Funkcja sklejana

Weronika Michoń

4 czerwca 2020

Funkcje sklejane lub inaczej splajny są jedną z metod interpolacyjnych. Definiujemy je jako wielomiany osobno dla każdego odcinka pomiędzy sąsiednimi wezłami interpolacyjnymi. Każdy lokalny wielomian jest tak dobrany, aby – oprócz warunków interpolacji – spełniać warunki sklejenia w taki sposób, aby cały splajn był funkcją o odpowiedniej regularności. Skoncentrujemy się przede wszystkim na zagadnieniu interpolacji za pomocą splajnu kubicznego, tj. funkcji ciągłej wraz z pochodnymi do rzędu drugiego włącznie i zbudowanej z wielomianów 3-ego stopnia.

1 Definicja funkcji sklejanej

Rozważmy układ $n+1$ węzłów $(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$ takich, że $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$.

Definicja 1. ***Splajnem kubicznym*** *nazywamy funkcję $f(x)$ mającą postać*

$$f(x) = f_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i \tag{1}$$

dla $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ oraz $i \in \{0, \ldots, n-1\}$, która spełnia następujące warunki

1. $f_{i-1}(x_i) = y_i = f_i(x_i)$ *dla* $i \in \{1, \ldots, n\}$;
2. $f'_{i-1}(x_i) = f'_i(x_i)$ *dla* $i \in \{0, \ldots, n-1\}$;
3. $f''_{i-1}(x_i) = f''_i(x_i)$ *dla* $i \in \{0, \ldots, n-1\}$.

Warunek pierwszy zapewnia ciągłość funkcji $f(x)$ i pokrywanie się z jej węzłami. Drugi warunek odpowiada za gładkość funkcji, natomiast trzeci za to, aby krzywizna funkcji była taka sama w miejscu styku.

Szczególnym przypadkiem splajnu kubicznego jest tak zwany **splajn naturalny**, który spełnia dodatkowo warunki

$$f''(x_0) = f''(x_n) = 0.$$

Dzięki tym warunkom funkcja sklejana $f(x)$ jest jednoznacznie wyznaczona na przedziale $[x_0, x_n]$.

Pozostaje pytanie jak wyznaczyć splajn kubiczny dla danego układu węzłów. Pomiędzy każdymi dwoma węzłami musimy wyznaczyć cztery współczynniki. Zacznijmy od obliczenia pierwszej i drugiej pochodnej splajnu

$$f'_i(x) = 3a_i(x - x_i)^2 + 2b_i(x - x_i) + c_i \tag{2}$$

$$f_i''(x) = 6a_i(x - x_i) + 2b_i. \tag{3}$$

Z warunku z definicji splajnu kubicznego (Def. 1), który zapewnia ciągłość funkcji $f(x)$, otrzymujemy równanie $f_{i-1}(x_i) = y_i = f_i(x_i)$ lub równoważnie

$$a_{i-1}h_{i-1}^3 + b_{i-1}h_{i-1}^2 + c_{i-1}h_{i-1} + d_{i-1} = d_i = y_i,$$

gdzie $h_{i-1} = x_i - x_{i-1}$. Patrząc na kolejny warunek z Definicji 1 dostajemy równanie $f_{i-1}'(x_i) = f_i'(x_i)$ lub równoważnie

$$3a_{i-1}h_{i-1}^2 + 2b_{i-1}h_{i-1} + c_{i-1} = c_i. \tag{4}$$

Z ostatniego warunku Definicji 1 drugie pochodne również powinny być równe w punktach styku, czyli $f_{i-1}''(x_i) = f_i''(x_i)$ lub równoważnie

$$6a_{i-1}h_{i-1} + 2b_{i-1} = 2b_i. \tag{5}$$

Musimy również określić warunki, które określają punkty końcowe (x_0, y_0) i (x_n, y_n). Możemy zdefiniować, aby pierwsze pochodne w tych punktach przyjmowały konkretne wartości $f_0'(x_0) = c_0$ oraz $f_{n-1}'(x_n) = c_{n-1}$. Jest to opisane jako **zaciskanie splajnu**. Zaciskając splajn, wprowadzamy dodatkowe informacje o funkcji i dlatego możemy spodziewać się jej lepszego dopasowania. Oczywiście jeszcze lepsze przybliżenie uzyskamy definując dodatkowe punkty na końcach. Oczywiście zamiast definiowania pierwszych pochodnych w wybranych punktach, możemy określać w tych punktach wartości drugiej pochodnej na przykład $f_0''(x_0) = 2b_0 = 0$ oraz $f_{n-1}''(x_n) = 2b_{n-1} = 0$. Najczęściej trudno jest uzyskać informacje o pierwszych pochodnych, dlatego korzystamy z tych ostatnich warunków.

Zatem zaczniemy od zajęcia się przypadkiem naturalnego splajnu. W tym przypadku znamy wartości b_0 oraz b_{n-1} i możemy rozpocząć od określenia pozostałych parametrów drugiego stopnia $b_1, \ldots, b_{n-2}$ na podstawie punktów danych $y_0, \ldots, y_n$ i warunków ciągłość. Po znalezieniu wartości parametrów drugiego stopnia możemy przystąpić do ustalenia wartości pozostałych parametrów segmentów sześciennych. Rozważmy zatem poniższe warunki dla i-tego przedziału

$$f_i(x_i) \;= y_i \tag{6}$$

$$f_i(x_{i+1}) \;= y_{i+1} \tag{7}$$

$$f_i''(x_i) = 2b_i \tag{8}$$

$$f_i''(x_{i+1}) = 2b_{i+1} \tag{9}$$

Gdyby b_i oraz b_{i+1} były znane z góry, tak jak byłoby w przypadku $n = 1$, wówczas warunki te służyłyby do jednoznacznego określenia czterech parametrów funkcji f_i. W przypadku $n > 1$ warunki ciągłości pierwszego rzędu zapewniają niezbędne połączenie między segmentami, które pozwala nam jednocześnie określić parametry $b_1, \ldots, b_{n-2}$. Pierwszy z czterech powyższych warunków (6) określa, że

$$d_i = y_i. \tag{10}$$

Z kolejnego warunku (7) mamy

$$a_i h_i^3 + b_i h_i^2 + c_i h_i + d_i = y_{i+1}, \tag{11}$$

skąd po podstawieniu (10) oraz przekształceniu otrzymujemy pierwszy współczynnik funkcji

$$c_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - a_i h_i^2 - b_i h_i. \tag{12}$$

Korzystając z wcześniej obliczonego wzoru (5) na drugą pochodną funkcji $f_i(x)$, zapiszemy czwarty warunek (9) jako $6a_ih_i + 2b_i = 2b_{i+1}$. Po przekształceniu otrzymujemy

$$a_i = \frac{b_{i+1} - b_i}{3h_i}. \tag{13}$$

Podstawiając wzór (13) do wzoru (12) dostaniemy

$$c_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{(b_{i+1} + 2b_i)h_i}{3}. \tag{14}$$

W tym momencie wyznaczyliśmy trzy współczynniki funkcji, jednak dwa z nich zostały zapisne przy pomocy ostatniego współczynnika, czyli b_i. Zatem pozostaje nam wyznaczyć ten ostatni parametr. Warunek $f'_{i-1}(x_i) = f'_i(x_i)$, który został wyżej napisany równoważnie jako (4), zapiszemy podstawiając (13) oraz (14) wzór

$$b_{i-1}h_{i-1} + 2b_i(h_{i-1} + h_i) + b_{i+1}h_i = \frac{3}{h_i}\Big(y_{i+1} - y_i\Big) - \frac{3}{h_{i-1}}\Big(y_i - y_{i-1}\Big).$$

Mając na uwadze, że obliczamy współczynniki dla n funkcji oraz dodając warunek na $b_0 = b_{n-1} = 0$ otrzymujemy układ równań z $n - 2$ niewiadomymi

$$\begin{bmatrix} p_1 & h_1 & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & p_2 & h_2 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & h_{n-4} & p_{n-3} & h_{n-3} \\ 0 & 0 & 0 & h_{n-3} & p_{n-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-3} \\ b_{n-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-3} \\ u_{n-2} \end{bmatrix},$$

gdzie

$$p_i = 2(h_{i-1} + h_i) = 2(x_{i+1} + x_{i-1})$$

oraz

$$u_i = \frac{3}{h_i}\Big(y_{i+1} - y_i\Big) - \frac{3}{h_{i-1}}\Big(y_i - y_{i-1}\Big).$$

Do obliczenia współczynników b_i możemy użyć algorytmu Thomasa. Jest to jedna z metod rozwiązywania układów równań liniowych. Bazuje na metodzie eliminacji Gaussa i powstał specjalnie dla macierzy trójdiagonalnych, a taka jest w tym przypadku. Pierwszym krokiem algorytmu jest obliczenie nowych wartości p_i oraz u_i, które dla czytelności oznaczymy odpowiednio p'_i oraz u'_i

$$p'_i = p_i - \frac{h_{i-1}}{p_{i-1}}h_{i-1}$$

$$u'_i = u_i - \frac{h_{i-1}}{p_{i-1}}u'_{i-1}$$

dla $i = 2, \ldots, n - 2$.

Teraz wystarczy użyć obliczonych powyżej wartości do rekurencyjnego obliczania współczynników b_i. Najpierw obliczamy wartość b_{n-2}, czyli

$$b_{n-2} = \frac{u'_{n-2}}{p'_{n-2}}.$$

Następnie obliczamy kolejne wartości wspólczynników b_i dla $i = n-3, \dots, 1$ wykorzysując wzór

$$b_i = \frac{u'_i - h_i b_{i+1}}{p'_i}.$$

Podsumowując kolejne współczynniki splajnu naturalnego obliczamy ze wzorów rekurencyjnych

$$p'_i = \begin{cases} 2(x_{i+1} + x_{i-1}) & \text{dla } i = 1 \\ 2(x_{i+1} + x_{i-1}) - \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{2(x_i + x_{i-2})} & \text{dla } i = 2, \dots, n-2 \end{cases};$$

$$u'_i = \begin{cases} \frac{3(y_{i+1} - y_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{3(y_i - y_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} & \text{dla } i = 1 \\ \frac{3(y_{i+1} - y_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{3(y_i - y_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} - \frac{x_i - x_{i-1}}{2(x_i + x_{i-2})} u'_{i-1} & \text{dla } i = 2, \dots, n-2 \end{cases};$$

$$a_i = \frac{1}{3} \frac{b_{i+1} - b_i}{x_{i+1} - x_i};$$

$$b_i = \begin{cases} 0 & \text{dla } i \ = \ 0,\ n-1 \\ \frac{u'_i - (x_{i+1} - x_i) b_{i+1}}{p'_i} & \text{dla } i \ = \ 1, \dots, n-3 \\ \frac{u'_{n-1}}{p'_{n-1}} & \text{dla } i \ = \ n-2 \end{cases};$$

$$c_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{(b_{i+1} + 2b_i)(x_{i+1} - x_i)}{3};$$

$$d_i = y_i$$

dla $i = 1, \dots, n-1$.

Do tej pory rozważaliśmy przypadek, w którym wartości drugiej pochodnej w punktach x_0 oraz x_n są równe zero. Skupmy się teraz na przypadku, gdzie końce splajnu są zaciśnięte, czyli nakładamy warunek na wartość pierwszych pochodnych w ostatnich węzłach. Znamy wtedy wartości c_0 i c_{n-1} i możemy zacząć od określenia pozostałych parametrów pierwszego stopnia c_i z punktów danych $y_0, \dots, y_n$ i warunków ciągłości. Rozważmy zatem następujące cztery warunki dotyczące i-tego segmentu

$$f_i(x_i) \ = y_i \tag{15}$$

$$f_i(x_{i+1}) \ = y_{i+1} \tag{16}$$

$$f'_i(x_i) = c_i \tag{17}$$

$$f'_i(x_{i+1}) = c_{i+1} \tag{18}$$

Pierwsze dwa warunki (15) i (16) prowadzą do takich samych przekształceń, jak w przypadku splajnu naturanego, zatem możemy je od razu przepisać

$$c_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - a_i h_i^2 - b_i h_i. \tag{19}$$

Z ostatniego warunku (18) oraz ze wzoru (2) na pierwszą pochodną funkcji $f(x)$ mamy, że

$$c_{i+1} = 3a_i h_i^2 + 2b_i h_i + c_i. \tag{20}$$

Przekształcając równania (19) oraz (20) otrzymamy wzory na współczynniki

$$a_i = \frac{1}{h_i^2}\Big(c_i - c_{i+1}\Big) + \frac{2}{h_i^2}\Big(y_i - y_{i-1}\Big) \tag{21}$$

oraz

$$b_i = \frac{3}{h_i^2}\Big(y_{i+1} - y_i\Big) - \frac{1}{h_i}\Big(c_{i+1} + 2c_i\Big). \tag{22}$$

Podstawiając wzory (21) i (22) do warunku $f''_{i-1}(x_i) = f''_i(x_i)$, który został wyżej napisany równoważnie w (5), otrzymujemy

$$\frac{c_{i-1}}{h_{i-1}} + 2\Big(\frac{1}{h_{i-1}} + \frac{1}{h_i}\Big)c_i + \frac{c_{i+1}}{h_i} = \frac{3}{h_{i-1}^2}\Big(y_i - y_{i-1}\Big) + \frac{3}{h_i^2}\Big(y_{i+1} - y_i\Big).$$

Jak możemy zauważyć, znowu mamy układ równań z $n-2$ niewiadomymi

$$\begin{bmatrix} s_1 & h_1^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ h_1^{-1} & s_2 & h_2^{-1} & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & h_{n-4} & s_{n-3} & h_{n-3}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & h_{n-3}^{-1} & s_{n-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-3} \\ c_{n-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 - c_0 h_0^{-1} \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-3} \\ g_{n-2} - c_{n-2} h_{n-2}^{-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g'_1 \\ g'_2 \\ \vdots \\ g'_{n-3} \\ g'_{n-2} \end{bmatrix},$$

gdzie

$$s_i = 2(h_{i-1}^{-1} + h_i^{-1})$$

oraz

$$g_i = \frac{3}{h_{i-1}^2}\Big(y_i - y_{i-1}\Big) - \frac{3}{h_i^2}\Big(y_{i+1} - y_i\Big).$$

W tym przypadku również stosujemy algorytm Thomasa. Najpierw obliczamy nowe wartości s'_i oraz g''_i

$$s'_i = s_i - \frac{h_{i-1}^{-1}}{s_{i-1}} h_{i-1}^{-1}$$

$$g''_i = g_i - \frac{h_{i-1}^{-1}}{s_{i-1}} g''_{i-1}$$

dla $i = 2, \ldots, n-2$.

Rekurencyjnie obliczamy współczynniki c_i używając wartości obliczonych powyżej. Najpierw obliczamy wartość c_{n-2}, czyli

$$c_{n-2} = \frac{g''_{n-2}}{s'_{n-2}}.$$

Następnie obliczamy kolejne wartości wspólczynników c_i dla $i = n-3, \ldots, 1$ wykorzysując wzór

$$c_i = \frac{g''_i - h_i^{-1} c_{i+1}}{s'_i}.$$

Podsumowując kolejne współczynniki splajnu zaciskanego obliczamy ze wzorów

$$s_i' = 2\Big((x_i - x_{i-1})^{-1} + (x_{i+1} - x_i)^{-1}\Big) - \frac{(x_i - x_{i-1})^{-2}}{2\Big((x_{i-1} - x_{i-2})^{-1} + (x_i - x_{i-1})^{-1}\Big)};$$

$$g_i'' = \frac{3(y_i - y_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})^2} - \frac{3(y_{i+1} - y_i)}{(x_{i+1} - x_i)^2} - \frac{(x_i - x_{i-1})^{-1}}{2\Big((x_{i-1} - x_{i-2})^{-1} + (x_i - x_{i-1})^{-1}\Big)} g_{i-1}'';$$

$$a_i = \frac{c_i - c_{i+1}}{(x_{i+1} - x_i)^2} + \frac{2(y_i - y_{i-1})}{(x_{i+1} - x_i)^2};$$

$$b_i = \frac{3(y_{i+1} - y_i)}{(x_{i+1} - x_i)^2} - \frac{c_{i+1} + 2c_i}{x_{i+1} - x_i};$$

$$c_i = \begin{cases} c_i & \text{dla } i \ = \ 0,\ n-1 \\ \frac{g_i'' - (x_{i+1} - x_i)^{-1} c_{i+1}}{s_i'} & \text{dla } i \ = \ 1, \ldots, n-3 \\ \frac{g_{n-2}''}{s_{n-2}'} & \text{dla } i \ = \ n-2 \end{cases};$$

$$d_i = y_i$$

dla $i = 1, \ldots, n-1$.

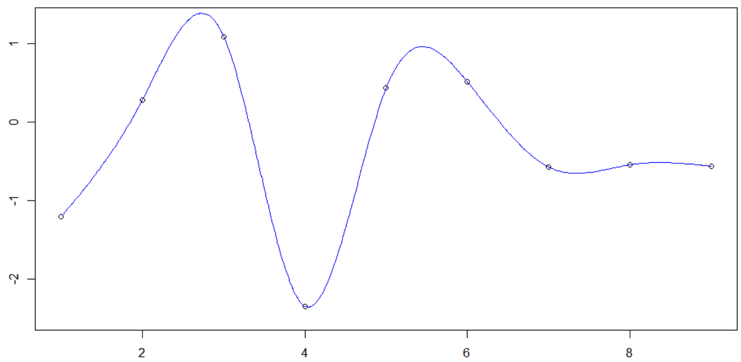
2 Rodzaje funkcji sklejanej

Splajn naturalny nie jest jedynym typem splajnu kubicznego. W tym podrozdziale zostaną opisane różne rodzaje funkcji sklejanej, jednak największe zastosowanie w zagadnieniach analizy ryzyka ubezpieczeniowego i finansowego znajdują trzy pierwsze typy splajnu.

Zostanie również zilustrowane przybliżanie przykładowych danych za pomocą każdego rodzaju splajnu. Zobaczymy wówczas, że poszczególne rodzaje funkcji sklejanej różnią się jedynie na pierwszym i ostatnim odcinku.

2.1 Splajn naturalny

Jak zostało już wcześniej wspomniane, naturalny splajn jest uzyskiwany przez dodanie do definicji funkcji sklejanej dwóch kolejnych warunków. Mianowicie drugie pochone na końcach przedziału, na którym jest określony splajn muszą wynosić 0, czyli $f''(x_0) = 0 = f''(x_n)$. Należy zauważyć, że tylko w tym przypadku jednoznacznie wyznaczymy funkcje skleiana dla zadanych węzłów.



Rysunek 1: Splajn naturalny

2.2 Splajn z korekcją krzywizny

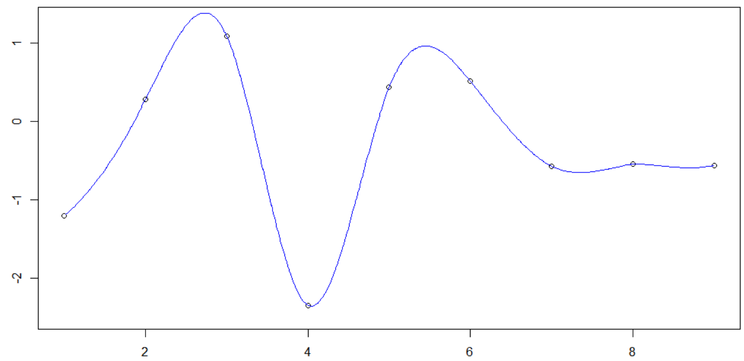
Ten typ splajnu jest podobny dla splajnu naturalnego, ponieważ również definiujemy dwa warunki na drugie pochodne w węzłach końcowych. Różnicą jest jednak wartość wspomnianych drugich pochodnych, gdyż mogą być one dowolną stałą. Ta wartość odpowiada pożądanym ustawieniom krzywizny w obu punktach końcowych. W praktyce trudno jest dobrze dopasować wartości $f''(x_0)$ oraz $f''(x_n)$, dlatego częściej stosowany jest splajn naturalny.

2.3 Splajn zaciskany

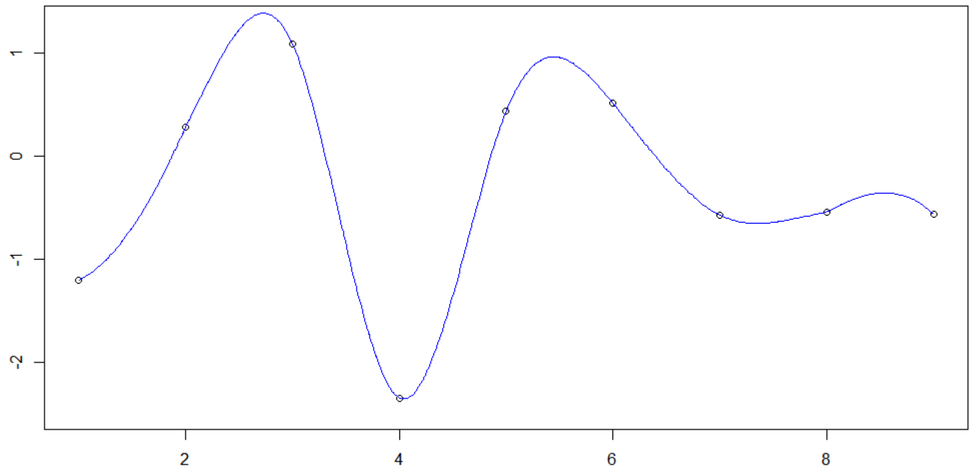
W przypadku dwóch poprzednich typów funkcji sklejanej określaliśmy wartości drugiej pochodnej w węzłach końcowych, natomiast w tym przypadku skupimy się na wartościach pierwszej pochodnej w tych samych punktach. Dzięki warunkowi, że $f'(x_0)$ oraz $f'(x_n)$ przyjmują ustalone wartości, nachylenie na początku i na końcu splajnu jest pod kontrolą użytkownika.

2.4 Splajn paraboliczny

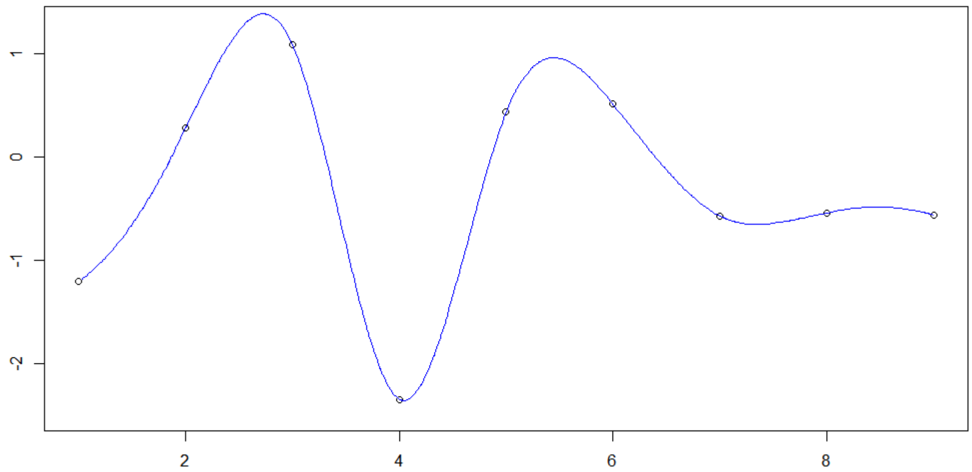
W tym rodzaju splajnu funkcje określone na pierwszym i ostatnim przedziale, czyli $f_0(x)$ oraz $f_{n-1}(x)$ są zdefiniowane jako funkcje kwadratowe ($d_0 = d_{n-1} = 0$). Oznacza to, że druga pochodna będzie identyczna na dwóch końcowych przedziałach ($M_0 = M_1$ oraz $M_{n-1} = M_n$).



Rysunek 2: Splajn z korekcją krzywizny



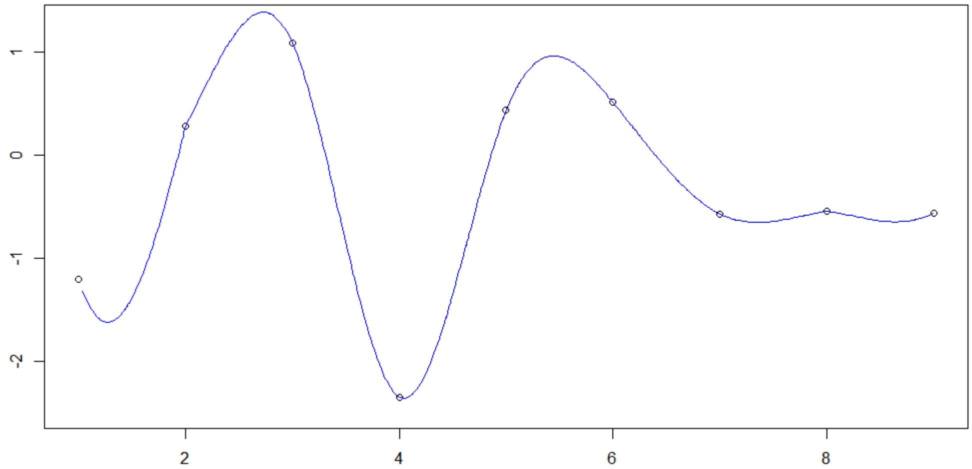
Rysunek 3: Splajn zaciskany



Rysunek 4: Splajn paraboliczny

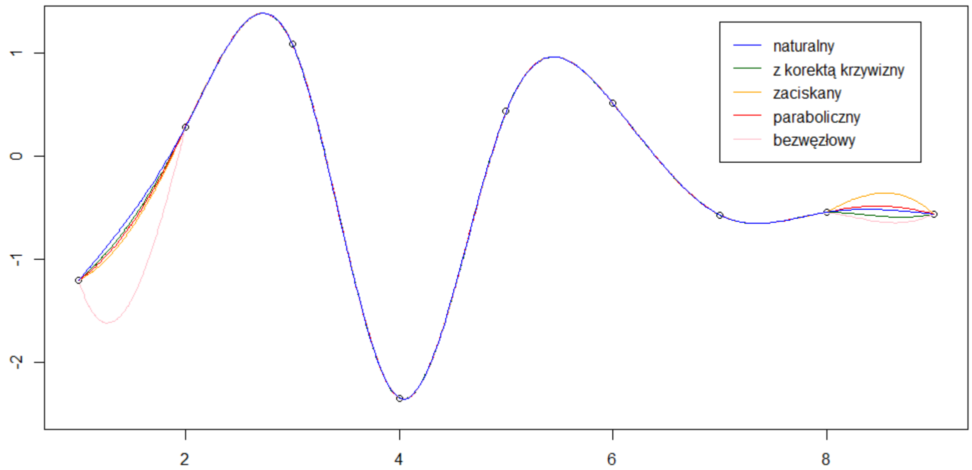
2.5 Splajn bezwęzłowy

Do skonstruowania unikatowej funkcji sklejanej dodajemy warunki $d_0 = d_1$ oraz $d_{n-2} = d_{n-1}$, czyli współczynniki przy zmiennej x^3 dla odpowiednio dwóch pierwszych oraz dwóch ostatnich funkcji $f_i(x)$ są takie same. Oznacza to, że $f_0(x)$ oraz $f_1(x)$ przyjmują takie same wartości w zerowej, pierwsze oraz drugiej pochodnej. Warunek $d_0 = d_1$ wymusza, aby $f_0(x)$ i $f_1(x)$ były identycznymi funkcjami, stąd punkt x_1 (węzeł (x_1, y_1)) nie jest potrzebny. Analogiczny tok rozumowania obowiązuje dla $f_{n-2}(x)$ i $f_{n-1}(x)$ oraz punktu x_{n-1}.



Rysunek 5: Splajn bezwęzłowy

Poniżej zostaną przedstawione przybliżenia danych za pomocą różnych rodzajów funkcji sklejanej.



Rysunek 6: Porównanie różnych rodzajów funkcji sklejanej

3 Wygładzanie za pomocą funkcji sklejanej

W wielu przypadkach możemy chcieć nie tylko przybliżać dane pomiędzy węzłami. Jeśli na przykład dane zawierają element losowy lub odzwierciedlają zjawisko sezonowe, to warto zmodyfikować założenia i pozwolić aby funkcja leżała w pobliżu węzłów, zamiast przechodziła przez każdy z nich. W terminologii teorii stopniowania opracowanej przez aktuariuszy na początku XX wieku, nazywa się to zmodyfikowaną interpolacją oscylacyjną. Termin zmodyfikowany jest używany, aby podkreślić, że węzły (inaczej punkty przecięcia) są modyfikowane z oryginalnych danych.

Wygładzając splajn korzystamy z tej samej definicji funkcji sklejanej. Jedyną modyfikacją są wartości węzłów, czyli zamiast każdego punktu (x_i, y_i) zastępujemy go węzłem (x_i, d_i). Warto zwrócić uwagę, że rzędna d_i jest wyrazem wolnym w wygładzonym splajnie kubicznym

$$f(x) = f_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i.$$

Wygładzanie możemy opisać w inny sposób, na przykład współrzędne oryginalnych węzłów są wynikami modelu

$$y_i = h(x_i) + \epsilon_i,$$

gdzie ϵ_j dla $j \in \{0, \ldots, n\}$ jest niezależną zmienną losową o średniej 0 i wariancji σ^2 oraz $h(x)$ jest dobrze określoną funkcją.

Próbujemy znaleźć gładką funkcję $f(x)$, w tym przypadku splajn sześcienny, który posłuży jako przybliżenie prawdziwej funkcji $h(x)$. Ponieważ zakładamy, że $h(x)$ jest dobrze opisana, to wymagamy, aby $f(x)$ również była jak najbardziej gładka. Chcemy również, aby była jak najlepiej dopasowana do zadanych węzłów. Niestety w wielu przypadkach są to sprzeczne cele.
Dlatego konieczny jest kompromis między dopasowaniem a gładkością. Stopień dopasowania można zmierzyć za pomocą kryterium chi-kwadrat

$$F = \sum_{i=0}^{n} \left(\frac{y_i - d_i}{\sigma_i} \right)^2 \tag{23}$$

natomiast stopień gładkości można zmierzyć na podstawie ogólnej gładkości splajnu sześciennego

$$S = \int_{x_0}^{x_n} [f''(x)]^2 dx.$$

Aby spełnić zarówno cele dopasowania i gładkości, możemy skonstruować kryterium dla splajnu, które będzie średnią ważoną miar dopasowania i gładkości

$$L = pF + (1 - p)S. \tag{24}$$

Zaletą wprowadzenia dodatkowego parametru p do funkcji sklejanej jest możliwość wybrania, które z założeń czy dopasowanie, czy gładkość jest dla nas ważniejsze.

Jak zatem obliczyć węzły dla nowego splajnu? Najpierw skorzystajmy z tego, że splajn to tak naprawdę kilka połaczonych ze sobą funkcji, czyli

$$S = \int_{x_0}^{x_n} [f''(x)]^2 dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} [f_i''(x)]^2 dx. \tag{25}$$

Druga pochodna w dowolnym przedziale $[x_i, x_{i+1}]$ jest funkcją liniową, która zmienia się z $2b_i$ przy x_i na $2b_{i+1}$ przy x_{i+1} (ze wzoru (3)) . Dlatego mamy

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} [f_i''(x)]^2 dx = 4\int_0^{h_i} \left[b_i\Big(1 - \frac{x}{h_i}\Big) + b_{i+1}\frac{x}{h_i}\right]^2 dx = \frac{4h_i}{3}\Big(b_i^2 + b_i b_{i+1} + b_{i+1}^2\Big), \tag{26}$$

gdzie $h_i = x_{i+1} - x_i$. Wówczas kryterium dla funkcji sklejanej (24) po podstawieniu wzorów (23), (25) i (26) przedstawia się następująco

$$L = p\sum_{i=0}^{n}\left(\frac{y_i - d_i}{\sigma_i}\right)^2 + (1-p)\sum_{i=0}^{n-1}\frac{4h_i}{3}\Big(b_i^2 + b_i b_{i+1} + b_{i+1}^2\Big), \tag{27}$$

gdzie $d_i = f_i(x_i)$.

Rozpatrzymy przypadek splajnu naturalnego, który przechodzi przez węzły (x_i, d_i) $i = 0, \dots, n$ i spełnia warunki $f''(x_0) = 2b_0 = 0 = 2b_n = f''(x_n)$. Dodatkowym problemem, poza określeniem poarametru p, dopasowania splajnu wygładzającego w porównaniu z dopasowaniem splajnu interpolującego jest potrzeba określenia rzędnych d_i dla $i = 0, \dots, n$, które nie są już dostarczane przez dane wartości y_i dla $i = 0, \dots, n$.

Rozważmy i-ty przedział, który obejmuje odstęp między węzłami (x_i, d_i) i (x_{i+1}, d_{i+1}) i który podlega następującym warunkom

$$\begin{aligned} f_i(x_i) &= d_i \\ f_i(x_{i+1}) &= d_{i+1} \end{aligned} \tag{28}$$

$$\begin{aligned} f_i''(x_i) &= 2b_i \\ f_i''(x_{i+1}) &= 2b_{i+1} \end{aligned} \tag{29}$$

Z drugiego warunku (28) oraz ze wzoru na splajn (1) z Definicji 1 mamy równość $a_i h_i^3 + b_i h_i^2 + c_i h_i + d_i = d_{i+1}$. Po przekształceniu otrzymujemy

$$c_i = \frac{d_{i+1} - d_i}{h_i} - a_i h_i^2 + b_i h_i. \tag{30}$$

Natomiast ze wzoru (3) na drugą pochodną funkcji $f(x)$ oraz z czwartego warunku (29) uzyskamy równość $2b_{i+1} = 6a_i h_i + 2b_i$. Po przekształceniu otrzymujemy wzór

$$a_i = \frac{b_{i+1} - b_i}{3h_i}. \tag{31}$$

Podstawiając wzór (31) na współczynnik a_i do wznoru (30) otrzymujemy

$$c_i = \frac{d_{i+1} - d_i}{h_i} - \frac{1}{3}\Big(b_{i+1} - 2b_i\Big)h_i. \tag{32}$$

Po wyliczeniu wzorów na a_i oraz c_i w (31) i (32) w jako wyrażeń zależnych od b_i, b_{i+1}, d_i i d_{i+1}, pozostaje nam obliczyć współczynniki b_i oraz d_i. Skorzystamy z warunku odpowiadającego za gładkość funkcji sklejanej, czyli $f_{i-1}'(x_i) = f_i'(x_i)$, który zapisujemy równoważnie jako

$$3a_{i-1}h_{i-1}^2 + 2b_{i-1}h_{i-1} + c_{i-1} = c_i.$$

Podstawiając wcześniej obliczone wartości dwóch współczynników (31) i (32) otrzymamy

$$b_{i-1}h_{i-1} + 2b_i(h_{i-1} + h_i) + b_{i+1}h_i = \frac{3}{h_i}\Big(d_{i+1} - d_i\Big) - \frac{3}{h_{i-1}}\Big(d_i - d_{i-1}\Big).$$

Podobnie jak w przypadku zwykłego splajnu, mamy na uwadze, że obliczamy współczynniki tak naprawdę dla n funkcji. Dodając warunek na $b_0 = b_n = 0$ otrzymujemy układ równań w formie macierzowej

$$\begin{bmatrix} 2(h_0+h_1) & h_1 & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & h_{n-3} & 2(h_{n-3}+h_{n-2}) & h_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-2} \\ b_{n-1} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} r_0 & -(r_0+r_1) & r_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & r_1 & -(r_1+r_2) & r_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & r_{n-2} & -(r_{n-2}+r_{n-1}) & r_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix},$$

gdzie $r_i = \frac{3}{h_i}$. Ten układ może być zapisany jako $Rb = Q^T d$. Macierz R jest trójdiagonalna i odwracalna. Używając tej notacji możemy przepisać kryterium dla funkcji sklejanej (27), czyli

$$L = p\sum_{i=0}^{n}\left(\frac{y_i - d_i}{\sigma_i}\right)^2 + (1-p)\sum_{i=0}^{n-1}\frac{4h_i}{3}\Big(b_i^2 + b_i b_{i+1} + b_{i+1}^2\Big)$$

zapisać w postaci

$$L = p(y-d)^T\Sigma^{-1}(y-d) + \frac{2}{3}(1-p)b^T Rb,$$

gdzie $\Sigma = diag\{\sigma_0^2, \sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2\}$. Podstawienie $b = R^{-1}Q^T d$ umożliwia nam napisanie funkcji wyłącznie w odniesieniu do wektora d, który zawiera rzędne węzłów

$$L(d) = p(y-d)^T\Sigma^{-1}(y-d) + \frac{2}{3}(1-p)d^T QR^{-1}Q^T d. \tag{33}$$

Optymalne wartości rzędnych to te, które minimalizują funkcję $L(d)$. Różniczkując (33) względem d i przyrównując wynik do zera, otrzymujemy

$$-2p(y-d)^T\Sigma^{-1} + \frac{4}{3}(1-p)d^T QR^{-1}Q^T = 0.$$

Przenosząc jeden ze składników na drugą stronę równości otrzymujemy

$$\begin{aligned} p\Sigma^{-1}(y-d) =& \frac{2}{3}(1-p)QR^{-1}Q^T d \\ =& \frac{2}{3}(1-p)Qb. \end{aligned} \tag{34}$$

Kiedy pomnożymy dwie strony równości (34) z lewej strony przez $p^{-1}Q^T\Sigma$ otrzymamy

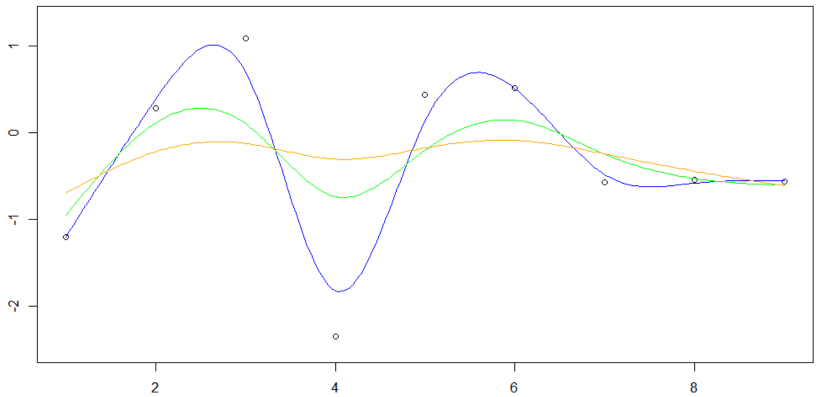
$$p\frac{1}{p}Q^T\Sigma\Sigma^{-1}\Big(y-d\Big) = \frac{2}{3}\Big(1-p\Big)\frac{1}{p}Q^T\Sigma Qb.$$

Po uporządkowaniu powyższego równania oraz po przeniesieniu wszystkich składników poza d na drugą stronę równości otrzymamy

$$d = y - \frac{2(1-p)}{3p}\Sigma Qb.$$

W ten sposób uzyskaliśmy wartości nowych węzłów, w których będą się przecinały kolejne funkcje składające się na splajn kubiczny.

Poniżej przykład dopasowania wygładzonej funkcji sklejanej dla przykładowych węzłów i różnych miar dopasowania oraz gładkości.



Rysunek 7: Wygładzanie za pomocą funkcji sklejanej dla różnej miary dopasowania i gładkości