραγματικές τιμές.

Εάν υποθέσουμε ότι η διακριτή σειρά Fourier συγκλίνει στην ακριβή τιμή u σε όλους τους κόμβους x_j τότε οι συντελεστές \tilde{u}_k της διακριτής σειράς και οι ακριβείς συντελεστές Fourier \hat{u}_k της άπειρης σειράς συνοδεύονται με την σχέση

$$\tilde{u}_k = \hat{u}_k + \sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq 0}}^{m=+\infty} \hat{u}_{k+N_m} \quad k = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1$$

Η παραπάνω σχέση δείχνει ότι ο k^{th} όρος της τριγωνομετρικής παρεμβολής εξαρτάται όχι μόνο από τον k^{th} όρο της ακριβούς σειράς Fourier αλλά και από όλους τους άλλους όρους που αντιστοιχούν σε μεγαλύτερες συχνότητες. Το φαινόμενο αυτό αναφέρεται ως παραλλαγή (aliasing) και σημαίνει ότι η $k + Nm$ συχνότητα που υπάρχει πιθανώς στην συνεχή συνάρτηση δεν είναι δυνατόν να αναγνωρισθεί με τον αριθμό των N σημείων που χρησιμοποιήθηκαν στο διακριτό πλέγμα, δηλαδή

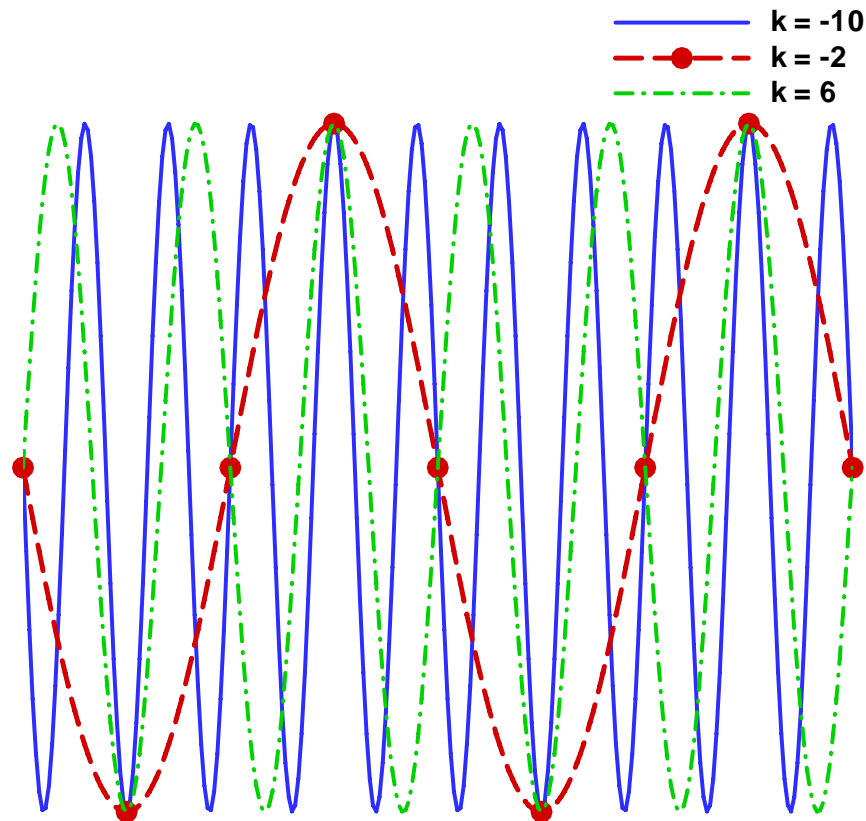
$$F_N = P_N + R_N \quad (12)$$

όπου

$$R_N = \sum_{\substack{k=-\frac{N}{2} \\ k \neq 0}}^{\frac{N}{2}-1} \left(\sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq 0}}^{\infty} \hat{u}_{k+N_m} \right) e^{ikx} \quad (13)$$

Δηλαδή R_N είναι το σφάλμα μεταξύ του τριγωνομετρικού πολυωνύμου παρεμβολής και της αποκομμένης Fourier σειράς (truncated Fourier series), που ονομάζεται σφάλμα παραλλαγής (aliasing error), και είναι πάντοτε μεγαλύτερο από το σφάλμα αποκοπής λόγω παράλειψης όρου της αναλυτικής άπειρης σειράς Fourier.

Το φαινόμενο παραλλαγής απεικονίζεται στο Σχ. 2.7 όπου φαίνεται ότι οι κυματομορφές υψηλής συχνότητας $k = -10, k = 6$ δεν μπορεί να διακριθούν από την κυματομορφή χαμηλής συχνότητας $k = -2$ λόγω του μικρού πλήθους του δείγματος. Το φαινόμενο παραλλαγής στο παραπάνω παράδειγμα μπορεί να αποφευχθεί όταν το μέγεθος του δείγματος N είναι μεγαλύτερο από 20.



Σχήμα 2.7 Φαινόμενο παραλλαγής (aliasing) όπου στους κόμβους δεν διακρίνονται οι υψηλές από τις χαμηλές συχνότητες

Αλγόριθμος κατασκευής διακριτής σειράς Fourier

```

specify the number of samples N
for j=0; to j=N
read table or generate values of x(j), f(j) data
at x(j) = 2.*pi/N and store
end loop
/* calculate the Fourier coefficients */
/*                               */
Four_coef_real = 0.0
Four_coef_imag = 0.0
for k=-N/2, to k=(N/2)-1 {
fourier_comp(k) = (0., 0. )
fourier_coef = (Four_coef_real, Four_coef_imag)
for j=0; to j=N-1 {

```

```

fourier_coef = fourier_coef +exp( ic * x(j)
end j loop }
fourier_comp(k)= fourier_coef / N
    spectrum(k) = 2.*sqrt(Real(four_comp(k))**2
        +Imag(four_comp(k))**2 )

output k, Real(four_comp(k)), Imag(four_comp(k)),
    spectrum(k)
end k loop }

/* reconstruct the function at Nxmax point
/* from the Fourier coefficients

for j=0; to j=Nxmax-1 {
xx = 2.*pi*j/Nxmax
complex_sum = ( 0., 0. )
for k=-N/2, to k=(N/2)-1 {
complex_sum = complex_sum
    + fourier_comp(k)*exp(ic xx) }
end k loop
discrete_fourier_series(j)= complex_sum
output, xx, discrete_fourier_series(j)
end j loop

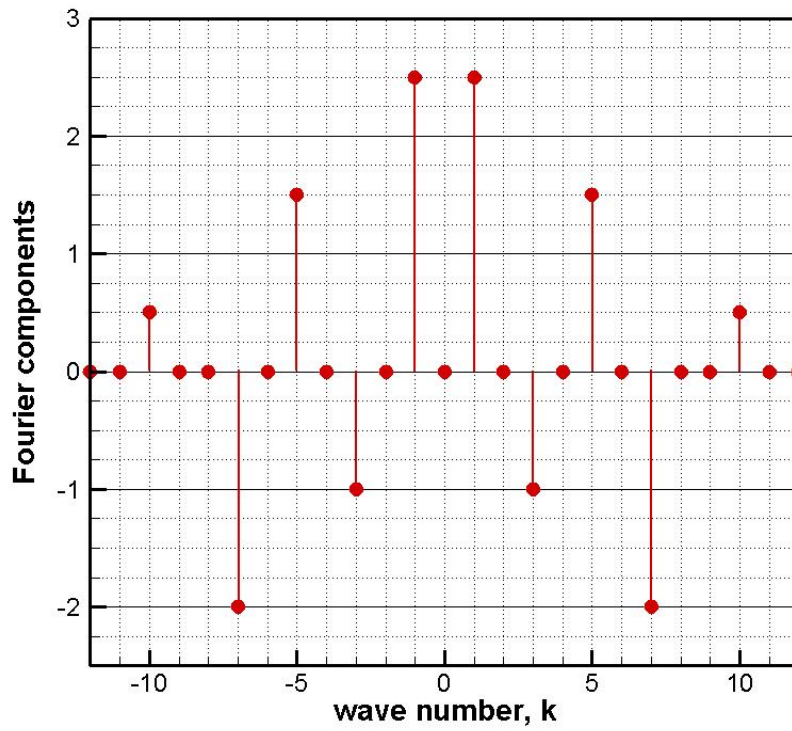
```

Η ανάλυση σε διακριτή σειρά Fourier της περιοδικής γνωστής συνάρτησης $f(x) = 5\cos(\pi x) + 2\cos(3\pi x) + 3\cos(5\pi x) + 4\cos(7\pi x) + \cos(10\pi x)$

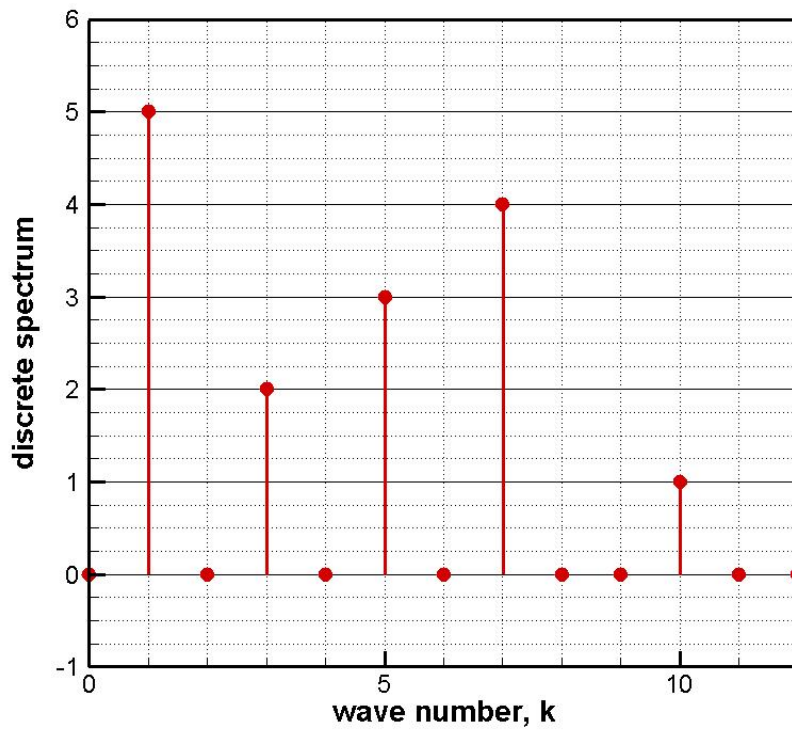
$= \sum_{j=0}^{10} a_j \cos(j\pi x)$ απεικονίζεται στο Σχ. 2.8. Οι συντελεστές Fourier $\tilde{u}(k)$

είναι πραγματικοί και μη-μηδενικοί μόνο για τις τιμές $k=1, 3, 5, 7, 10$. Η ανάλυση σε διακριτή σειρά Fourier απαιτεί αριθμό δειγμάτων $N > 2 \times 10$ επειδή 10 είναι η μέγιστη συχνότητα (δες επόμενο κεφάλαιο για ρυθμό Nyquist). Το διακριτό φάσμα, $S(k) = 2\tilde{u}(k)\tilde{u}^*(k)$, απεικονίζεται στο Σχ. 2.9. Οι φασματικοί συντελεστές είναι οι συντελεστές είναι οι μη μηδενικοί συντελεστές της περιοδικής συνάρτησης $f(x) = \sum_{j=0}^{10} a_j \cos(j\pi x)$.

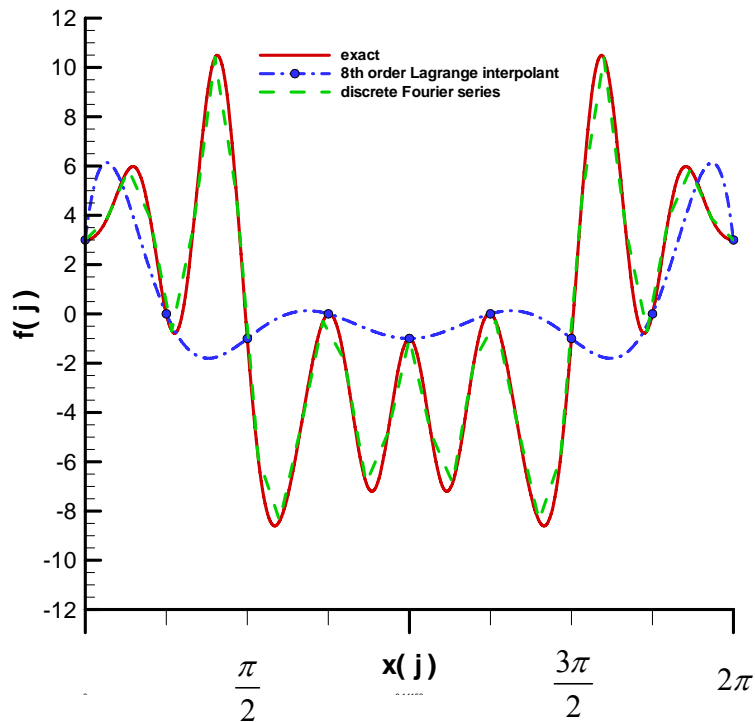
Η αναδόμηση της συνάρτησης γνωστής $f(x) = \sum_{j=0}^{10} a_j \cos(j\pi x)$ από τους συντελεστές Fourier απεικονίζεται στο Σχ. 2.10. Στο ίδιο σχήμα περιλαμβάνεται και η παρεμβολή της συνάρτησης $f(x)$ με ένα πολυώνυμο Lagrange $8^{\text{ου}}$ βαθμού. Το πολυώνυμο διέρχεται από 9 σημεία αλλά η προσέγγιση Lagrange είναι πολύ κατώτερη από εκείνη που επιτυγχάνεται με την σειρά Fourier.



Σχήμα 2.8 Συντελεστές Fourier.



Σχήμα 2.9 Φάσμα $S = |\widetilde{u}_k|$



Σχήμα 2.10 Παρεμβολή με διακριτή σειρά Fourier και 8^ο βαθμού πολυώνυμο Lagrange.

2.6.2 Διακριτά συστήματα

Ο μετασχηματισμός Fourier αναφέρεται σε συνεχείς χρονικές $f(t)$ ή χωρικές συναρτήσεις $f(x)$. Η σειρά Fourier εφαρμόζεται σε διακριτές σειρές δεδομένων ή για δεδομένα που είναι εκπεφρασμένα σε ψηφιακή μορφή. Οι σειρές αυτές συμβολίζονται ως $x(n)$, $-N_1 < n < N_2$ όπου οι ακέραιοι N_1 και N_2 μπορεί να έχουν τιμές που είναι πολύ μεγάλες. Οι διακριτές σειρές $x(n)$ αναφέρονται στην βιβλιογραφία ως διακριτές χρονοσειρές (discrete-time sequences). Στην πραγματικότητα όμως $x(n)$ μπορεί να αναφέρεται σε δεδομένα που αφορούν όχι μόνο την χρονική μεταβολή μιας ποσότητας όπως, π.χ. η μεταβολή στον χρόνο της ταχύτητας ή πίεσης σε ένα πεδίο τυρβώδους ροής, ή η μεταβολή της ακουστικής πίεσης σε μια ακουστική μέτρηση, αλλά ακόμη την συγκεκριμένη θέση σε εφαρμογές επεξεργασίας εικόνας ή ρομποτικής, ή ακόμα και η απόσταση σε εφαρμογές radar ή sonar.

Κατά αναλογία προς τα συνεχή συστήματα, και για τα διακριτά συστήματα, ορίζονται τελεστές επεξεργασίας π.χ. ψηφιακά φίλτρα. Οι τελεστές αυτοί όταν εφαρμοστούν σε ένα διακριτό σύστημα

μετασχηματίζουν την διακριτή σειρά εισόδου $x(n)$ σε μια σειρά εξόδου $y(n)$ μέσω ενός μετασχηματισμού $G\{\cdot\}$, δηλαδή $y(n) = G\{x(n)\}$. Τα διακριτά συστήματα είναι γραμμικά όταν έχουν τις ιδιότητες

1. $G\{a x(n)\} = a G\{x(n)\} \quad a = \text{const}$
2. $G\{a x_1(n) + \beta x_2(n)\} = a G\{x_1(n)\} + \beta G\{x_2(n)\}$ αρχή επαλληλίας

Το ανάλογο της συνάρτησης δέλτα, $\delta(x)$, των συνεχών συστημάτων στα διακριτά συστήματα είναι η σειρά μοναδιαίου δείγματος που ορίζεται ως ακολούθως

$$d(n) = \begin{cases} 1 & n = 0 \\ 0 & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

ή

$$d(n-k) = \begin{cases} 1 & n = k \\ 0 & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

Η τιμή της διακριτής σειράς $x(k)$ στον συγκεκριμένο κόμβο k (χρονική στιγμή $\tau = T_k$) ορίζεται με την βοήθεια της σειράς μοναδιαίου δείγματος ως

$$x(k) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} d(n-k) x(n)$$

Εφαρμόζοντας την ιδιότητα αυτή της σειράς μοναδιαίου δείγματος για το γραμμικό σύστημα με συνάρτηση μετασχηματισμού $G\{\cdot\}$ και λαμβάνοντας υπ' όψη την επαλληλία βρίσκουμε

$$\begin{aligned} y(n) &= G\{x(n)\} = G\left\{\sum_{k=-\infty}^{\infty} d(n-k)x(k)\right\} \\ &= G\{\dots + d(n+1)x(-1) + d(n)x(0) + d(n-1)x(1) + \dots\} \\ &= \dots + x(-1)G\{d(n+1)\} + x(0)G\{d(n)\} + x(1)G\{d(n-1)\} + \dots \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} x(k)G\{d(n-k)\} \end{aligned}$$

Δηλαδή η έξοδος από το σύστημα $G \{ \}$ είναι το άθροισμα με βάρη στις αποκρίσεις της σειράς μοναδιαίου δείγματος με καθυστέρηση k . Η έξοδος του συστήματος για είσοδο την σειρά μοναδιαίου δείγματος ονομάζεται απόκριση μοναδιαίου δείγματος (unit – sample response) και συμβολίζεται ως $h(n, k)$.

$$h(n, k) = G \{ d(n - k) \}$$

Δηλαδή απόκριση μοναδιαίου δείγματος, $h(n, k)$, είναι η απόκριση του γραμμικού συστήματος για είσοδο μια σειρά μοναδιαίου δείγματος που έχει το μη μηδενικό στοιχείο στο σημείο $n = k$.

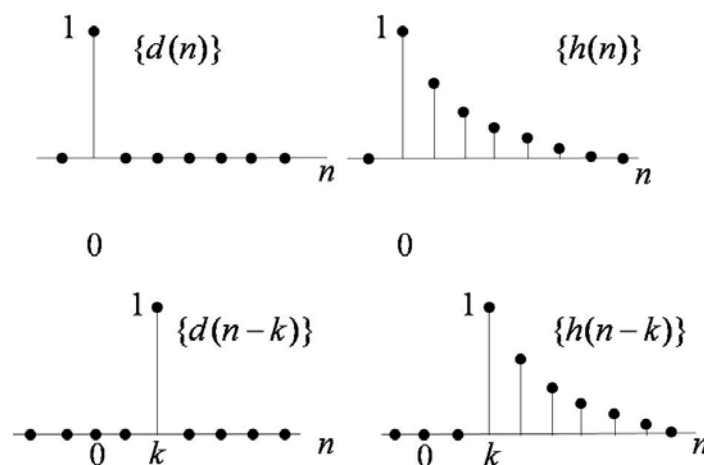
Μια ιδιαίτερη κατηγορία γραμμικών συστημάτων είναι τα γραμμικά συστήματα που είναι αναλλοίωτα στον χρόνο (linear time-invariant systems) και στα οποία μια μετάθεση κατά n_0 στην σειρά εισόδου έχει σαν αποτέλεσμα μόνο την αντίστοιχη μετάθεση κατά n_0 στην απόκριση y , δηλαδή

$$y(n - n_0) = G \{ x(n - n_0) \} \quad \text{αναλλοίωτα χρονικά γραμμικά συστήματα}$$

Επί πλέον στα αναλλοίωτα χρονικά γραμμικά συστήματα ισχύει :

$$G \{ d(n - k) = h(n, k) = h(n - k) \}$$

Δηλαδή μετά από οποιαδήποτε μετάθεση στον χρόνο της σειράς μοναδιαίου δείγματος η απόκριση του συστήματος έχει την ανάλογη μετάθεση όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα



Σχήμα 2.11 Μετάθεση σειράς μοναδιαίου δείγματος ενός αναλλοίωτου χρονικά γραμμικού συστήματος.

Εφαρμόζοντας την παραπάνω ιδιότητα της απόκρισης σε σειρά μοναδιαίου δείγματος των χρονικά αναλλοίωτων γραμμικών συστημάτων βρίσκουμε ότι η απόκριση $y(n)$ είναι η συνέλιξη (convolution)

$$\begin{aligned} y(n) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} x(n) h(n-k) \\ &= x(n) * h(n) \end{aligned}$$

όπου " * " συμβολίζει συνέλιξη για διακριτά δεδομένα.

Οι τριγωνομετρικές σειρές έχουν την σημαντική ιδιότητα που όταν επιβάλλεται σαν είσοδος σε ένα γραμμικό αναλλοίωτο χρονικό σύστημα η απόκριση είναι επίσης τριγωνομετρική σειρά στην ίδια συχνότητα αλλά με διαφορετικό εύρος και με διαφορά φάσης. Η απόκριση όμως είναι η συνέλιξη της εισόδου $x(n) = e^{i\omega_0 n}$ με την σειρά μοναδιαίου δείγματος $h(n)$ δηλαδή

$$\begin{aligned} y(n) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} h(k) x(n-k) \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} h(k) e^{i\omega_0(n-k)} \\ &= e^{i\omega_0 n} \sum_{k=-\infty}^{\infty} h(k) e^{-i\omega_0 k} \\ &= e^{i\omega_0 n} H(e^{i\omega_0}) \end{aligned}$$

όπου $H(e^{i\omega_0})$ είναι διακριτός μετασχηματισμός Fourier της διακριτής σειράς μοναδιαίου δείγματος.

Η συνάρτηση $\delta(t)$ που είναι το συνεχές ανάλογο της διακριτής σειράς $d(n)$ έχει τις παρακάτω ιδιότητες.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) dt &= 1 \\ f(t) \delta(t-t_0) &= f(t_0) \delta(t-t_0) \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \delta(t-t_0) dt &= \int_{-\infty}^{\infty} f(t_0) \delta(t-t_0) dt = f(t_0) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t-t_0) dt = f(t_0) \\ \delta(t-t_0) * f(t) &= f(t-t_0) \end{aligned}$$

όπου η συνεχής συνέλιξη ορίζεται

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi - t_0) f(t - \xi) d\xi$$

και ορίζοντας $\lambda = \xi - t$ έχουμε :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(-\lambda) \delta(\lambda - t - t_0) d\lambda = f(t - t_0)$$

2.6.3 Δειγματοληψία συνεχών συναρτήσεων για την δημιουργία διακριτής σειράς

Η διακριτή σειρά προέρχεται από δειγματοληψία συνεχών συναρτήσεων είτε αυτές είναι συναρτήσεις της θέσης είτε αυτές είναι συναρτήσεις του χρόνου, σε εφαρμογές ταλαντώσεων, ακουστικής μηχανικής ρευστών ή εμβιομηχανικής. Έστω ότι $c_A(t)$ είναι η συνεχής μας συνάρτηση (analog signal) και $C_A(i\Omega)$ είναι ο μετασχηματισμός Fourier της συνεχούς συνάρτησης $c_A(t)$.

$$C_A(i\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} c_A(t) e^{i\Omega t} dt \quad (2.6.15)$$

Κατόπιν δειγματοληψίας της συνεχούς συνάρτησης $c_A(t)$ κάθε T_s διάστημα (π.χ. sec αν πρόκειται για μια συνάρτηση χρονικής μεταβολής κάποιας ποσότητας όπως εύρος ταλάντωσης) παράγεται η διακριτή σειρά $c_A(n T_s) = c_A(t)|_{t=n T_s}$ όπου το χρονικό διάστημα T_s ονομάζεται περίοδος δειγματοληψίας. Ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier των δειγμάτων $c_A(n T_s)$ ορίζεται ως :

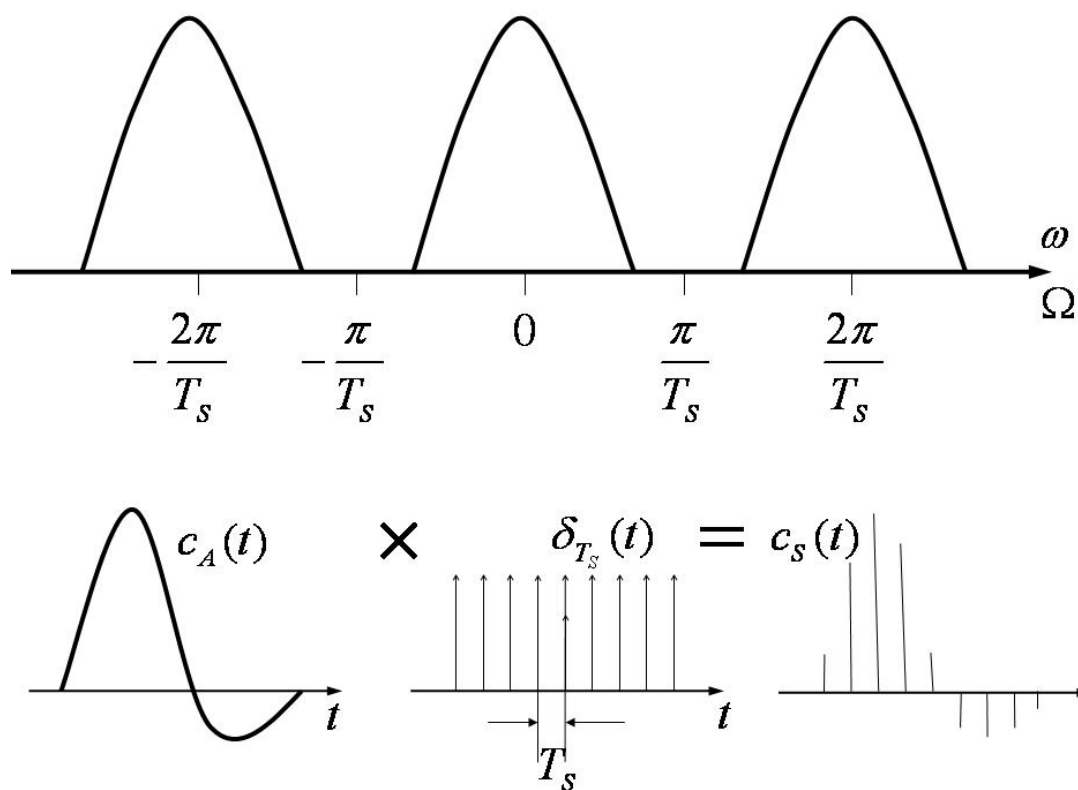
$$C(e^{i\omega}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_A(n T_s) e^{-in\omega} \quad (2.6.16)$$

όπου ω είναι το διάστημα δειγματοληψίας στον χώρο Fourier ή στον χώρο συχνοτήτων. Ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier $C(e^{i\omega})$

συνδέεται με τον συνεχή μετασχηματισμό Fourier, $C_A(i\Omega)$, με την παρακάτω σχέση που αποδεικνύεται στην συνέχεια

$$C(e^{i\omega}) = \frac{1}{T_s} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_A\left(\frac{i\omega}{T_s} + \frac{i2\pi k}{T_s}\right) \quad (2.6.17)$$

Δηλαδή ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier μιας διακριτής σειράς που παρήχθη από δειγματοληψία μιας συνεχούς συνάρτησης είναι ίσος με το άπειρο άθροισμα μετατοπισμένων συνεχών μετασχηματισμών Fourier όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα



Σχήμα 2.12 . Συσχέτιση διακριτού μετασχηματισμού Fourier με τον συνεχή μετασχηματισμό Fourier.

Η απόδειξη της Εξ. (2.6.17) πραγματοποιείται ως ακολούθως. Η διαδικασία δειγματοληψίας $c_s(t)$ της συνεχούς συνάρτησης $c_A(t)$ είναι

$$c_s(t) = c_A(t) \delta_{T_s}(t) = c_A(t) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT_s) \quad (2.6.18)$$

όπως φαίνεται στο Σχ. 2.12. Ο μετασχηματισμός Fourier της συνεχούς συνάρτησης $c_s(t)$ που προέρχεται από την δειγματοληψία είναι :

$$C_s(i\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} c_s(t) e^{-i\Omega t} dt \quad (2.6.19)$$

$$= \frac{1}{2p} \int_{-\infty}^{\infty} \left[c_A(t) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT_s) \right] e^{-i\Omega t} dt$$

Στην παραπάνω σχέση μπορούμε να εναλλάξουμε την σειρά ολοκλήρωσης και της άθροισης δηλαδή

$$C_s(i\Omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - nT_s) C_A(t) e^{-i\Omega t} dt \right] \quad (2.6.20)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_A(nT_s) e^{in\Omega T_s}$$

Συγκρίνοντας την παραπάνω σχέση Εξ. (2.6.20) με την Εξ. (2.6.16) βρίσκουμε ότι

$$C(e^{i\omega}) = C_s(i\Omega) \Big|_{\Omega=\omega/T_s} \quad (2.6.21)$$

Δηλαδή οι συντελεστές Fourier του δείγματος $C_s(i\Omega)$ βρίσκονται από τους συντελεστές Fourier της συνεχούς συνάρτησης $C(e^{i\omega})$ με την αντικατάσταση $\omega/T_s = \Omega$.

Αλλά η συνάρτηση $\delta_{T_s}(t)$ είναι περιοδική και εκφράζεται με σειρά Fourier ως ακολούθως

$$\delta_{T_s}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{-i\Omega_n t} \quad (2.6.22)$$

όπου

$$\Omega_n = \frac{\omega_n}{T_s} = \frac{2\pi n}{T_s} \quad \text{και}$$

$$a_n = \frac{1}{T_s} \int_{-T/2_s}^{T_s/2} \delta_{T_s}(t) e^{i\Omega_n t} dt = \frac{1}{T_s} e^{i\Omega_n t} = \frac{1}{T_s}, \forall n \quad (2.6.23)$$

και η σειρά c_s που προέρχεται από την δειγματοληψία είναι

$$c_s(t) = C_A(t) \delta_{T_s}(t) = c_A(t) \frac{1}{T_s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\Omega_n t} \quad (2.6.24)$$

$$= \frac{1}{T_s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_A(t) e^{-i\Omega_n t}$$

και οι αντίστοιχοι συντελεστές Fourier ορίζονται ως

$$\begin{aligned} C_s(i\Omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} c_s(t) e^{-i\Omega t} dt \\ &= \frac{1}{T_s} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_A(t) e^{i\Omega_n t} \right] e^{-i\Omega t} dt \\ &= \frac{1}{T_s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} c_A(t) e^{-i(\Omega+\Omega_n)t} dt \right] \end{aligned} \quad (2.6.25)$$

Ο k τάξης όρος του παραπάνω αθροίσματος είναι

$$\begin{aligned} C_{s,k}(i\Omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} c_A(t) e^{-i(\Omega+\Omega_k)t} dt \\ &= C_A(i\Omega + i\Omega_k) \end{aligned} \quad (2.6.26)$$

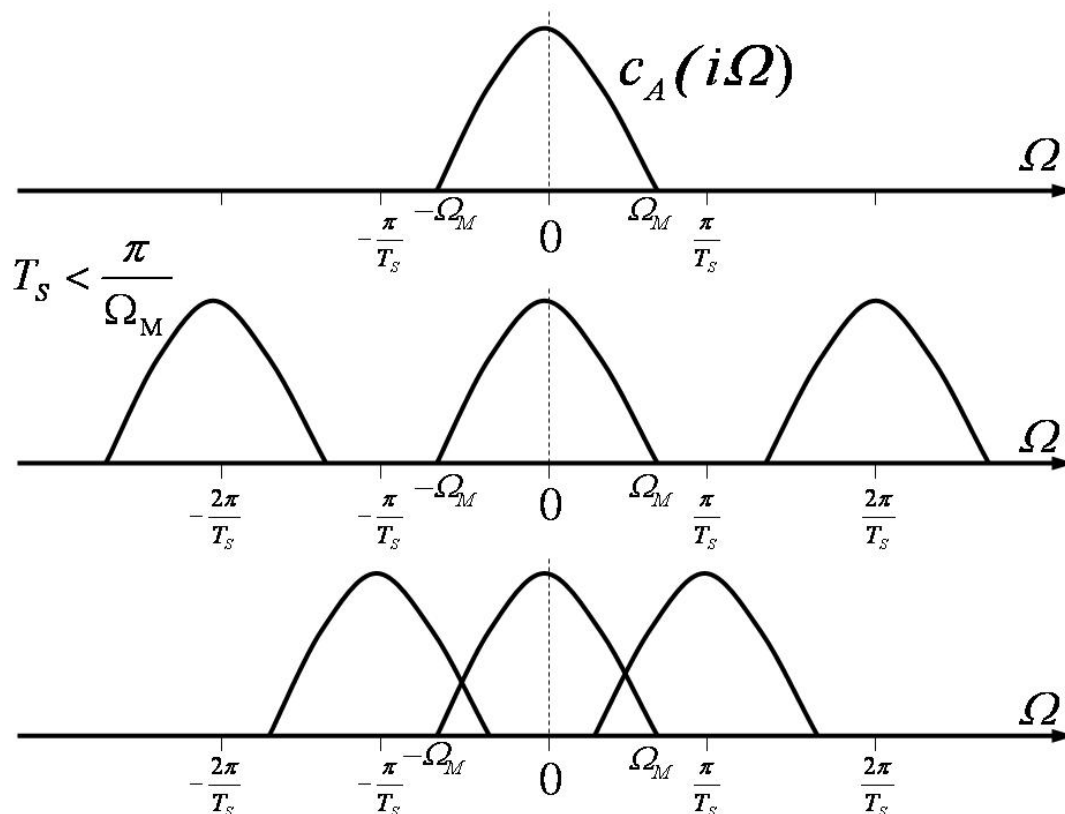
που ουσιαστικά είναι ο αρχικός συντελεστής Fourier της αρχικής συνάρτησης μετατοπισμένος κατά $-\Omega_k$. Δηλαδή οι συντελεστές Fourier της σειράς που προέρχεται από δειγματοληψία είναι

$$C_s(i\Omega) = \frac{1}{T_s} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_{s,k}(i\Omega) = \frac{1}{T_s} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_A \left(i\Omega + \frac{2\pi k}{T_s} \right) \quad (2.6.27)$$

που σημαίνει ότι οι συντελεστές $C_s(i\Omega)$ είναι ουσιαστικά περιοδικές συναρτήσεις με περίοδο $2\pi/T_s$ και γι' αυτό τον λόγο αποκαλείται περιοδική προέκταση των αναλογικών συντελεστών $C_A(i\Omega)$. Συνδυάζοντας της Εξ. (2.6.21) και (2.6.27) βρίσκουμε την Εξ. (2.6.17).

2.6.4 Το κριτήριο δειγματοληψίας Nyquist

Το κριτήριο Nyquist πιστοποιεί ότι η σειρά $c_A(nT_s)$ που προέρχεται από την δειγματοληψία της αναλογικής συνεχούς συνάρτησης $C_A(t)$ δεν παρουσιάζει απώλεια πληροφορίας. Με άλλα λόγια όταν ικανοποιείται το κριτήριο δειγματοληψίας του Nyquist τότε η πληροφορία που περιέχεται στην αρχική συνάρτηση διατηρείται στην διακριτή σειρά που προέρχεται από την διαδικασία δειγματοληψίας που περιγράψαμε παραπάνω.



Σχήμα 2.13 Αναπαράσταση της διαδικασίας δειγματοληψίας στον χώρο συχνοτήτων.

Η απώλεια πληροφορίας αποκλείεται όταν είναι δυνατόν να αναδομήσουμε την συνεχή συνάρτηση από τα δείγματα. Υποθέτουμε ότι η συνεχής συνάρτηση έχει συντελεστές Fourier μόνο σε ένα περιορισμένο τμήμα του χώρου συχνοτήτων δηλαδή

$$C_A(i\Omega) = 0 \quad \forall |\Omega| > \Omega_M \quad (2.6.28)$$

Δειγματοληψία της συνεχούς συνάρτησης $c_A(t)$ με συχνότητα $1/T_s$ έχει σαν αποτέλεσμα να βρίσκουμε τους συντελεστές Fourier $C_s(i\Omega)$ της διακριτής σειράς που όπως αναφέρθηκε αποτελούν περιοδική προέκταση των συνεχών συντελεστών $C_A(i\Omega)$ με περίοδο $2\pi/T_s$. Η διαδικασία δειγματοληψίας στον χώρο Fourier αναπαρίσταται στο Σχ. 2.13.

Είναι προφανές ότι στην περίπτωση που δεν υπάρχει αλληλοεπικάλυψη περιοδικών προεκτάσεων δηλαδή όταν $T_s < \pi/\Omega_M$ μπορούμε να αναδομήσουμε επ' ακριβώς τους συντελεστές $C_A(i\Omega)$ από τους αντίστοιχους διακριτούς $C_s(i\Omega)$. Στην περίπτωση όμως που η δειγματοληψία γίνεται με πιο χαμηλή συχνότητα $T_s > \pi/\Omega_M$ τότε ένα μέρος των διακριτών συντελεστών $C_s(i\Omega)$ στο διάστημα $-\pi/T_s \leq \Omega < \pi/T_s$ δεν είναι το ίδιο με τους διακριτούς συντελεστές $C_A(i\Omega)$. Η αλληλοεπικάλυψη που προκαλεί η δειγματοληψία χαμηλής συχνότητας συνεπάγεται την μη-αντιστρεπτή απώλεια πληροφορίας που ονομάζεται παραλλαγή (aliasing).

Στην παραπάνω ανάλυση η μέγιστη συχνότητα στην συνεχή συνάρτηση είναι $f_M = \Omega/2\pi$ και η συχνότητα δειγματοληψίας είναι $f_s = 1/T_s$ και αλληλοεπικάλυψη (aliasing) αποφεύγεται όταν

$$f_s > 2f_M \quad (2.6.29)$$

Δηλαδή το σφάλμα αλληλοεπικάλυψης αποφεύγεται όταν η μέγιστη συχνότητα f_M στην συνεχή συνάρτηση αναπαρίσταται στην διακριτή σειρά με τουλάχιστον δυο δείγματα. Η ελάχιστη συχνότητα δειγματοληψίας μιας συνεχούς συνάρτησης δηλαδή η συχνότητα f_s κάτω από την οποία συμβαίνει αλληλοεπικάλυψη στον φασματικό χώρο (aliasing) ονομάζεται ρυθμός Nyquist (Nyquist rate). Οι συντελεστές $C_A(i\Omega)$ βρίσκονται από τους συντελεστές του δείγματος με την εφαρμογή του τελεστή $H_1(i\Omega)$ που έχει την ιδιότητα

$$H_1(i\Omega) = \begin{cases} 1 & -\frac{\pi}{T_s} \leq \Omega < \frac{\pi}{T_s} \\ 0 & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (2.6.30)$$

ως ακολούθως

$$C_A(i\Omega) = \frac{1}{2\pi} H_1(i\Omega) C_s(i\Omega), \quad \forall \Omega \quad (2.6.31)$$

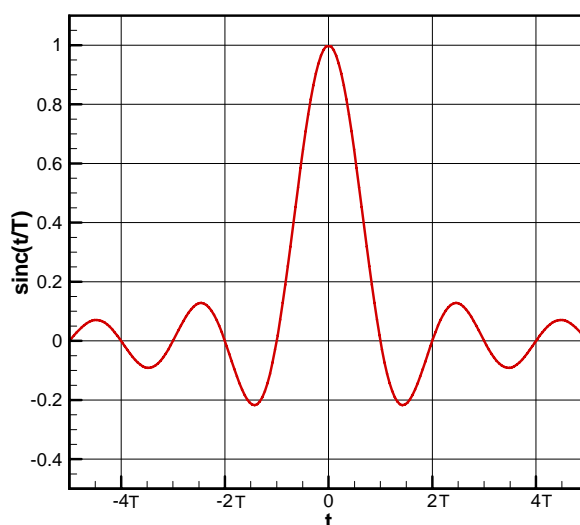
Αλλά πολλαπλασιασμός στον χώρο Fourier αντιστοιχεί με συνέλιξη στον φυσικό χώρο δηλαδή έχουμε

$$c_A(t) = \int_{-\infty}^{\infty} c_s(\tau) h_1(t-\tau) d\tau \quad (2.6.32)$$

όπου

$$\begin{aligned} h_1(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} H_1(i\Omega) e^{i\Omega t} d\Omega \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{T_s}}^{\frac{\pi}{T_s}} e^{i\Omega t} d\Omega = \frac{e^{i\pi t/T_s} - e^{-i\pi t/T_s}}{2i\pi t} \\ &= \frac{1}{T_s} \frac{\sin(\pi t/T_s)}{\pi t/T_s} \end{aligned}$$

Η γραφική παράσταση της συνάρτησης $Sinc(x) = \sin(\pi x)/\pi x$ δίνεται στο παρακάτω σχήμα



Σχήμα 2.14 Γραφική παράσταση της συνάρτησης $sinc(t/T)$.

Η συνάρτηση $\text{sinc}(t/T_s)$ είναι μηδέν για ακέραιες τιμές της συχνότητας δειγματοληψίας δηλαδή για $t = n T_s$ και για $t = 0$ βρίσκουμε

$$\begin{aligned} h_1(0) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{T_s} \frac{\sin(\pi t/T_s)}{\pi t/T_s} \\ &= \frac{1}{T_s} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{(\pi t/T_s) - \frac{1}{3!}(\pi t/T_s)^3}{\pi t/T_s} + \dots = \frac{1}{T_s} \end{aligned}$$

Συνεπώς η αρχική συνεχής συνάρτηση αναδομείται από τα δείγματα με την διαδικασία

$$\begin{aligned} c_A(t) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_s(n T_s) h_1(t - n T_s) \\ &= \frac{1}{T_s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_s(n T_s) \frac{\sin\left(\frac{\pi(t - n T_s)}{T_s}\right)}{\frac{\pi(t - n T_s)}{T_s}} \end{aligned}$$

2.7 Δυσδιάστατος μετασχηματισμός Fourier

Η επέκταση του μετασχηματισμού Fourier για συναρτήσεις που ορίζονται σε δυο διαστάσεις είναι επέκταση του ορισμού που δώσαμε για συνάρτηση μιας μεταβλητής. Ο δυσδιάστατος μετασχηματισμός Fourier που έχει μεγάλη εφαρμογή στην επεξεργασία εικόνας, την σεισμολογία και την μελέτη ταλάντωσης επιφανειών ορίζεται ως

$$\hat{f}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2) e^{-i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2)} dx_1 dx_2 \quad (2.7.1)$$

Το εκθετικό $e^{-i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2)}$ μπορεί επίσης να εκφρασθεί σε πολικές συντεταγμένες ως $e^{-i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2)} = e^{i\rho(x_1 \cos \vartheta + x_2 \sin \vartheta)}$ όπου $\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}$ και αναπαριστά ένα επίπεδο κύμα που διαδίδεται στην κατεύθυνση ϑ και

έχει συχνότητα Ω . Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier στις δυο διαστάσεις είναι

$$f(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega_1, \omega_2) e^{i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2)} d\omega_1 d\omega_2 \quad (2.7.2)$$

Παρακάτω συνοψίζονται μερικές βασικές ιδιότητες του μετασχηματισμού Fourier στις δυο διαστάσεις. Προφανώς οι ίδιες ιδιότητες ισχύουν και στην μια διάσταση.

i. 1) Ο μετασχηματισμός γινομένου στον χώρο συχνότητας στον φυσικό χώρο είναι συνέλιξη

$$\begin{aligned} \hat{g}(\omega_1, \omega_2) &= \hat{f}(\omega_1, \omega_2) \hat{h}(\omega_1, \omega_2) \\ g(x_1, x_2) &= f(x_1, x_2) * g(x_1, x_2) = \\ &= \iint f(y_1, y_2) h(x_1 - y_1, x_2 - y_2) dy_1 dy_2 \end{aligned} \quad (2.7.3)$$

i. 2) Σχέση του Parseval

$$\iint f(x_1, x_2) g^*(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \frac{1}{4\pi^2} \iint \hat{f}(\omega_1, \omega_2) \hat{g}^*(\omega_1, \omega_2) d\omega_1 d\omega_2 \quad (2.7.4)$$

Επιπλέον όταν $f = g$ βρίσκουμε την σχέση του Planchel

$$\iint |f(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 = \frac{1}{4\pi^2} \iint |\hat{f}(\omega_1, \omega_2)|^2 d\omega_1 d\omega_2 \quad (2.7.5)$$

Δηλαδή στην μια αλλά και στις δυο διαστάσεις ο μετασχηματισμός Fourier μιας συνάρτησης με πεπερασμένη ενέργεια έχει επίσης πεπερασμένη ενέργεια στον χώρο συχνότητας.

Επιπρόσθετα για τον μετασχηματισμό Fourier στις δυο διαστάσεις έχουμε τις παρακάτω ιδιότητες.

ii.1) όταν η συνάρτηση f είναι δυνατόν να διαχωριστεί δηλαδή να γραφεί υπό μορφή γινομένου.

$$f(x_1, x_2) = g(x_1) h(x_2) \quad (2.7.6)$$

τότε ο μετασχηματισμός Fourier στις δυο διαστάσεις είναι

$$\hat{f}(\omega_1, \omega_2) = \hat{g}(\omega_1) \hat{h}(\omega_2) \quad (2.7.7)$$

όπου \hat{g} και \hat{h} είναι οι μονοδιάστατοι μετασχηματισμοί Fourier.

ii.2) Στροφή κατά γωνία θ στον φυσικό χώρο

$$f_\theta(x_1, x_2) = f(x_1 \cos \theta - x_2 \sin \theta, x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta) \quad (2.7.8)$$

συνεπάγεται στροφή κατά $-\theta$ στον χώρο συχνοτήτων

$$\hat{f}_\theta(\omega_1, \omega_2) = \hat{f}(\omega_1 \cos \theta + \omega_2 \sin \theta, -\omega_1 \sin \theta + \omega_2 \cos \theta) \quad (2.7.9)$$

2.7.1 Δειγματοληψία στις δυο διαστάσεις

Οι εικόνες στην οθόνη του υπολογιστή και της ψηφιακής τηλεόρασης είναι ουσιαστικά δειγματοληψίες αναλογικών εικόνων πάνω σε ένα ορθογώνιο δίκτυο στοιχείων που ονομάζονται pixels. Ανάλογες δειγματοληψίες που περιγράφονται από συνεχείς συναρτήσεις στις δυο διαστάσεις απαντώνται σε μετρήσεις τύρβης, ταλαντώσεων κλπ. Έστω ότι τα διαστήματα δειγματοληψίας κατά μήκος των αξόνων x_1 και x_2 ενός ορθογώνιου δικτύου είναι T_1 και T_2 αντίστοιχα. Η διακριτή συνάρτηση $f_d(x_1, x_2)$ που προκύπτει από την δειγματοληψία της συνεχούς συνάρτησης $f(x_1, x_2)$ αναπαρίσταται ως ένα άπειρο άθροισμα δ συναρτήσεων που βρίσκονται στους κόμβους του πλέγματος.

$$f_d(x_1, x_2) = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} f(n_1 T_1, n_2 T_2) \delta(x_1 - n_1 T_1) \delta(x_2 - n_2 T_2) \quad (2.7.10)$$

Ο μετασχηματισμός Fourier του γινομένου των συναρτήσεων δ είναι

$$F\{\delta(x_1 - n_1 T_1) \delta(x_2 - n_2 T_2)\} = e^{-i(n_1 T_1 \omega_1 + n_2 T_2 \omega_2)}$$

και μετασχηματισμός Fourier της διακριτής συνάρτησης $f_d(x_1, x_2)$ είναι

$$\hat{f}_d(\omega_1, \omega_2) = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} f(n_1 T_1, n_2 T_2) e^{-i(n_1 T_1 \omega_1 + n_2 T_2 \omega_2)} \quad (2.7.11)$$

και έχει περίοδο $2\pi/T_1$ κατά μήκος του άξονα ω_1 και περίοδο $2\pi/T_2$ κατά μήκος του άξονα ω_2 και επίσης γράφεται

$$\hat{f}_d(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{T_1 T_2} \sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \hat{f}\left(\omega_1 - \frac{2k_1\pi}{T_1}, \omega_2 - \frac{2k_2\pi}{T_2}\right) \quad (2.7.12)$$

Όταν η συνάρτηση μετασχηματισμού f ορίζεται στο χωρίο μόνον στο χωρίο $[-\pi/T_1, \pi/T_1] \times [-\pi/T_2, \pi/T_2]$ τότε

$$f(x_1, x_2) = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} f(n_1 T_1, n_2 T_1) h_{T_1}(x_1 - n_1 T_1) h_{T_2}(x_2 - n_2 T_2) \quad (2.7.13)$$

όπου

$$h_T = \frac{\sin(\pi t/T)}{\pi t/T} \quad (2.7.14)$$

Η διακριτή σειρά Fourier στις δυο διαστάσεις ορίζεται ως ακολούθως

$$\hat{f}(k_1, k_2) = \sum_{n_1=0}^{N-1} \sum_{n_2=0}^{N-1} f(n_1, n_2) e^{-\frac{i2\pi}{N}(k_1 n_1 + k_2 n_2)}$$

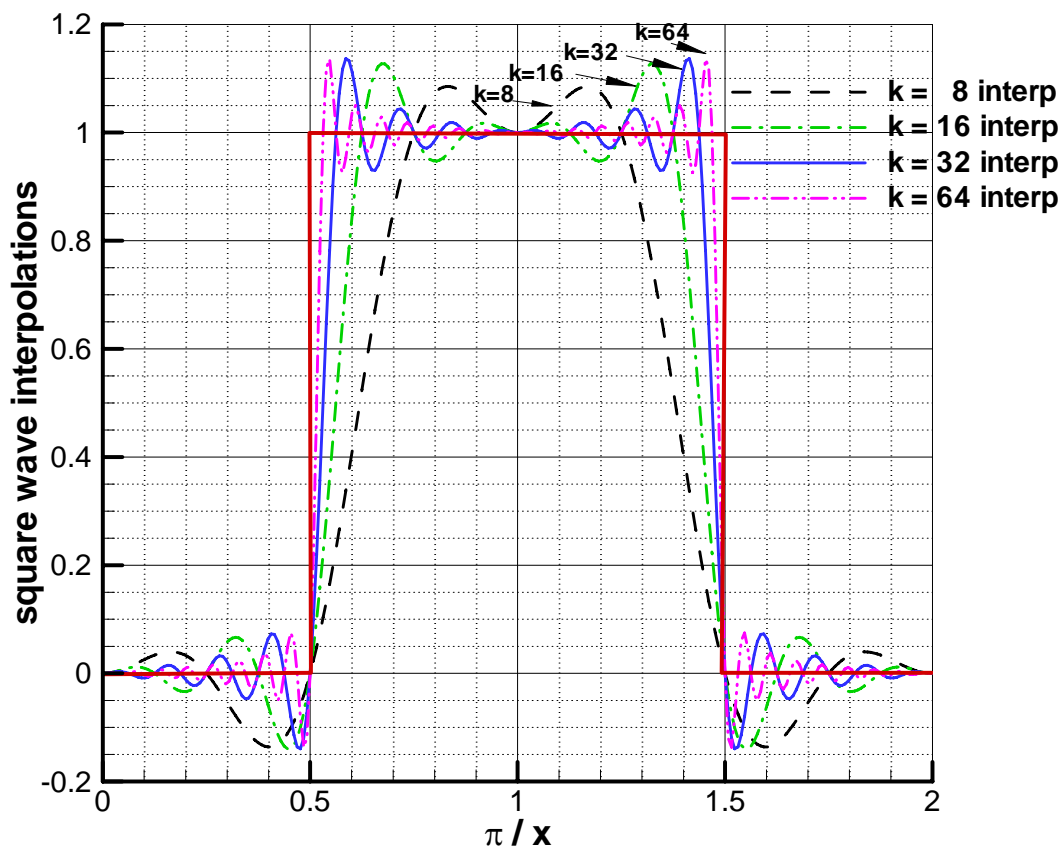
$$f(n_1, n_2) = \frac{1}{N^2} \sum_{k_1=0}^{N-1} \sum_{k_2=0}^{N-1} \hat{f}(k_1, k_2) e^{i\frac{2\pi}{N}(k_1 n_1 + k_2 n_2)}$$

όπου και πάλι πρέπει το μέγεθος του δείγματος να είναι τέτοιο ώστε να αποφεύγονται τα σφάλματα αλληλοεπικάλυψης όπως και στην μονοδιάστατη περίπτωση.

2.8 Το φαινόμενο Gibbs

Η χρήση των σειρών Fourier για την παρεμβολή ή αντικατάσταση δεδομένων ενδείκνυται όπως αναφέρθηκε για συναρτήσεις που είναι περιοδικές. Μεταξύ των περιοδικών συναρτήσεων περιλαμβάνονται και συναρτήσεις που παρουσιάζουν ασυνέχειες όπως $f(x) = |\sin x|$, στο διάστημα $-\pi < x < \pi$, $f(x) = |x|$ κλπ. Το φαινόμενο Gibbs αναφέρεται στην χαρακτηριστική ταλάντωση της πεπερασμένης σειράς Fourier που παρουσιάζεται στο σημείο ασυνέχειας.

Οι πεπερασμένες σειρές Fourier των Εξ. (2.6.11) και (2.6.13) παρουσιάζουν ταλαντώσεις που είναι έντονες στα άκρα του διαστήματος παρεμβολής. Οι αποκλίσεις που εμφανίζονται κατά την παρεμβολή απλών κυματομορφών όπως και $u(x) = 3/(5 - 4 \cos x)$ απεικονίζονται γραφικά στο παρακάτω σχήμα. Είναι φανερό ότι η ακρίβεια της παρεμβολής βελτιώνεται με την αύξηση των όρων της σειράς.



Σχήμα 2.14 Φαινόμενο Gibbs κατά την προσέγγιση με σειρά Fourier μιας ασυνεχούς περιοδικής συνάρτησης στο διάστημα $[0, 2\pi]$.

Η παρεμβολή όμως της κυματομορφής ορθογώνιας μορφής παρουσιάζει έντονα ταλαντευόμενη μορφή που δεν εξαλείφεται με την αύξηση των όρων της σειράς. Το μέγιστο εύρος της απόκλισης που βρίσκεται κοντά στα σημεία ασυνέχειας $x = \pi/2$ και $x = 3\pi/2$ της κυματομορφής που ορίζεται ως

$$u(x) = \begin{cases} 1 & \frac{\pi}{2} < x < \frac{3\pi}{2} \\ 0 & 0 \leq x \leq \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2} \leq x \leq 2\pi \end{cases}$$

Φαίνεται ότι τείνει σε ένα πεπερασμένο όριο καθώς οι όροι της σειράς αυξάνονται από 8, σε 16, σε 32, ή σε 64. Ταυτόχρονα παρατηρούμε ότι η μέγιστη απόκλιση τείνει προς τα σημεία ασυνέχειας καθώς ο αριθμός των όρων της σειράς αυξάνει και η διακριτή ικανότητα της παρεμβολής στον χώρο συχνότητας βελτιώνεται.

Η εξήγηση της παραπάνω ιδιόμορφης συμπεριφοράς παρεμβολής με σειρά Fourier ασυνεχών κυματομορφών εξηγείται ως :

Έστω ότι $P_N u$ είναι το πολυώνυμο παρεμβολής Fourier που είναι

$$P_N u = \sum_{|k| < \frac{N}{2}} \hat{u}_k e^{ikx}$$

τότε

$$\begin{aligned} P_N u(x) &= \sum_{|k| < \frac{N}{2}} \left[\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(y) e^{-iky} dy \right] e^{ikx} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\sum_{|k| < \frac{N}{2}} e^{ik(x-y)} \right] u(y) dy \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} D_N(x-y) u(y) dy \end{aligned}$$

όπου $D_N(\xi)$ είναι ο πυρήνας (kernel) της συνάρτησης d και ορίζεται ως

$$D_N(\xi) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{N/2} \cos k\xi = \begin{cases} \frac{\sin\left[\frac{(N+1)\xi}{2}\right]}{\xi} & \xi \neq 2\pi j \\ N+1 & \xi = 2\pi j \end{cases}$$

και ικανοποιεί την συνθήκη

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} D_N(\xi) d\xi = 1$$

ενώ αλλάζει πρόσημο στα σημεία $\xi_j = 2j\pi/(N+1)$

Θεωρούμε την απλή ασυνεχή συνάρτηση $\varphi(x)$ που ορίζεται ως

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq \pi \\ 1 & \pi \leq x < 2\pi \end{cases}$$

Τότε το πολυώνυμο παρεμβολής της συνάρτησης $\varphi(x)$ είναι

$$\begin{aligned} P_N \varphi(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{x-\pi}^x D_N(y) dy \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^x D_N(y) dy + \int_{-\pi}^0 D_N(y) dy + \int_{x-\pi}^{-\pi} D_N(y) dy \right] \\ &\qquad\qquad\qquad I_1 \qquad\qquad\qquad I_2 \qquad\qquad\qquad I_3 \end{aligned}$$

όταν η παρεμβολή δεν γίνεται για τιμές x κοντά στο σημείο ασυνέχειας που είναι $x_D = \pi$ η τιμή του ολοκληρώματος I_3 είναι πολύ μικρή όταν έχουμε αρκετά σημεία N , και η τιμή του ολοκληρώματος I_2 είναι π , δηλαδή

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_N \varphi(x) \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \int_0^x D_N(y) dy$$

όταν h τιμή του ολοκληρώματος στο δεξί μέλος είναι περίπου $1/2$ μακριά από την συνέχεια και ή το πολυώνυμο παρεμβολής Fourier έχει τιμή 1. Αλλά κοντά στην συνέχεια η συνάρτηση D_N μηδενίζεται στα σημεία

$$\xi_j = 2\pi j/(N+1) \quad \text{και} \quad \text{το} \quad \text{ολοκλήρωμα} \quad \frac{1}{2\pi} \int_0^x D_N(y) dy \quad \text{έχει}$$

εναλλασσόμενα μέγιστα και ελάχιστα που προκαλούν την έντονη ταλάντωση κοντά στο σημείο ασυνέχειας .

2.8.1 Το φαινόμενο Runge

Η προβληματική συμπεριφορά στην παρεμβολή ασυνεχών συναρτήσεων δεν περιορίζεται μόνο στην παρεμβολή με σειρές Fourier αλλά απαντάται και στην παρεμβολή με άλλες πολυωνυμικές προσεγγίσεις. Η προβληματική συμπεριφορά των πολυωνύμων παρεμβολής απαντάται όμως και σε παρεμβολές συνεχών συναρτήσεων με πεπερασμένες παραγώγους. Η προβληματική συμπεριφορά των πολυωνύμων παρεμβολής για ίσα κατανεμημένα σημεία παρεμβολής $x_j = j\Delta x$ παρατηρήθηκε για πρώτη φορά από τον Runge και έκτοτε ονομάζεται φαινόμενο Runge. Το φαινόμενο Runge παρουσιάζεται στην πολυωνυμική παρεμβολή πολλών συνεχών συναρτήσεων. Θεωρούμε για παράδειγμα την συνάρτηση

$$f(x) = \frac{1}{1 + (ax)^2}$$

που είναι συνεχής και έχει πεπερασμένες παραγώγους

$$f'(x) = -\frac{2a^2}{[1 + (ax)^2]^2}$$

$$f''(x) = \frac{(1 + (5a)^2) - 2a^2(1 + (ax)^2)^2}{(1 + (ax)^2)^4}$$

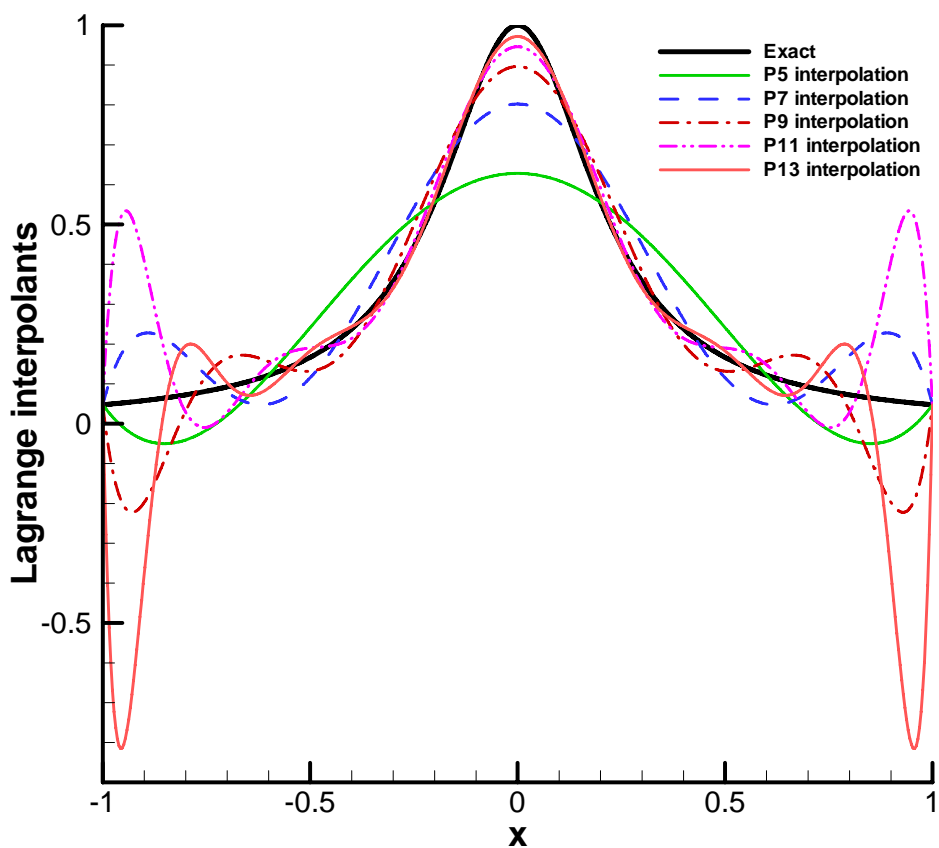
Βρίσκουμε παρεμβολές της συνάρτησης $f(x) = [1 + 25x^2]^{-1}$ για $a = 5$ στο διάστημα $[-1, 1]$ σε ισαπέχοντα σημεία $x_j = -1 + 2j/N$ $j = 0, 1, \dots, N$ με πολυώνυμο $P_n(x)$ βαθμού $n < N$. Παρατηρούμε ότι η παρεμβολή παρουσιάζει ταλαντώσεις στα άκρα του διαστήματος -1 . Ουσιαστικά βρίσκουμε ότι το σφάλμα παρεμβολής αυξάνεται συνεχώς όσο ο βαθμός που πολυωνύμου μεγαλώνει. Πολυώνυμο παρεμβολής με αυξανόμενο βαθμό συγκρίνονται με την αρχική συνάρτηση στο παρακάτω σχήμα .

Είναι φανερό ότι η αύξηση του βαθμού παρεμβολής δεν βελτιώνει την ποιότητα προσέγγισης.

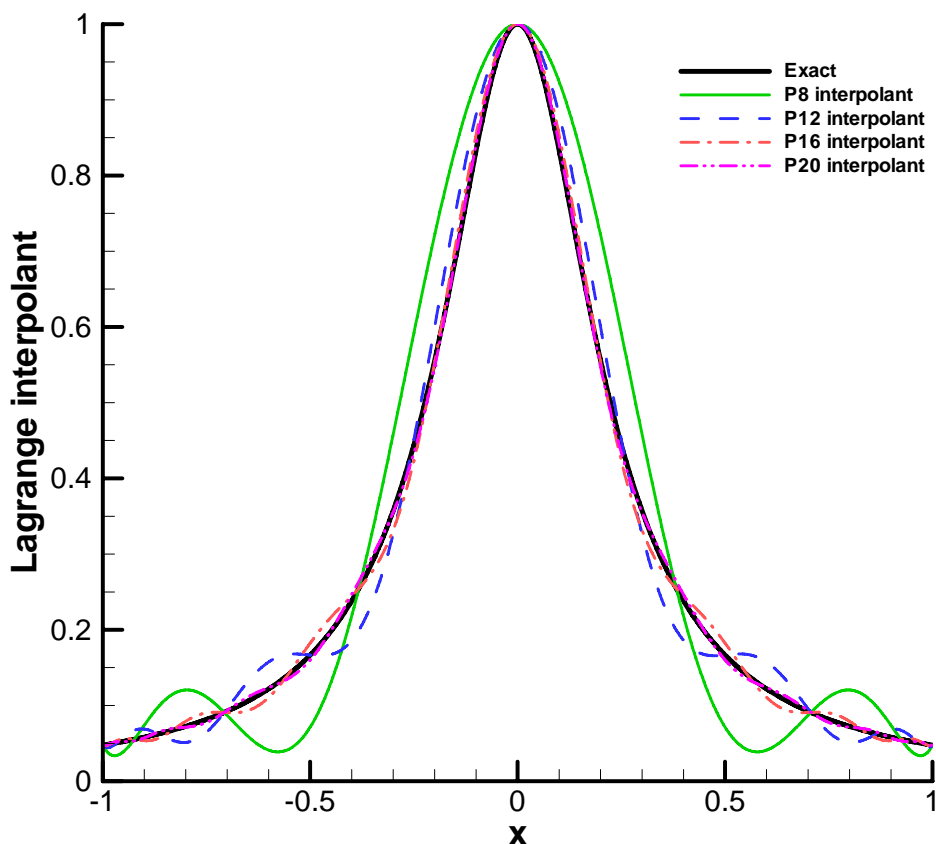
Η αιτία του φαινομένου Runge είναι ότι το σφάλμα πολυωνυμικής προσέγγισης N τάξης εξαρτάται από την τιμή της N -τάξης παραγώγου. Οι τιμές των παραγώγων στο άκρο $x_N = 1$ είναι

$$f'(1) = 0.0740, \quad f''(1) = 0.2105 \dots$$

Το μέγεθος των παραγώγων μεγαλύτερης τάξης είναι ακόμα μεγαλύτερο σαν αποτέλεσμα το σφάλμα συνεχώς μεγαλώνει με την αύξηση του βαθμού του πολυωνύμου παρεμβολής.



Σχήμα 2.15 Φαινόμενο Runge σε παρεμβολή με πολυώνυμο Lagrange P^n και η αποφυγή του όταν χρησιμοποιούνται τα σημεία παρεμβολής είναι οι ρίζες των πολυωνύμων Chebyshev.



Σχήμα 2.16 Αποφυγή του φαινόμνο Runge σε παρεμβολή με πολυώνυμα Lagrange P^n χρησιμοποιώντας ως σημεία παρεμβολής τις ρίζες των πολυωνύμων Chebyshev.

Η ταλάντωση που παρατηρείται για ισαπέχοντα σημεία μειώνεται όταν χρησιμοποιήσουμε σημεία μειώνεται όταν χρησιμοποιήσουμε σημεία (δηλαδή τις ρίζες των πολυωνύμων Chebyshev) ή σημεία Gauss (τα οποία θα παρουσιάσουμε σε παρακάτω κεφάλαιο). Με την χρήση σημείων Gauss ή Chebyshev το σφάλμα μειώνεται με την αύξηση του βαθμού πολυωνύμου παρεμβολής. Το φαινόμενο Runge απαλείφεται όταν αντί για πολυώνυμα παρεμβολής χρησιμοποιήσουμε splines παρεμβολής που χρησιμοποιεί πολυωνυμική παρεμβολή τμηματικά στον χώρο παρεμβολής. Η παρεμβολή με splines θα παρουσιαστεί στο επόμενο κεφάλαιο.

2.9 Προσέγγιση Ελάχιστων τετραγώνων

Στα προηγούμενα κεφάλαια παρουσιάστηκαν μέθοδοι προσδιορισμού πολυωνύμων παρεμβολής τα οποία προσεγγίζουν μια άγνωστη συνάρτηση $f_i = f(x_j)$ που υποτίθεται ότι ικανοποιούν ένα πεπερασμένο σύνολο δεδομένων. Τα πολυώνυμα αυτά έχουν την ιδιότητα ότι συμφωνούν επ' ακριβώς με τις διακριτές τιμές της άγνωστης συνάρτησης f_j στα δεδομένα σημεία x_j . Τα πολυώνυμα παρεμβολής μπορεί να είναι αλγεβρικά, τριγωνομετρικά (σειρές Fourier), ή ακόμα ειδικής μορφής όπως τα πολυώνυμα Chebyshev και άλλα που θα εξετάσουμε παρακάτω.

Τα πολυώνυμα παρεμβολής σχηματίζονται είτε παίρνοντας υπ' όψη όλες τις διακριτές τιμές (δες για παράδειγμα τις σειρές Fourier) ή υποσύνολα των διακριτών τιμών $f(x_j)$ όπως είναι τα πολυώνυμα Lagrange, οι καμπύλες Bezier, και οι καμπύλες spline που θα παρουσιάσουμε σε επόμενο κεφάλαιο. Έχουμε παρατηρήσει ήδη, ότι η χρήση όλων των διακριτών τιμών της συνάρτησης για την δημιουργία ταλάντωσης στην παρεμβολή (δες φαινόμενο Gibbs και φαινόμενο Runge). Επί πλέον όταν οι διακριτές τιμές της άγνωστης συνάρτησης $f(x_j)$ προέρχονται από παρατηρήσεις ή μετρήσεις που η αξιοπιστία τους δεν είναι πολύ μεγάλη δεν έχει ιδιαίτερο νόημα να προσπαθήσουμε να βρούμε κάποιο πολυώνυμο το οποίο να προσεγγίζει επ' ακριβώς την άγνωστη συνάρτηση μόνο στα γνωστά διακριτά σημεία $f(x_j)$. Το πολυώνυμο αυτό κατά πάσα πιθανότητα θα εμφανίζει ταλαντώσεις που δεν ανταποκρίνονται στην συνάρτηση που προσπαθούμε να προσεγγίσουμε. Σαν αποτέλεσμα η χρήση αυτού του πολυωνύμου για τον υπολογισμό παραγώγων μπορεί να εισάγει μεγάλο σφάλμα στον υπολογισμό.

Η μέθοδος παρεμβολής ελάχιστων τετραγώνων απαλείφει τις δυσκολίες που αναφέραμε προηγουμένως και χρησιμοποιείται ευρέως όχι μόνο στην αριθμητική ανάλυση και γενικά στις αριθμητικές μεθόδους αλλά και για την παρουσίαση και κατανόηση πειραματικών μετρήσεων. Οι μέθοδοι παρεμβολής με πολυώνυμα προσδιορίζουν ένα πολυώνυμο $p(x)$ βαθμού n που προσεγγίζει μια άγνωστη συνάρτηση $f(x)$ έτσι ώστε οι τιμές του πολυωνύμου $p(x_j)$, $j=0, \dots, n$ σε $n+1$ σημεία συμφωνούν με τις τιμές $f(x_j)$ της άγνωστης συνάρτησης που θέλουμε να προσεγγίσουμε. Η μέθοδος ελάχιστων τετραγώνων προσπαθεί να περιορίσει ένα πολυώνυμο $p(x)$ το οποίο συμφωνεί όσο το δυνατόν

καλύτερα με την συνάρτηση $f(x)$ χωρίς κατ' ανάγκη να διέρχεται από τα σημεία $f(x)$ χωρίς κατ' ανάγκη να διέρχεται από τα σημεία $f(x_j)$. Η προσέγγιση αυτή έχει γενικά την μορφή

$$F(x) \approx \sum_{k=0}^n \alpha_k \varphi_k(x) \equiv p(x) \quad (2.9.1)$$

όπου $\varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x)$ είναι $n+1$ συναρτήσεις που πρέπει να επιλέξουμε. Προσέγγιση με αλγεβρικά πολυώνυμα επιτυγχάνεται παραδείγματος χάριν όταν επιλέξουμε $\varphi_0 = 1, \varphi_1 = x, \dots, \varphi_n = x^n$. Υποθέτουμε ότι υπάρχουν προκαθορισμένες συναρτήσεις $w(x)$ που έχουν θετική τιμή στο πεδίο ορισμού D

$$w(x) \geq 0 \quad (2.9.2)$$

και ορίζουμε το υπόλοιπο της προσέγγισης

$$R(x) = f(x) - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x) \equiv f(x) - p(x) \quad (2.9.3)$$

Η βέλτιστη προσέγγιση με την έννοια των ελάχιστων τετραγώνων ορίζεται εκείνη που προσδιορίζει τους συντελεστές με τέτοιο τρόπο ώστε η συνολική απόκλιση του γινομένου τετραγωνικών διαφορών $w(x)R^2(x)$ στο πεδίο ορισμού D είναι όσο το δυνατόν μικρότερη. Επιθυμούμε την ελαχιστοποίηση.

$$\{wR^2\} \equiv \left\{ w \left[f - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k \right]^2 \right\} = \min \quad (2.9.4)$$

δηλαδή απαιτείται

$$\frac{\partial}{\partial a_\varphi} \left\{ w \left[f - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k \right]^2 \right\} = 0 \quad \varphi = 0, 1, \dots, n \quad (2.9.5)$$

ή

$$\sum_{k=0}^n a_k \{w \varphi_q \varphi_k\} = w \varphi_q f \quad q=0,1,\dots,n \quad (2.9.6)$$

Έχουμε λοιπόν ένα σύστημα $n+1$ γραμμικών εξισώσεων ως προς τους $n+1$ άγνωστους συντελεστές a_0, a_1, \dots, a_n που ονομάζονται κανονικές εξισώσεις (normal equations) του προβλήματος ελάχιστων τετραγώνων.

Η παραπάνω γενική προσέγγιση στην μέθοδο ελάχιστων τετραγώνων εφαρμόζεται παρακάτω στην περίπτωση που έχουμε ένα σύνολο $N+1$ διακριτών σημείων x_0, x_1, \dots, x_N όπου $N \geq n$ όπου ισχύει η προσέγγιση

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x) \quad (2.9.7)$$

που είναι τέτοια ώστε να ελαχιστοποιείται το μέσο σφάλμα τετραγωνικών αποκλίσεων πολλαπλασιασμένο με συναρτήσεις βάρους, δηλαδή απαιτείται

$$\sum_{i=0}^N w(x_i) \left[f(x_i) - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_i) \right]^2 = \min \quad (2.9.8)$$

Η παραπάνω σχέση οδηγεί στο σύστημα των $n+1$ κανονικών εξισώσεων όπως στις Εξ. (2.9.5) και (2.9.6) που στην περίπτωση διακριτών δεδομένων είναι

$$\begin{aligned} a_0 \sum_{j=0}^N w(x_j) \varphi_0(x_j) \varphi_0(x_j) + a_1 \sum_{j=0}^N w(x_j) \varphi_0(x_j) \varphi_1(x_j) + \\ \dots + a_n \sum_{j=0}^N w(x_j) \varphi_n(x_j) \varphi_n(x_j) = \\ = \sum_{j=0}^N w(x_j) \varphi_q(x_j) f(x_j) \quad q=0, 1, \dots, n \end{aligned} \quad (2.9.9)$$

Οι κανονικές εξισώσεις μπορεί να βρεθούν και με τον παρακάτω τρόπο. Πρώτα καταρτίζεται το σύστημα $N+1$ εξισώσεων που επιβάλλει την προσέγγιση της Εξ. (2.9.7) να ισχύει στα $N+1$ διακριτά σημεία $x_j, j=0,1,\dots,N, N \geq n$.

$$a_0 \varphi_0(x_0) + a_1 \varphi_1(x_0) + \dots + a_n \varphi_n(x_0) = f(x_0)$$

$$a_0 \varphi_0(x_1) + a_1 \varphi_1(x_1) + \dots + a_n \varphi_n(x_1) = f(x_1)$$

.....

(2.9.10)

$$a_0 \varphi_0(x_q) + a_1 \varphi_1(x_q) + \dots + a_n \varphi_n(x_q) = f(x_q)$$

.....

$$a_0 \varphi_0(x_N) + a_1 \varphi_1(x_N) + \dots + a_n \varphi_n(x_N) = f(x_N)$$

Η q^{th} κανονική εξίσωση βρίσκεται από το παραπάνω σύστημα γραμμικών εξισώσεων για τους άγνωστους a_0, \dots, a_n πολλαπλασιάζοντας την κάθε εξίσωση με a_q και με την συνάρτηση βάρους $w(x_q)$ που αντιστοιχεί σε αυτήν την εξίσωση και αθροίζοντας όλες τις εξισώσεις. Οι συναρτήσεις βάρους $w(x_j)$ μπορεί να θεωρηθούν μονάδα οπότε στην προσέγγιση ελάχιστων τετραγώνων όλα τα δεδομένα $f(x_j)$ συμμετέχουν με τον ίδιο συντελεστή βάρους.

Η μέθοδος προσέγγισης ελάχιστων τετραγώνων θα εφαρμοσθεί παρακάτω για απλές περιπτώσεις γραμμικής ($p(x) = ax + b$) και δεύτερου βαθμού (παραβολικής $p(x) = ax^2 + bx + c$) παρεμβολής ελάχιστων τετραγώνων.

Παράδειγμα γραμμικής ελάχιστων τετραγώνων.

Έστω ότι έχουμε τον παρακάτω πίνακα τιμών

x_i	0	1	2	3	4
$F(x_j)$	1	4.5	5.5	11.5	10.0

και έστω ότι επιθυμούμε να βρούμε την γραμμική προσέγγιση ελάχιστων τετραγώνων για βάρη $w(x) = 1$.

$$f(x) \approx a_0 + a_1 x$$

όπου οι συναρτήσεις βάσης είναι $\varphi_0(x) = 1$ και $\varphi_1(x) = x$ οπότε έχουμε

$$a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot x_0 = f(x_0) = 1$$

$$a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot x_1 = f(x_1) = 4.5$$

$$a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot x_2 = f(x_2) = 5.5$$

$$a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot x_3 = f(x_3) = 11.5$$

$$a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot x_4 = f(x_4) = 10.0$$

ή

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4.5 \\ 5.5 \\ 11.5 \\ 10.0 \end{bmatrix}$$

σχηματίζουμε το παρακάτω επαυξημένο μητρώο προσθέτοντας την στήλη των τιμών στο μητρώο συντελεστών.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 4.5 \\ 1 & 2 & 5.5 \\ 1 & 3 & 11.5 \\ 1 & 4 & 10.0 \end{bmatrix}$$

Η πρώτη κανονική εξίσωση βρίσκεται προσθέτοντας όλες τις στήλες του επαυξημένου μητρώου και είναι

$$5\alpha_0 + 10\alpha_1 = 32.5$$

και η δεύτερη βρίσκεται όταν πολλαπλασιάσουμε όλες τις γραμμές με το στοιχείο της δεύτερης στήλης και προσθέσουμε όλες τις στήλες, δηλαδή

$$\begin{bmatrix} 1 \times 0 & 0 \times 0 & 1 \times 0 \\ 1 \times 1 & 1 \times 1 & 4.5 \times 1 \\ 1 \times 2 & 2 \times 2 & 5.5 \times 2 \\ 1 \times 3 & 3 \times 3 & 11.5 \times 3 \\ 1 \times 4 & 4 \times 4 & 10 \times 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 4.5 \\ 2 & 4 & 11 \\ 3 & 9 & 34.5 \\ 4 & 16 & 40 \\ 10 & 30 & 90 \end{bmatrix}$$

συνεπώς η δεύτερη εξίσωση είναι

$$10\alpha_0 + 30\alpha_1 = 90$$

ή

$$\alpha_0 + 3\alpha_1 = 9$$

και η λύση είναι $\alpha_0 = 1.5$, $\alpha_1 = 2.5$, δηλαδή η γραμμική παρεμβολή ελάχιστων τετραγώνων είναι

$$f(x \approx) p^1(x) = 1.5 + 2.5x$$

Η γραμμική παρεμβολή ελάχιστων τετραγώνων και το πολυώνυμο Lagrange 4^{ου} βαθμού που διέρχεται από τα σημεία x_j , $j = 0, 1, 2, 3, 4$ φαίνονται στο παρακάτω σχήμα παρόμοια η προσέγγιση ελάχιστων τετραγώνων με τετραγωνικό πολυώνυμο είναι

$$f(x) \approx a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

και οι συντελεστές είναι $\alpha_0 = 1.8433$, $\alpha_1 = 2.405$, $\alpha_2 = -0.02555$

Παράδειγμα τετραγωνικής παρεμβολής ελάχιστων τετραγώνων. Έστω ότι έχουμε τον παρακάτω πίνακα τιμών.

x_j	0	1	2	3
$f(x_j)$	6	0	0	55

Η τετραγωνική (παραβολική) παρεμβολή για μοναδιαία βάρη είναι

$$f(x) \approx a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

συνεπώς το επαυξημένο μητρώο είναι

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \\ 55 \end{bmatrix}$$

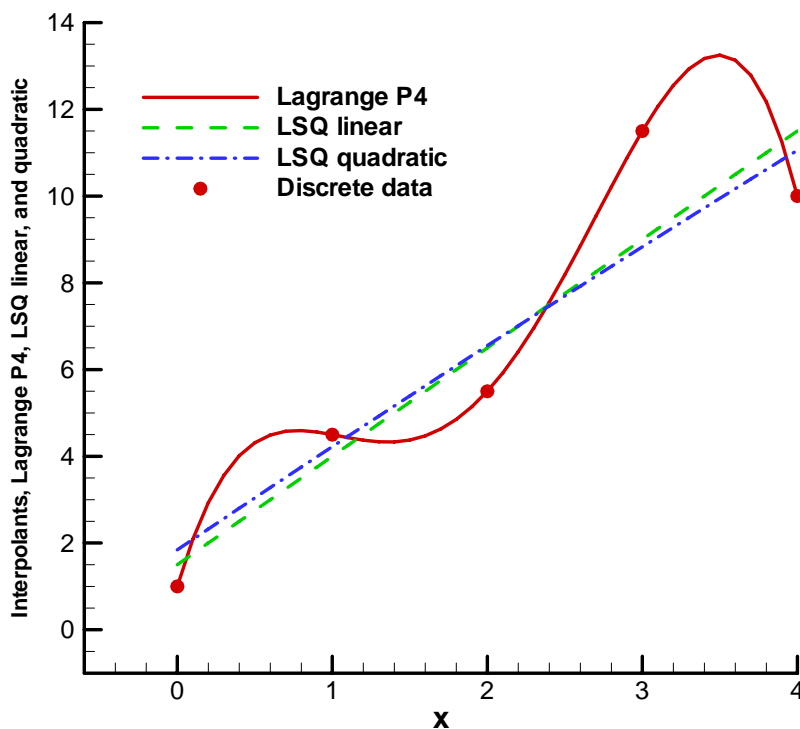
και οι κανονικές εξισώσεις που προκύπτουν όπως και στην γραμμική παρεμβολή είναι

$$4\alpha_0 + 6\alpha_1 + 14\alpha_2 = 61$$

$$6\alpha_0 + 14\alpha_1 + 36\alpha_2 = 165$$

$$14\alpha_0 + 37\alpha_1 + 98\alpha_2 = 495$$

και έχουν λύση $\alpha_0 = 39.5$, $\alpha_1 = -124.2$, $\alpha_2 = 46.3$ το τετραγωνικό πολυώνυμο παρεμβολής και το πολυώνυμο Lagrange 3 βαθμού απεικονίζονται στο παρακάτω σχήμα



Σχήμα 2.16 Παρεμβολή ET και παρεμβολή Lagrange.