Metody Numeryczne – Zadanie Dodatkowe III

Interpolacja SPLINE stopnia drugiego (wstęp teoretyczny)

Wstęp

Tematem tego zadania jest interpolacja przy użyciu krzywych sklejanych stopnia drugiego (dalej zwane SPLINE-2). Wstęp teoretyczny obejmuje wyprowadzenie wzorów na krzywe SPLINE-2. Dołączona do tego implementacja praktyczna w programie Mathcad zawiera dodatkową analizę tej metody interpolacji. Zadanie to stanowi uzupełnienie sprawozdania II – [3]. Ponieważ poniższe wyprowadzenia są całkowicie samodzielne, nie odwołują się zbyt często do źródeł.

Szkic części teoretycznej

- Wprowadzenie do interpolacji krzywymi sklejanymi
- SPLINE-2
    - Równanie krzywej SPLINE-2
    - Rozwiązywanie układu równań krzywej SPLINE-2
    - Dobór węzłów interpolacji i faktoryzacja LU
- Wyprowadzenie wzorów ogólnych dla krzywych SPLINE-2
- Problem doboru ostatniej pochodnej
- Wnioski praktyczne

Wprowadzenie do interpolacji krzywymi sklejanymi

Sprawozdanie [3] dość skrótowo omawiało temat interpolacji krzywymi sklejanymi, dlatego należy wpierw dokonać małego uzupełnienia. Krzywe sklejane (SPLINE) stopnia n-tego powstają przez podzielenie funkcji interpolowanej na przedziały (za pomocą węzłów interpolacji), a następnie przybliżenie każdego przedziału osobnym wielomianem stopnia n-tego. Dodatkowo wymaga się, by tak uzyskana krzywa sklejana jako cała funkcja była klasy C_{n-1} na całym interpolowanym przedziale (tj. jest w tym przedziale ciągła i posiada na nim ciągłe pochodne stopni od 1-szego do $n-1$).

$$S_n(x) = \begin{cases} W_0(x), & \text{dla } x \le x_1 \\ W_1(x), & \text{dla } x > x_1 \wedge x \le x_2 \\ W_2(x), & \text{dla } x > x_2 \wedge x \le x_3 \\ \dots & \\ W_{k-1}(x), & \text{dla } x > x_{k-1} \end{cases} \quad (1)$$

$$S_n(x) \in C_{n-1} \quad (2)$$

Wzór (1) opisuje krzywą sklejaną stopnia n z wartościami określonymi na przedziale $(-\infty;\infty)$. Wielomiany $W_i(x), i=0,1,\dots,k-1$ są stopnia n. Krzywa ta interpoluje funkcję o k węzłach interpolacji $x_i, i=0,1,\dots,k$.

Tak zdefiniowane krzywe SPLINE pozwalają uzyskać dobre wizualnie i praktycznie przybliżenie funkcji jednocześnie unikając tzw. efektu Rungego ([3]) występującego przy interpolowaniu całej funkcji jednym wielomianem, a związanego z dużymi oscylacjami wielomianów wysokiego stopnia na krańcach przedziału.

Powszechnie stosuje się krzywe SPLINE-1 (*linear SPLINE*) i SPLINE-3 (*cubic SPLINE*).

SPLINE-2

Równanie krzywej SPLINE-2

Zgodnie z wcześniejszymi rozważaniami, krzywe sklejane stopnia drugiego muszą spełniać następujące warunki:

- Cała SPLINE jako funkcja jest ciągła na przedziale interpolacji
- Cała SPLINE jako funkcja posiada pierwszą pochodną ciągłą na przedziale interpolacji

Wielomian $W_i(x)$ dla SPLINE-2 wygląda następująco:

$$W_i(x)=a_i(x-x_i)^2+b_i(x-x_i)+c_i \quad (3)$$

Zauważmy, że wielomiany dowolnego stopnia są sumą jednomianów (które są ciągłe), więc są ciągłe w całej swojej dziedzinie. Pochodne wielomianu również są wielomianami, więc także są ciągłe. Wynika z tego, że przy budowie krzywej sklejanej wystarczy rozpatrzeć jedynie jej ciągłość na punktach złączenia (na krańcach przedziałów interpolacji). Dlatego warunki zdefiniowane na początku przyjmują postać (na podstawie definicji ciągłości funkcji w punkcie):

$$\begin{aligned}
&\lim_{x\to x_i-0} W_{i-1}(x)=\lim_{x\to x_i+0} W_i(x)\\
&\lim_{x\to x_i-0} W_{i-1}^{(1)}(x)=\lim_{x\to x_i+0} W_i^{(1)}(x)\\
&i=1,2,\dots,k-1 \qquad (4)
\end{aligned}$$

Innymi słowy, wymagamy, by wielomiany opisujące sąsiednie przedziały przyjmowały te same wartości na wspólnym końcu ich przedziału oraz by ich pochodne miały w tym punkcie tą samą wartość.

Wielomian zdefiniowany zgodnie ze wzorem (3) $W_i(x)$ przyjmuje w punkcie x_i wartość c_i. Ponieważ x_i jest węzłem interpolacji, to aby uczynić zadość warunkom (4) wielomian ten musi przyjmować w tym punkcie wartość równą $f(x_i)$, gdzie $f(x)$ to interpolowana funkcja. Wynika stąd wprost, że

$$W_i(x) = a_i(x - x_i)^2 + b_i(x - x_i) + f(x_i) \quad (5)$$

Pierwsza pochodna wielomianu wynosi zatem:

$$W_i^{(1)}(x) = 2a_i(x - x_i) + b_i \quad (6)$$

W celu stworzenia krzywej SPLINE-2 musimy określić $2(k-1)$ dodatkowych współczynników: $a_0, a_1, \ldots, a_{k-1}$ oraz $b_0, b_1, \ldots, b_{k-1}$. Na podstawie (4), (5) i (6) możemy zatem wypisać $2(k-2)$ równań wymuszających ciągłość SPLINE i pierwszej pochodnej SPLINE na wewnętrznych węzłach (których jest dokładnie $k-2$). Równania te to:

$$\begin{cases} a_i(x_{i+1} - x_i)^2 + b_i(x_{i+1} - x_i) + f(x_i) = a_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1})^2 + b_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1}) + f(x_{i+1}) \\ 2a_i(x_{i+1} - x_i) + b_i = 2a_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1}) + b_{i+1} \end{cases} \quad (7)$$

Dla $i = 0, 2, \ldots, k-2$. Oznaczając dla uproszczenia odległość sąsiednich węzłów interpolacji na osi x jako $t_i = (x_{i+1} - x_i)$ Układ (7) możemy szybko przekształcić do:

$$\begin{cases} a_i t_i^{\,2} + b_i t_i = f(x_{i+1}) - f(x_i) \\ 2a_i t_i + b_i - b_{i+1} = 0 \end{cases} \quad (8)$$

Zapiszmy nasze równania w postaci macierzowej $Ar = B$, gdzie macierz wyników r ma postać

$$r = \begin{bmatrix} r_0 & r_1 & \ldots & r_{2(k-1)} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & a_1 & b_1 & \ldots & a_{k-1} & b_{k-1} \end{bmatrix}^T \quad (9)$$

Można zauważyć, że fragment macierzy współczynników A związany z równaniem (8) dla i-tego wielomianu, oznaczony dalej jako $A^{[i]}$, wygląda następująco:

$$A^{[i]} = \begin{bmatrix} \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & t_i^{\,2} & t_i & 0 & 0 & \ldots \\ \ldots & 2t_i & 1 & 0 & -1 & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{bmatrix} \quad (10)$$

A fragment macierzy wyrazów wolnych $B^{[i]}$:

$$B^{[i]} = \begin{bmatrix} \vdots \\ f(x_{i+1}) - f(x_i) \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (11)$$

Przed przedstawieniem ostatecznej postaci równania macierzowego dla krzywej SPLINE-2 należy zająć się jeszcze problemem brakujących informacji. Z (8) otrzymaliśmy $2(k-2)$ równań, podczas gdy do policzenia jest $2(k-1)$ współczynników. Skąd wziąć dodatkowe dwa równania? Jak dotąd nie wymusiliśmy jeszcze jednego warunku koniecznego dla interpolacji – aby ostatni wielomian przechodził przez ostatni węzeł. Warunek ten to kolejne równanie:

$$W_{k-1}(x_k) = f(x_k)$$
$$a_{k-1}t_{k-1}^{\,2} + b_{k-1}t_{k-1} = f(x_k) - f(x_{k-1}) \quad (12)$$

Ostatnie potrzebne równanie można uzyskać przez jawne określenie pochodnej ostatniego wielomianu w ostatnim węźle, na przykład tak:

$$W_{k-1}^{(1)}(x_k) = d$$
$$2a_{k-1}t_{k-1} + b_{k-1} = d \quad (13)$$

Dobór ostatniego równania jest ciekawym zagadnieniem i wrócę do niego jeszcze dalej w tym sprawozdaniu; na razie przyjmijmy postać ostatniego równania zgodnie ze wzorem (13). Łącząc równania (8), (12), (13) oraz (9) i (11) otrzymamy następujące równanie macierzowe krzywej sklejanej drugiego stopnia:

$$\begin{bmatrix} t_0^2 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 2t_0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_1^2 & t_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2t_1 & 1 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_2^2 & t_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2t_2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & t_{k-1}^2 & t_{k-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2t_{k-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \\ a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \vdots \\ a_{k-1} \\ b_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) - f(x_0) \\ 0 \\ f(x_2) - f(x_1) \\ 0 \\ f(x_3) - f(x_2) \\ 0 \\ \vdots \\ f(x_k) - f(x_{k-1}) \\ d \end{bmatrix} \quad (14)$$

Aby łatwiej było zauważyć regularność w macierzy współczynników, poniżej kolejne przyczynki ze wzoru (10) ujęte są w nawiasy klamrowe (na samym końcu znajduje się przyczynek ze wzorów (12) i (13)):

$$\begin{bmatrix} \left\{\begin{matrix} t_0^2 & t_0 & 0 & 0 \\ 2t_0 & 1 & 0 & -1 \end{matrix}\right\} & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} & \dots & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} \quad \left\{\begin{matrix} t_1^2 & t_1 & 0 & 0 \\ 2t_1 & 1 & 0 & -1 \end{matrix}\right\} & & \dots & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 0 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & 0 \end{matrix} & \left\{\begin{matrix} t_2^2 & t_2 \\ 2t_2 & 1 \end{matrix}\right. & \dots & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots & & \ddots & \vdots \\ \begin{matrix} 0 & 0 & & 0 & 0 & & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & 0 & & 0 & 0 & & 0 & 0 \end{matrix} & & & \left\{\begin{matrix} t_{k-1}^2 & t_{k-1} \\ 2t_{k-1} & 1 \end{matrix}\right\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \\ a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \vdots \\ a_{k-1} \\ b_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) - f(x_0) \\ 0 \\ f(x_2) - f(x_1) \\ 0 \\ f(x_3) - f(x_2) \\ 0 \\ \vdots \\ f(x_k) - f(x_{k-1}) \\ d \end{bmatrix} \quad (15)$$

Dla niezerowych odległości między węzłami na osi x układ ten na mocy twierdzenia Kroneckera-Capelliego ma dokładnie jedno rozwiązanie, którym jest wektor współczynników dla krzywej sklejanej drugiego stopnia.

Rozwiązywanie układu równań krzywej SPLINE-2

Do rozwiązania powyższego układu równań liniowych można podejść na kilka sposobów.

Bezpośrednie przekształcenie $r = A^{-1}B$ zazwyczaj nie ma praktycznego sensu z przyczyn omówionych w [4], dlatego trzeba skorzystać z numerycznej metody rozwiązywania równań liniowych. Kilka takich metod zostało omówionych w [4]. Można zastosować na przykład metodę eliminacji Gaussa (złożoność rzędu k^3).

Dobór węzłów interpolacji i faktoryzacja LU

Węzły interpolacji możemy dobierać na wiele sposobów, na przykład możemy wybrać węzły równo od siebie odległe na osi x, lub wykorzystać do tego wielomiany Czebyszewa. Wszystkie krzywe sklejane niskich stopni zazwyczaj dokładniej interpolują funkcję dla węzłów równo odległych.

Przyglądając się wzorom (14) i (15) można łatwo dostrzec, że informacje o wartości funkcji interpolowanej w węzłach są w całości przechowywane w macierzy wyrazów wolnych B, podczas gdy macierz współczynników A przechowuje jedynie dane o odległości węzłów od siebie na osi x. W przypadku, gdy zmienimy samą funkcję interpolowaną nie modyfikując doboru węzłów, to zmianie ulegnie jedynie macierz B. Oznacza to, że powyższe równanie macierzowe można poddać faktoryzacji LU (omówionej w [1], [2] i [4]), co znacząco przyśpieszy obliczanie współczynników krzywej sklejanej dla różnych funkcji przy tych samych węzłach (pomijając proces faktoryzacji rozwiązywanie ma złożoność rzędu k^2).

Wyprowadzenie wzorów ogólnych dla krzywych SPLINE-2

Macierz współczynników we wzorze (14) jest macierzą rzadką, więc na jej przechowywanie zużywana jest duża ilość niepotrzebnej pamięci. Okazuje się jednak, że współczynniki krzywej SPLINE-2 można też obliczać przy użyciu rekurencyjnego równania.

Dokonajmy ręcznej eliminacji Gaussa (bez wyboru elementu głównego) na układzie ze wzoru (14). Można zauważyć, że macierz współczynników byłaby macierzą trójkątną górną, gdyby nie pojawiający się w co drugim wierszu czynnik pod przekątną. Z takiej konstrukcji wynika, że proces eliminacji i-tej niewiadomej z układu **będzie miał wpływ jedynie na równanie opisane wierszem $i+1$!** Zauważenie tego pozwala nam przepisać wzory (10), (11) oraz (13) do postaci, która tworzy razem macierz trójkątną górną (dokładne omówienie procesu eliminacji Gaussa znajduje się w [4]):

$$A^{[i]} = \begin{bmatrix} \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & t_i^2 & t_i & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & -1 & 0 & -1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \quad (16)$$

$$B^{[i]} = \begin{bmatrix} \vdots \\ f(x_{i+1}) - f(x_i) \\ -2\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{t_i} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$b_{k-1} = 2\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{t_{k-1}} - d \qquad (18)$$

Wzór (10), (11) i (13) zastępujemy kolejno wzorami (16), (17), (18) uzyskując następujące równanie macierzowe:

$$\begin{bmatrix} t_0^{\ 2} & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_1^{\ 2} & t_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_2^{\ 2} & t_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & t_{k-1}^{\ 2} & t_{k-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \\ a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \vdots \\ a_{k-1} \\ b_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) - f(x_0) \\ -2\frac{f(x_1) - f(x_0)}{t_0} \\ f(x_2) - f(x_1) \\ -2\frac{f(x_2) - f(x_1)}{t_1} \\ f(x_3) - f(x_2) \\ -2\frac{f(x_3) - f(x_2)}{t_2} \\ \vdots \\ f(x_k) - f(x_{k-1}) \\ e \end{bmatrix} \qquad (19)$$

gdzie wyraz $e = 2\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{t_{k-1}} - d$. Budowa powyższej macierzy oraz wzorów (16) i (17) pozwalają wprost wypisać rekurencyjne równanie współczynników b_i:

$$b_i = -b_{i+1} + 2\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{t_i} = -b_{i+1} + 2\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \qquad (20)$$

Punktem stopu dla rekurencji jest $b_k = d$. Jest to **dodatkowy współczynnik**; jego obecność powoduje, że $b_{k-1} = -d + 2\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{t_{k-1}} = e$ Mając wyliczony współczynnik b_i możemy podstawić go do równania na a_i:

$$t_i^2 a_i + t_i b_i = f(x_{i+1}) - f(x_i) \quad \Big| -t_i b_i$$

$$t_i^2 a_i = f(x_{i+1}) - f(x_i) - t_i b_i \quad \Big| : t_i^2$$

$$a_i = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{t_i^2} - \frac{b_i}{t_i}$$

$$a_i = \frac{\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{t_i} - b_i}{t_i} \quad \Big| \text{ ze wzoru (20)}$$

$$a_i = \frac{\frac{b_i + b_{i+1}}{2} - b_i}{t_i} \qquad (21)$$

Z powyższych obliczeń ostatecznie otrzymujemy

$$a_i = \frac{b_{i+1} - b_i}{2(x_{i+1} - x_i)} \quad (22)$$

Ostatecznie więc wielomian składowy $W_i(x)$ krzywej SPLINE-2 możemy wyrazić jako:

$$W_i(x) = \frac{b_{i+1} - b_i}{2(x_{i+1} - x_i)}(x - x_i)^2 + b_i(x - x_i) + f(x_i) \qquad (23)$$

Gdzie współczynniki b_i wyliczamy rekurencyjnie ze wzoru (20).

Używanie powyższego wzoru jest znacznie oszczędniejsze pamięciowo niż bezpośrednie rozwiązywanie układu (14), ponieważ nie przechowujemy całej macierzy. Rozwiązanie rekurencyjne ma też złożoność obliczeniową rzędu k .

Problem doboru ostatniej pochodnej

W równaniu (14) możemy przyjąć dowolny współczynnik d (dla wzoru (23) możemy przyjąć dowolne $b_{k-1} = e$). Powstają więc pytania – jaki wybór jest najkorzystniejszy? I czym powinniśmy się kierować?

Zazwyczaj chcemy minimalizować rozpiętość wartości, jakie przyjmuje nasza krzywa SPLINE-2 w przedziałach interpolacji. Badanie rodzajów takiego procesu oraz sposobów jego dokonywania znacznie wykracza poza temat zadania, jednak może być ciekawym tematem do opracowania.

Warto rozważyć jeszcze jedną możliwość wyboru wartości pochodnej: zamiast ustalać ją z góry możemy wymusić w równaniu (14), by zachodził warunek: $W_{k-1}^{(1)}(x_k) = W_0^{(1)}(x_0)$, tj. pochodna w ostatnim węźle interpolacji równała się pochodnej w pierwszym (gdyby jeszcze wartości w tych węzłach były sobie równe to mówilibyśmy o *okresowej krzywej SPLINE-2*). Zmodyfikowane w tym celu równanie (14) wygląda następująco:

$$\begin{bmatrix} t_0^{\;2} & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 2t_0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_1^{\;2} & t_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2t_1 & 1 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_2^{\;2} & t_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2t_2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & t_{k-1}^{\;2} & t_{k-1} \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \\ a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \vdots \\ a_{k-1} \\ b_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) - f(x_0) \\ 0 \\ f(x_2) - f(x_1) \\ 0 \\ f(x_3) - f(x_2) \\ 0 \\ \vdots \\ f(x_k) - f(x_{k-1}) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (24)$$

Wnioski praktyczne

- Wyprowadzenie równań jawnych może okazać się dużo korzystniejsze od stosowania postaci macierzowej – w tym przypadku zmniejszyliśmy złożoność z rzędu k^3 do rzędu k.
- W części praktycznej pokazałem, że SPLINE-2 są bardzo podatne na oscylacje. Z tego względu zazwyczaj nie używa się ich w praktyce – w ich miejsce stosuje się krzywe SPLINE-3.

Bibliografia

1. Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, „Metody Numeryczne", wydanie III, wyd. WNT, Warszawa 1982, 1993
2. Åke Björck, Germund Dahlquist, „Metody Numeryczne", wydanie II, wyd. PWN, Warszawa 1987
3. Jacek Złydach, „Metody Numeryczne – Sprawozdanie II", Kraków 2008, oddane wcześniej
4. Jacek Złydach, „Metody Numeryczne – Sprawozdanie III", Kraków 2008, oddane wcześniej