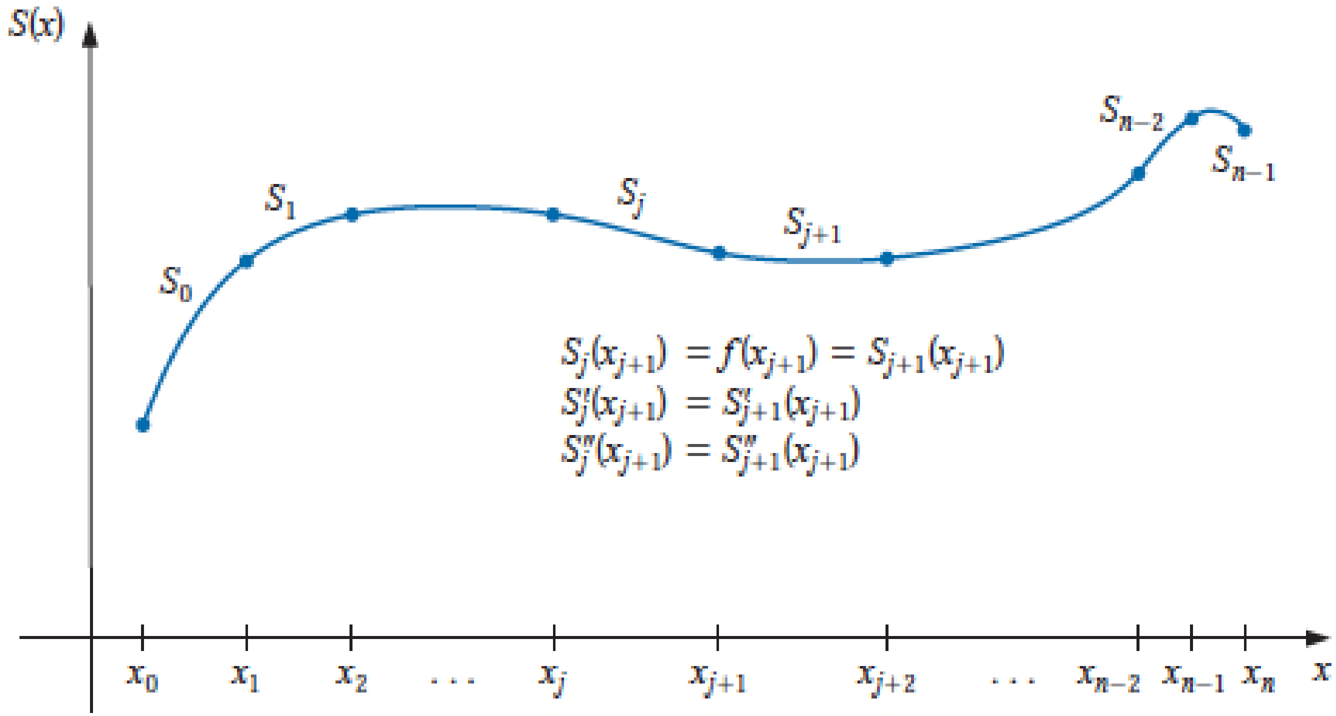
Αριθμητική Ανάλυση

Αργύρης Δελής

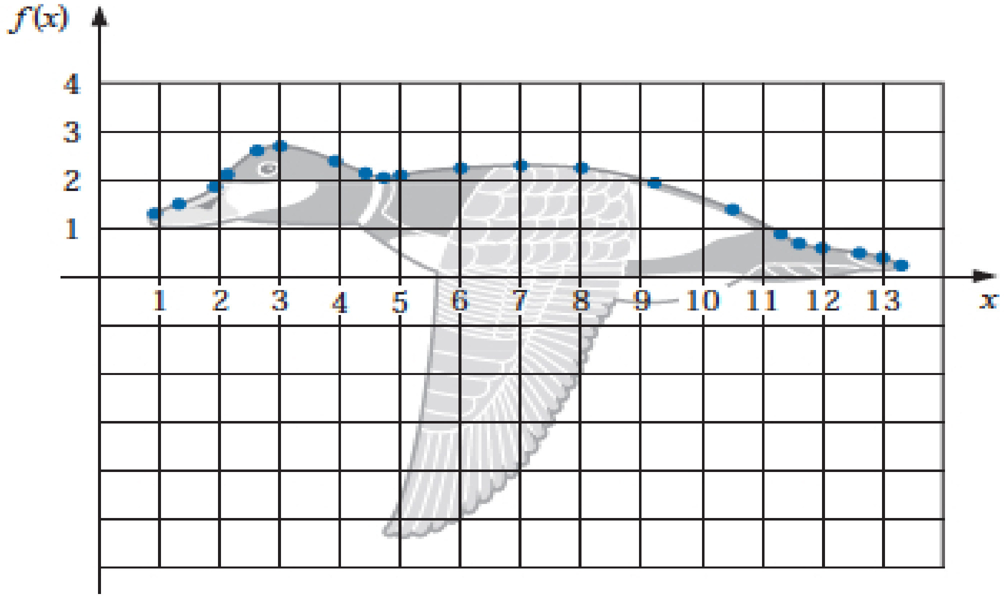
Διάλεξη 11η

Σχολή Μηχανικών Παραγωγής & Διοίκησης
Πολυτεχνείο Κρήτης

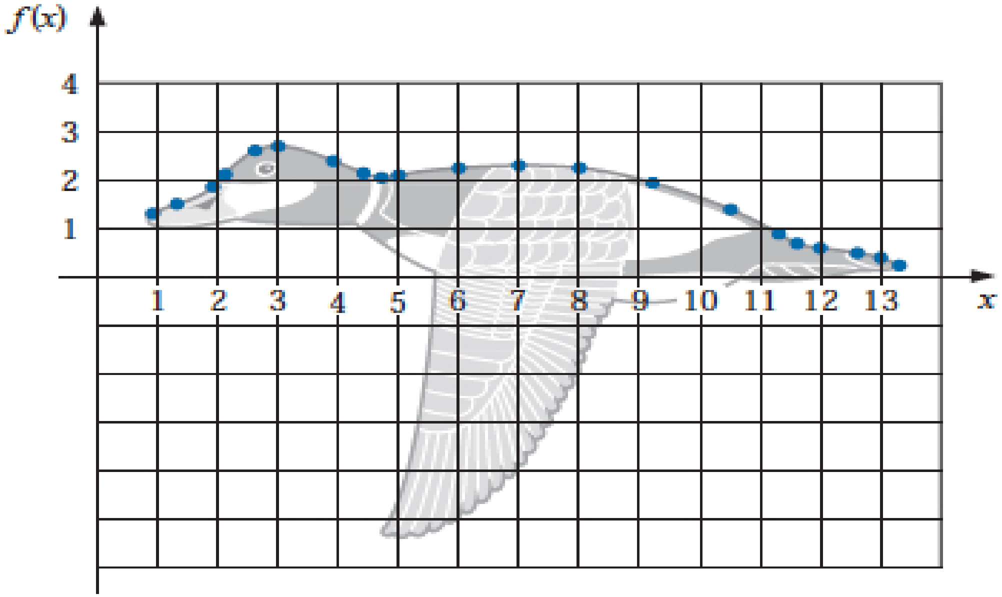
SPLINES

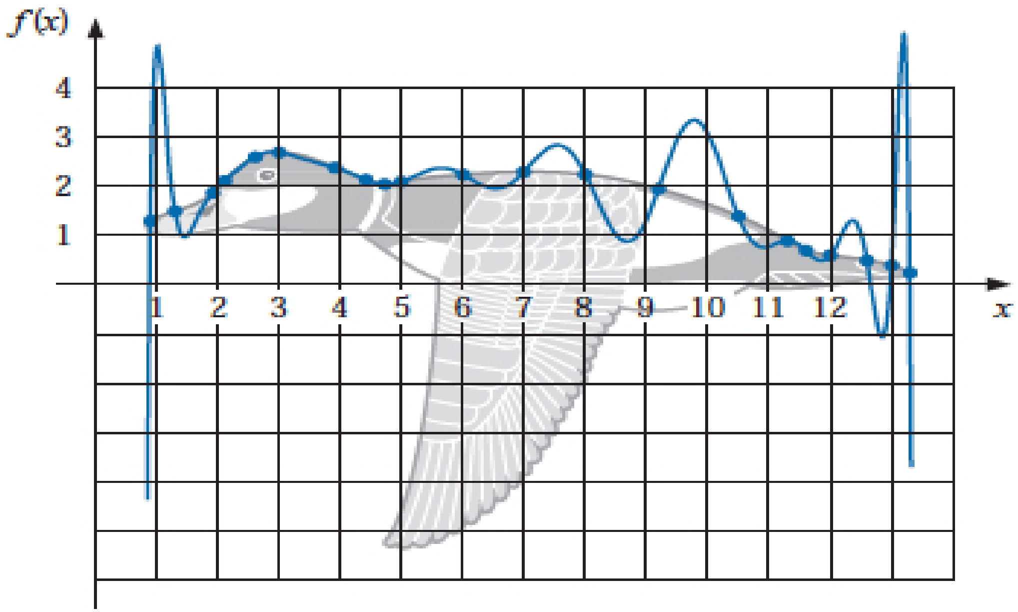

$S(x)$
S_0
S_1
S_j
S_{j+1}
S_{n-2}
S_{n-1}
$S_j(x_{j+1}) = f(x_{j+1}) = S_{j+1}(x_{j+1})$
$S_j'(x_{j+1}) = S_{j+1}'(x_{j+1})$
$S_j''(x_{j+1}) = S_{j+1}''(x_{j+1})$
x_0 x_1 x_2 . . . x_j x_{j+1} x_{j+2} . . . x_{n-2} x_{n-1} x_n x

SPLINES vs Πολυωνυμική παρεμβολή



SPLINES vs Πολυωνυμική παρεμβολή





Η συνάρτηση $S(x)$ θέλουμε να ικανοποιεί τα

(1) $S(x_i) = f(x_i) = y_i$ για $i = 0, \ldots, n$ ($n + 1$ συνθήκες)

(2) Η $S(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n - 1$ συνθήκες)

(3) Η $S'(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n - 1$ συνθήκες)

(4) Η $S''(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n - 1$ συνθήκες)

Συνολικά έχουμε $4n - 2$ συνθήκες για $4n$ αγνώστους δηλ. έχουμε 2 βαθμούς ελευθερίας.

Η συνάρτηση $S(x)$ θέλουμε να ικανοποιεί τα

(1) $S(x_i) = f(x_i) = y_i$ για $i = 0, \ldots, n$ ($n + 1$ συνθήκες)

(2) Η $S(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n - 1$ συνθήκες)

(3) Η $S'(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n - 1$ συνθήκες)

(4) Η $S''(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n - 1$ συνθήκες)

Συνολικά έχουμε $4n - 2$ συνθήκες για $4n$ αγνώστους δηλ. έχουμε 2 βαθμούς ελευθερίας.

Χρειαζόμαστε 2 επιπλέον συνθήκες οι οποίες θα σχετίζονται με τους συνοριακούς κόμβους $x_0 = a$ και $x_n = b$ (**συνοριακές συνθήκες**)

Η συνάρτηση $S(x)$ θέλουμε να ικανοποιεί τα

(1) $S(x_i) = f(x_i) = y_i$ για $i = 0, \ldots, n$ ($n+1$ συνθήκες)

(2) Η $S(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n-1$ συνθήκες)

(3) Η $S'(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n-1$ συνθήκες)

(4) Η $S''(x)$ συνεχής στους κόμβους $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ($n-1$ συνθήκες)

Συνολικά έχουμε $4n-2$ συνθήκες για $4n$ αγνώστους δηλ. έχουμε 2 βαθμούς ελευθερίας.

Χρειαζόμαστε 2 επιπλέον συνθήκες οι οποίες θα σχετίζονται με τους συνοριακούς κόμβους $x_0 = a$ και $x_n = b$ (**συνοριακές συνθήκες**)

Μπορούμε να θέσουμε διαφόρων τύπων συνοριακές συνθήκες.

Φυσικές Κυβικές splines

Εδώ οι συνοριακές συνθήκες είναι $s''(x_0) = s''(x_n) = 0$, με $h_i = x_{i+1} - x_i$ τα βήματα κατασκευής είναι:

Φυσικές Κυβικές splines

Εδώ οι συνοριακές συνθήκες είναι $s''(x_0)=s''(x_n)=0$, με $h_i = x_{i+1} - x_i$ τα βήματα κατασκευής είναι:

Βήμα 1: Έστω ότι γνωρίζουμε τις τιμές $s_i''(x_i) := s_i'', \ \forall i = 0, \ldots n$.
Στη πραγματικότητα ΔΕΝ τις γνωρίζουμε (και αυτοί θα είναι οι **άγνωστοι** μας), γνωρίζουμε όμως ότι η $S''(x)$ είναι συνεχής.

Φυσικές Κυβικές splines

Εδώ οι συνοριακές συνθήκες είναι $s''(x_0)=s''(x_n)=0$, με $h_i = x_{i+1} - x_i$ τα βήματα κατασκευής είναι:

Βήμα 1: Έστω ότι γνωρίζουμε τις τιμές $s_i''(x_i) := s_i'', \ \forall i = 0, \ldots n$.
Στη πραγματικότητα ΔΕΝ τις γνωρίζουμε (και αυτοί θα είναι οι **άγνωστοι** μας), γνωρίζουμε όμως ότι η $S''(x)$ είναι συνεχής.
Βήμα 2: $\big[$**κατασκευή της** $s_i''(x)\big]$ Η $S''(x)$ είναι **γραμμική** και συμβολίζουμε $s_i''(x_{i+1}) := s_{i+1}''$ άρα η $s_i''(x)$ ευθεία μεταξύ s_i'' και s_{i+1}'' δηλ.,

$$s_i''(x) = \frac{1}{h_i}\Big(s_i''(x_{i+1} - x) + s_{i+1}''(x_i - x)\Big), \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

Φυσικές Κυβικές splines

Εδώ οι συνοριακές συνθήκες είναι $s''(x_0) = s''(x_n) = 0$, με $h_i = x_{i+1} - x_i$ τα βήματα κατασκευής είναι:

Βήμα 1: Έστω ότι γνωρίζουμε τις τιμές $s_i''(x_i) := s_i'', \ \forall i = 0, \dots n.$
Στη πραγματικότητα ΔΕΝ τις γνωρίζουμε (και αυτοί θα είναι οι **άγνωστοι** μας), γνωρίζουμε όμως ότι η $S''(x)$ είναι συνεχής.

Βήμα 2: [**κατασκευή της $s_i''(x)$**] Η $S''(x)$ είναι **γραμμική** και συμβολίζουμε $s_i''(x_{i+1}) := s_{i+1}''$ άρα η $s_i''(x)$ ευθεία μεταξύ s_i'' και s_{i+1}'' δηλ.,

$$s_i''(x) = \frac{1}{h_i}\Big(s_i''(x_{i+1} - x) + s_{i+1}''(x_i - x)\Big), \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

Βήμα 3:[**υπολογισμός της $s_i(x)$**] Υπολογίζουμε την $s_i(x)$ ολοκληρώνοντας 2 φορές την $s_i''(x)$

$$s_i(x) = \frac{1}{6h_i}\Big(s_i''(x_{i+1}-x)^3 + s_{i+1}''(x-x_i)^3\Big) + C_i(x-x_i) + D_i(x_{i+1}-x) \quad (1)$$

Βήμα 4:[**Υπολογισμός των σταθερών C_i, D_i – επιβολή συνέχειας**] Για κάθε διάστημα $[x_i, x_{i+1}]$ θελουμε $s_i(x_i) = y_i$ και $s_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$ τις οποίες αντικαθιστούμε στην (1), οπότε λαμβάνουμε,

$$D_i = \frac{y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} s_i'' \qquad C_i = \frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i}{6} s_{i+1}''$$

άρα έχουμε **την μορφή της συνάρτησης** $\forall x \in [x_i, x_{i+1}]$

$$s_i(x) = \frac{1}{6h_i}\left(s_i''(x_{i+1}-x)^3 + s_{i+1}''(x-x_i)^3\right) + \left(\frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i s_{i+1}''}{6}\right)(x-x_i) + \left(\frac{y_i}{h_i} - \frac{h_i s_i''}{6}\right)(x_{i+1}-x) \quad (2)$$

Βήμα 4:[**Υπολογισμός των σταθερών C_i, D_i – επιβολή συνέχειας**] Για κάθε διάστημα $[x_i, x_{i+1}]$ θελουμε $s_i(x_i) = y_i$ και $s_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$ τις οποίες αντικαθιστούμε στην (1), οπότε λαμβάνουμε,

$$D_i = \frac{y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6}s_i'' \qquad C_i = \frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i}{6}s_{i+1}''$$

άρα έχουμε **την μορφή της συνάρτησης** $\forall x \in [x_i, x_{i+1}]$

$$s_i(x) = \frac{1}{6h_i}\left(s_i''(x_{i+1}-x)^3 + s_{i+1}''(x-x_i)^3\right) + \left(\frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i s_{i+1}''}{6}\right)(x-x_i) + \left(\frac{y_i}{h_i} - \frac{h_i s_i''}{6}\right)(x_{i+1}-x) \tag{2}$$

Βήμα 5:[**Παραγώγιση της $s_i(x)$ και επιβολή συνέχειας**] Παραγώγιση της (2)

$$s_i'(x) = \frac{-1}{2h_i}\left(s_i''(x_{i+1}-x)^2 + s_{i+1}''(x_i-x)^2\right) + \frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i}{6}s_{i+1}'' - \frac{y_i}{h_i} + \frac{h_i}{6}s_i'' \tag{3}$$

Θέλουμε $s_i'(x_i) = s_{i-1}'(x_i)$ συνεπώς

$$s_i'(x_i) = -\frac{h_i}{6}s_{i+1}'' - \frac{h_i}{3}s_i'' + \overbrace{\frac{1}{h_i}(y_{i+1} - y_i)}^{b_i} \tag{4}$$

$$s_{i-1}'(x_i) = \frac{h_{i-1}}{6}s_{i-1}'' + \frac{h_{i-1}}{3}s_i'' + \overbrace{\frac{1}{h_{i-1}}(y_i - y_{i-1})}^{b_{i-1}} \tag{5}$$

. . .Βήμα 5 . . . Θέλουμε $s'_i(x_i) = s'_{i-1}(x_i)$ συνεπώς $(4) = (5)$

$$h_{i-1}s''_{i-1} + 2(h_i + h_{i-1})s''_i + h_i s''_{i+1} = 6(b_i - b_{i-1}), \quad i = 1, \ldots, n-1 \quad (6)$$

Δηλ. ένα γραμμικό σύστημα $(n-1) \times (n-1)$ εξισώσεων.

. . .Βήμα 5 . . . Θέλουμε $s_i'(x_i) = s_{i-1}'(x_i)$ συνεπώς $(4) = (5)$

$$h_{i-1}s_{i-1}'' + 2(h_i + h_{i-1})s_i'' + h_i s_{i+1}'' = 6(b_i - b_{i-1}), \quad i = 1, \ldots, n-1 \quad (6)$$

Δηλ. ένα γραμμικό σύστημα $(n-1) \times (n-1)$ εξισώσεων.

Βήμα 6: [**Το (πλήρες) γραμμικό σύστημα για τους αγνώστους** s_i'']

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & & & & \\ h_0 & u_1 & h_1 & & & & & \\ & h_1 & u_2 & h_2 & & & & \\ & & h_2 & u_3 & h_3 & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & h_{n-3} & u_{n-2} & h_{n-2} & \\ & & & & & h_{n-2} & u_{n-1} & h_{n-1} \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_0'' \\ s_1'' \\ s_2'' \\ s_3'' \\ \vdots \\ s_{n-2}'' \\ s_{n-2}'' \\ s_n'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{n-2} \\ v_{n-1} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

όπου $u_i = 2(h_i + h_{i-1})$ και $v_i = 6(b_i - b_{i-1})$. Το $(n+1) \times (n+1)$ σύστημα (7) έχει **μοναδική λύση** την οποία χρησιμοποιούμε στη (2) για να υπολογίσουμε την κάθε $s_i(x) \in [x_i, x_{i+1}]$.

Άλλες **συνοριακές συνθήκες** που μπορεί να εφαρμοστούν

$$\begin{cases} s_0'(x_0) = f'(x_0), \\ s_n'(x_n) = f'(x_n) \end{cases} \quad \text{ή} \quad \begin{cases} s_0'(x_0) = C_0, \\ s_n'(x_n) = C_1 \end{cases} \quad (\textbf{clamped cubic splines}) \tag{8}$$

ή

$$\begin{cases} s_0''(x_0) = f''(x_0)(\text{ ή } C_0), \\ s_n''(x_n) = f''(x_n)(\text{ ή } C_1) \end{cases} \tag{9}$$

Και για τις δύο αυτές περιπτώσεις το γραμμικό σύστημα που προκύπτει είναι τριδιαγώνιο, με μόνη διαφορά στην πρώτη και την τελευταία εξίσωση που πρέπει να υπολογιστούν κατάλληλα. Για τις συνθήκες (9) γνωρίζουμε αμέσως 2 αγνώστους ενώ για τις συνθήκες (8) χρησιμοποιούμε την εξίσωση (3).

Άλλες **συνοριακές συνθήκες** που μπορεί να εφαρμοστούν

$$\begin{cases} s_0'(x_0) = f'(x_0), \\ s_n'(x_n) = f'(x_n) \end{cases} \quad \text{ή} \quad \begin{cases} s_0'(x_0) = C_0, \\ s_n'(x_n) = C_1 \end{cases} \quad (\textbf{clamped cubic splines}) \tag{8}$$

ή

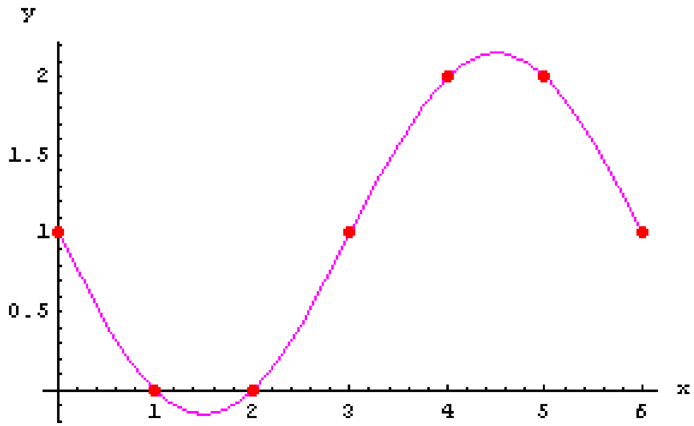
$$\begin{cases} s_0''(x_0) = f''(x_0)(\text{ ή } C_0), \\ s_n''(x_n) = f''(x_n)(\text{ ή } C_1) \end{cases} \tag{9}$$

Και για τις δύο αυτές περιπτώσεις το γραμμικό σύστημα που προκύπτει είναι τριδιαγώνιο, με μόνη διαφορά στην πρώτη και την τελευταία εξίσωση που πρέπει να υπολογιστούν κατάλληλα. Για τις συνθήκες (9) γνωρίζουμε αμέσως 2 αγνώστους ενώ για τις συνθήκες (8) χρησιμοποιούμε την εξίσωση (3).

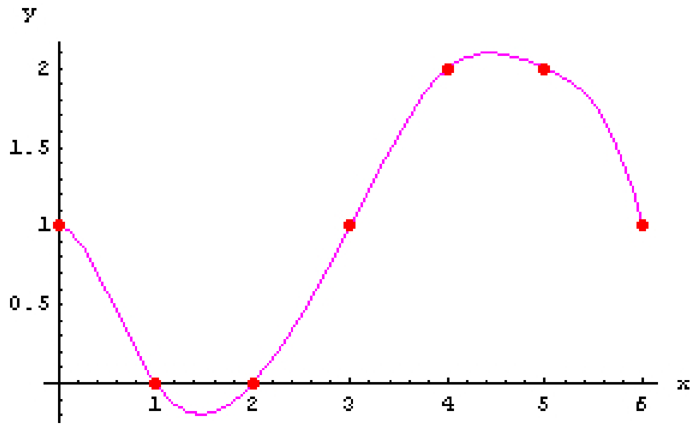
Οι συνοριακές συνθήκες, μηδενισμού των δευτέρων παραγώγων στα άκρα, στη φυσική spline αναγκάζουν τη συνάρτηση να γίνει γραμμική εκτός του διαστήματος παρεμβολής, χωρίς να επηρεάζουν την ομαλότητά της

Παράδειγμα: Να κατασκευαστεί η φυσική (natural) και η clamped κυβική spline με $S'(0) = -0.2, S'(6) = -2.5$ spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα: $(0,1),(1,0),(2,0),(3,10(4,2),(5,2),(6,1)$

Παράδειγμα: Να κατασκευαστεί η φυσική (natural) και η clamped κυβική spline με $S'(0) = -0.2, S'(6) = -2.5$ spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα: $(0, 1), (1, 0), (2, 0), (3, 10(4, 2), (5, 2), (6, 1)$

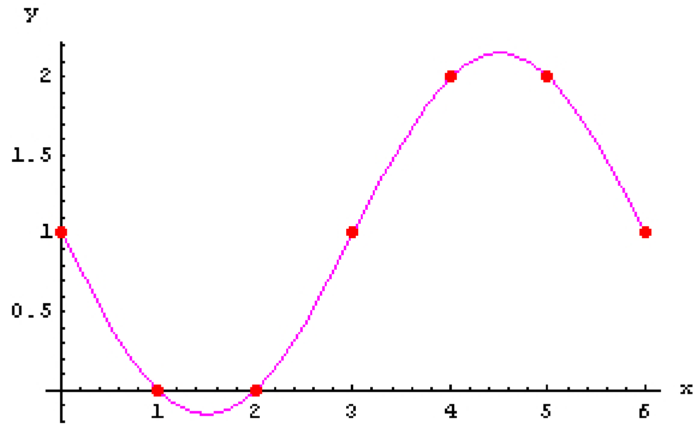


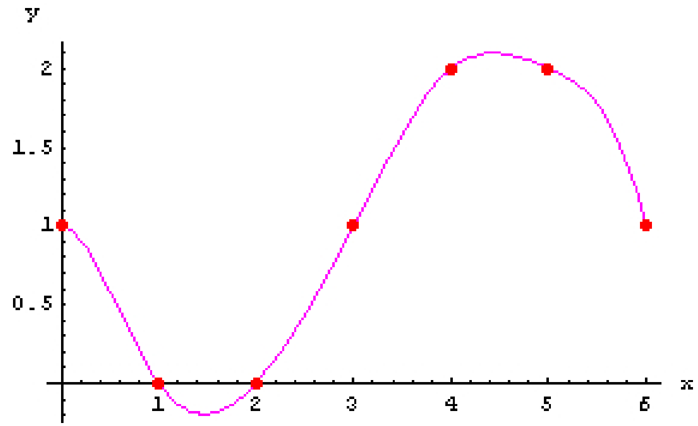
Φυσική



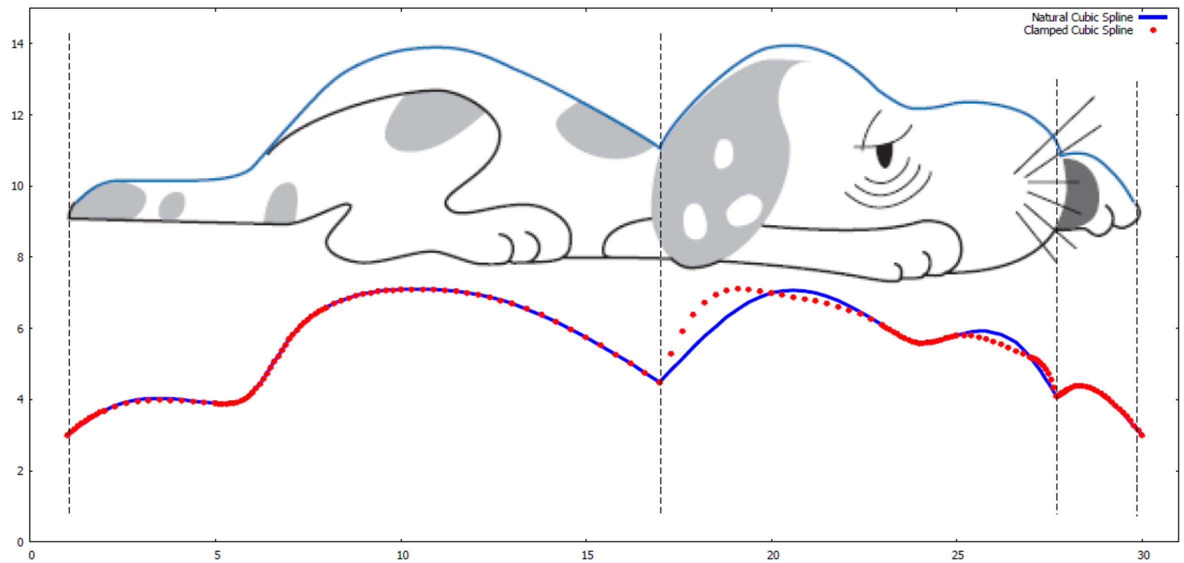
clamped

Παράδειγμα: Να κατασκευαστεί η φυσική (natural) και η clamped κυβική spline με $S'(0) = -0.2, S'(6) = -2.5$ spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα: $(0,1), (1,0), (2,0), (3, 10(4,2), (5,2), (6,1)$





Φυσική clamped



Άσκηση Να κατασκευαστεί η **φυσική κυβική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **φυσική κυβική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Λύση Το γραμμικό σύστημα (7) τώρα είναι

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ h_0 & u_1 & h_1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_0'' \\ s_1'' \\ s_2'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ v_1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{10}$$

Υπολογίζουμε λοιπόν τα $h_0, h_1, b_0, b_1, u_1, v_1$ και έχουμε $h_0 = h_1 = 1$, $b_0 = \frac{1}{h_0}(y_1 - y_0) = 1$, $b_1 = \frac{1}{h_1}(y_2 - y_1) = -3$ και

$u_1 = 2(h_0 + h_1) = 4$, $v_1 = 6(b_1 - b_0) = -24$.

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **φυσική κυβική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Λύση Το γραμμικό σύστημα (7) τώρα είναι

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ h_0 & u_1 & h_1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_0'' \\ s_1'' \\ s_2'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ v_1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{10}$$

Υπολογίζουμε λοιπόν τα $h_0, h_1, b_0, b_1, u_1, v_1$ και έχουμε $h_0 = h_1 = 1$, $b_0 = \frac{1}{h_0}(y_1 - y_0) = 1, \;\; b_1 = \frac{1}{h_1}(y_2 - y_1) = -3$ και

$u_1 = 2(h_0 + h_1) = 4, \;\; v_1 = 6(b_1 - b_0) = -24.$

Η λύση του γραμμικού συστήματος (10) είναι

$$\begin{bmatrix} s_0'' \\ s_1'' \\ s_2'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Η λύση του γραμμικού συστήματος (10) είναι

$$\begin{bmatrix} s_0'' \\ s_1'' \\ s_2'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Από την εξίσωση (2)

$$s_i(x)=\frac{1}{6h_i}\left(s_i''(x_{i+1}-x)^3+s_{i+1}''(x-x_i)^3\right)+\left(\frac{y_{i+1}}{h_i}-\frac{h_i s_{i+1}''}{6}\right)(x-x_i)+\left(\frac{y_i}{h_i}-\frac{h_i s_i''}{6}\right)(x_{i+1}-x)$$

Η λύση του γραμμικού συστήματος (10) είναι

$$\begin{bmatrix} s_0'' \\ s_1'' \\ s_2'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Από την εξίσωση (2)

$$s_i(x)=\frac{1}{6h_i}\left(s_i''(x_{i+1}-x)^3+s_{i+1}''(x-x_i)^3\right)+\left(\frac{y_{i+1}}{h_i}-\frac{h_i s_{i+1}''}{6}\right)(x-x_i)+\left(\frac{y_i}{h_i}-\frac{h_i s_i''}{6}\right)(x_{i+1}-x)$$

αντικαθιστώντας έχουμε

$$S(x) = \begin{cases} s_0(x) = -(x+1)^3 + 3(x+1) - x - 1, & x \in [-1, 0] \\ s_1(x) = -(1-x)^3 - x + 3(1-x), & x \in [0, 1] \end{cases}$$

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **τετραγωνική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα με συνοριακή συνθήκη $S'(-1) = 0$

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **τετραγωνική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα με συνοριακή συνθήκη $S'(-1) = 0$

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Λύση Η $S(x) = \begin{cases} s_0(x) = a_0x^2 + b_0x + c_0 & x \in [-1, 0] \\ s_1(x) = a_1x^2 + b_1x + c_1, & x \in [0, 1] \end{cases}$

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **τετραγωνική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα με συνοριακή συνθήκη $S'(-1) = 0$

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Λύση Η $S(x) = \begin{cases} s_0(x) = a_0x^2 + b_0x + c_0 & x \in [-1, 0] \\ s_1(x) = a_1x^2 + b_1x + c_1, & x \in [0, 1] \end{cases}$

Άρα έχω 6 αγνώστους $a_0, b_0, c_0, a_1, b_1, c_1$ και έχω τις συνθήκες,

$s_0(-1) = 1$

$s_0(0) = 2 = s_1(0)$, από συνέχεια $S(x)$ στο 0

$s_0'(0) = s_1'(0)$, από συνέχεια $S'(x)$ στο 0

$s_1(1) = -1$

$s_0'(-1) = 0$, από δοσμένη συνοριακή συνθήκη

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **τετραγωνική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα με συνοριακή συνθήκη $S'(-1) = 0$

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **τετραγωνική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα με συνοριακή συνθήκη $S'(-1) = 0$

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Λύση Η $S(x) = \begin{cases} s_0(x) = a_0x^2 + b_0x + c_0 & x \in [-1, 0] \\ s_1(x) = a_1x^2 + b_1x + c_1, & x \in [0, 1] \end{cases}$

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **τετραγωνική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα με συνοριακή συνθήκη $S'(-1) = 0$

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Λύση Η $S(x) = \begin{cases} s_0(x) = a_0 x^2 + b_0 x + c_0 & x \in [-1, 0] \\ s_1(x) = a_1 x^2 + b_1 x + c_1, & x \in [0, 1] \end{cases}$

Άρα έχω 6 αγνώστους $a_0, b_0, c_0, a_1, b_1, c_1$ και έχω τις συνθήκες,

$s_0(-1) = 1 \quad \Rightarrow \quad a_0 - b_0 + c_0 = 1$

$s_0(0) = 2 \quad \Rightarrow \quad c_0 = 2$

$s_1(0) = 2, \quad \Rightarrow \quad c_1 = 2$

$s_0'(0) = s_1'(0),$ από συνέχεια $S'(x)$ στο $0,$ $\quad \Rightarrow \quad b_0 = b_1$

$s_1(1) = -1 \quad \Rightarrow \quad a_1 + b_1 + c_1 = -1$

$s_0'(-1) = 0,$ από συνοριακή συνθήκη, $\quad \Rightarrow \quad -2a_0 + b_0 = 0$

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **τετραγωνική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα με συνοριακή συνθήκη $S'(-1) = 0$

x_i	-1	0	1
$f(x_i) = y_i$	1	2	-1

Λύση Η $S(x) = \begin{cases} s_0(x) = a_0 x^2 + b_0 x + c_0 & x \in [-1, 0] \\ s_1(x) = a_1 x^2 + b_1 x + c_1, & x \in [0, 1] \end{cases}$

Άρα έχω 6 αγνώστους $a_0, b_0, c_0, a_1, b_1, c_1$ και έχω τις συνθήκες,

$s_0(-1) = 1 \quad \Rightarrow \quad a_0 - b_0 + c_0 = 1$

$s_0(0) = 2 \quad \Rightarrow \quad c_0 = 2$

$s_1(0) = 2, \quad \Rightarrow \quad c_1 = 2$

$s_0'(0) = s_1'(0),$ από συνέχεια $S'(x)$ στο $0,$ $\quad \Rightarrow \quad b_0 = b_1$

$s_1(1) = -1 \quad \Rightarrow \quad a_1 + b_1 + c_1 = -1$

$s_0'(-1) = 0,$ από συνοριακή συνθήκη, $\quad \Rightarrow \quad -2a_0 + b_0 = 0$

Αρα, $a_0 = 1, b_0 = 2, a_1 = -5$ και $b_1 = 2.$

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **φυσική κυβική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα

x_i	1	2	3	4
$f(x_i) = y_i$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **φυσική κυβική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα

x_i	1	2	3	4
$f(x_i) = y_i$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$

Λύση Το γραμμικό σύστημα (9) γίνεται

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ h_0 & u_1 & h_1 & 0 \\ 0 & h_1 & u_2 & h_2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_0'' \\ s_1'' \\ s_2'' \\ s_3'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ v_1 \\ v_2 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{11}$$

όπου $h_i = h = 1$

Άσκηση Να κατασκευαστεί η **φυσική κυβική** spline που παρεμβάλλει στα δεδομένα

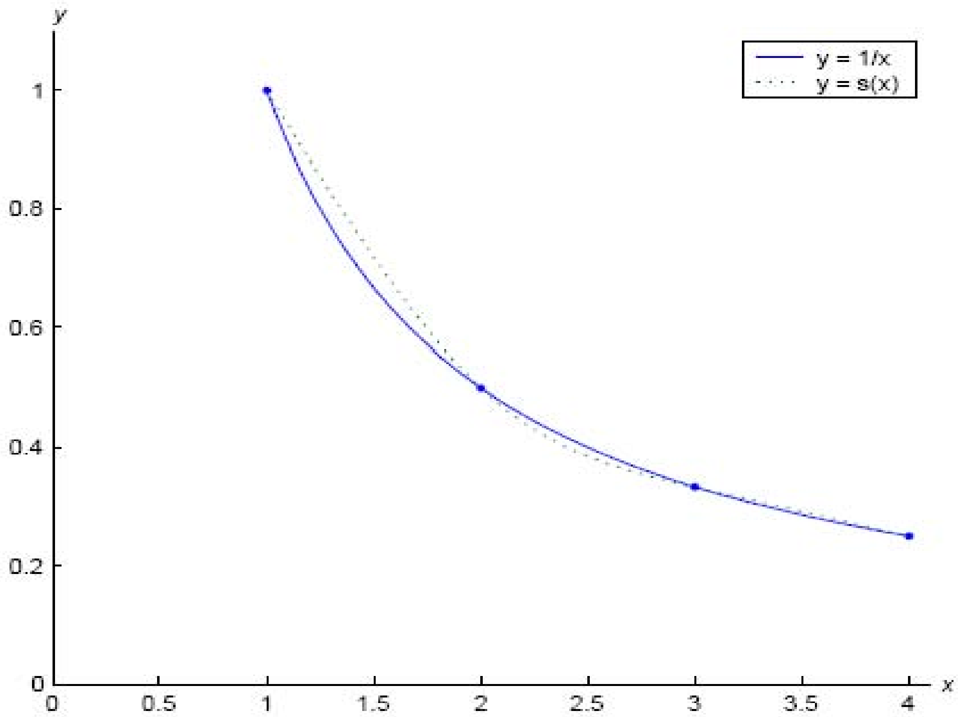
x_i	1	2	3	4
$f(x_i) = y_i$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$

Λύση Το γραμμικό σύστημα (9) γίνεται

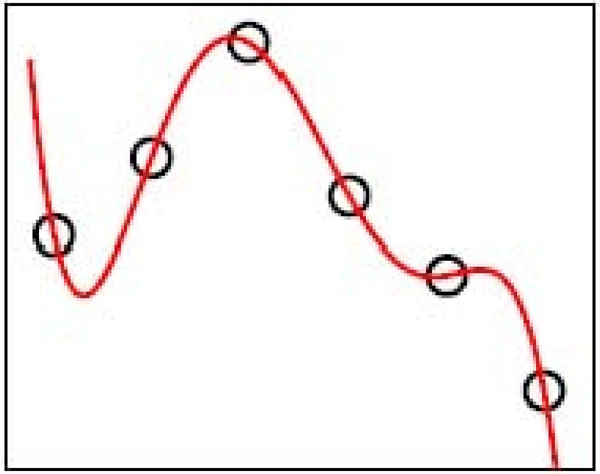
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ h_0 & u_1 & h_1 & 0 \\ 0 & h_1 & u_2 & h_2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_0'' \\ s_1'' \\ s_2'' \\ s_3'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ v_1 \\ v_2 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{11}$$

όπου $h_i = h = 1$

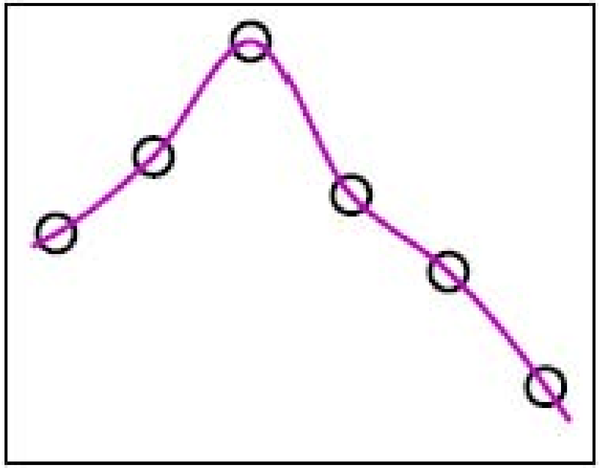
$$S(x)=\begin{cases} s_0(x)=\frac{1}{12}(x-1)^3-\frac{7}{12}(x-1)+1, & x\in[1,2] \\ s_1(x)=\frac{-1}{12}(x-2)^3+\frac{1}{4}(x-2)^2-\frac{1}{3}(x-1)+\frac{1}{2}, & x\in[2,3] \\ s_2(x)=\frac{-1}{12}(x-4)+\frac{1}{4}, & x\in[3,4] \end{cases}$$



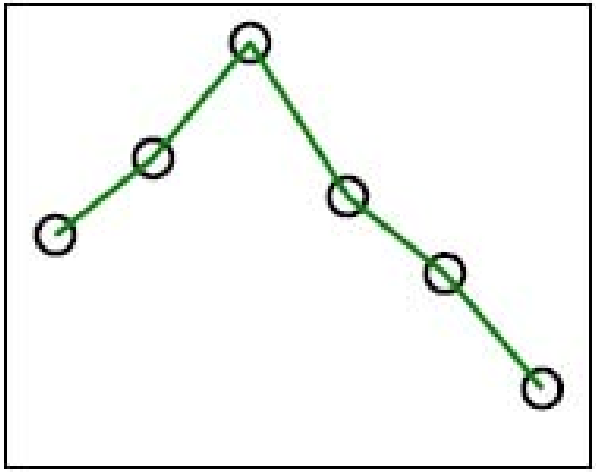
Διαφορετικοί τύποι παρεμβολής στα ίδια δεδομένα



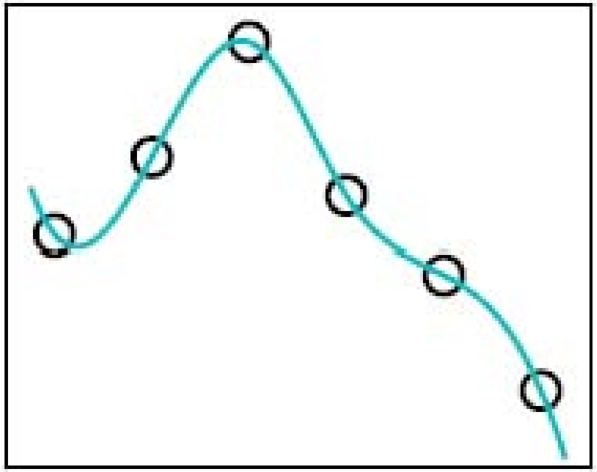
Παρεμβολή με 5ου βαθμού πολυώνυμο



Παρεμβολή με πολυώνυμο Hermite

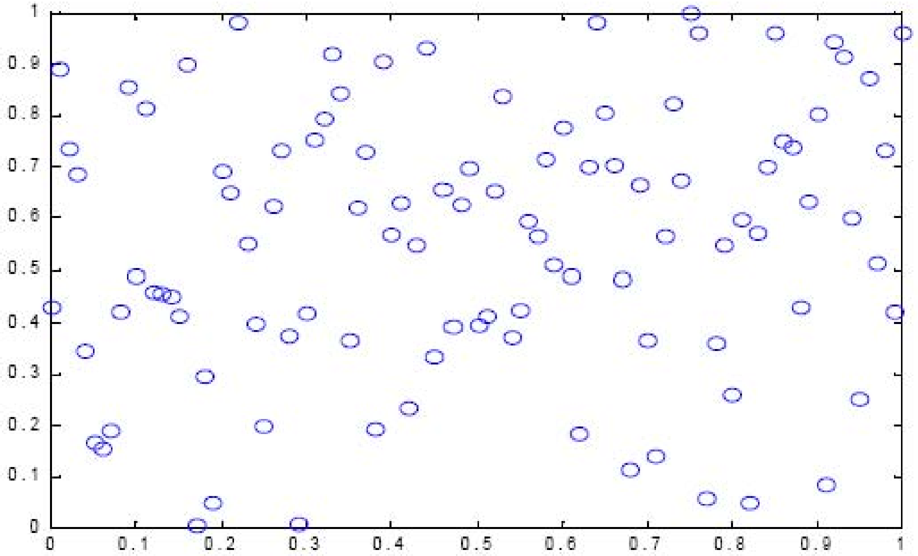


Παρεμβολή με γραμμική spline

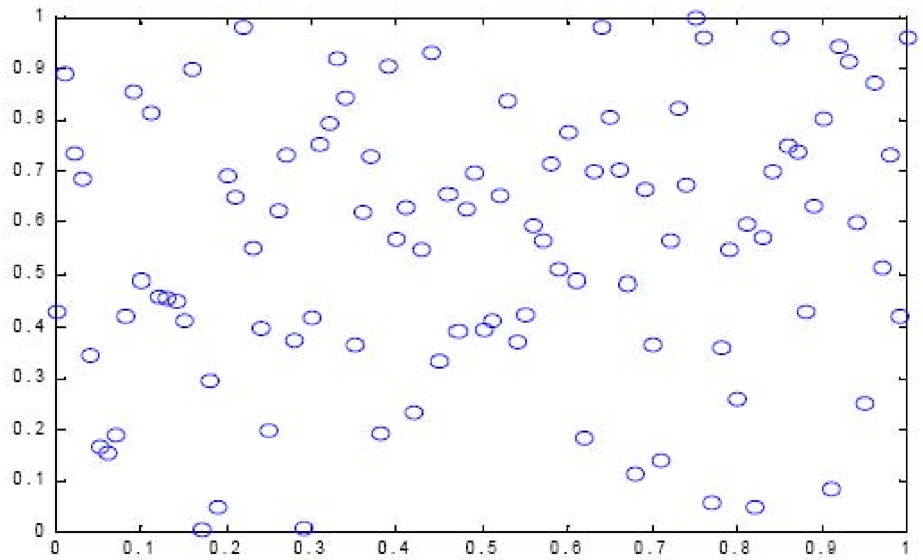


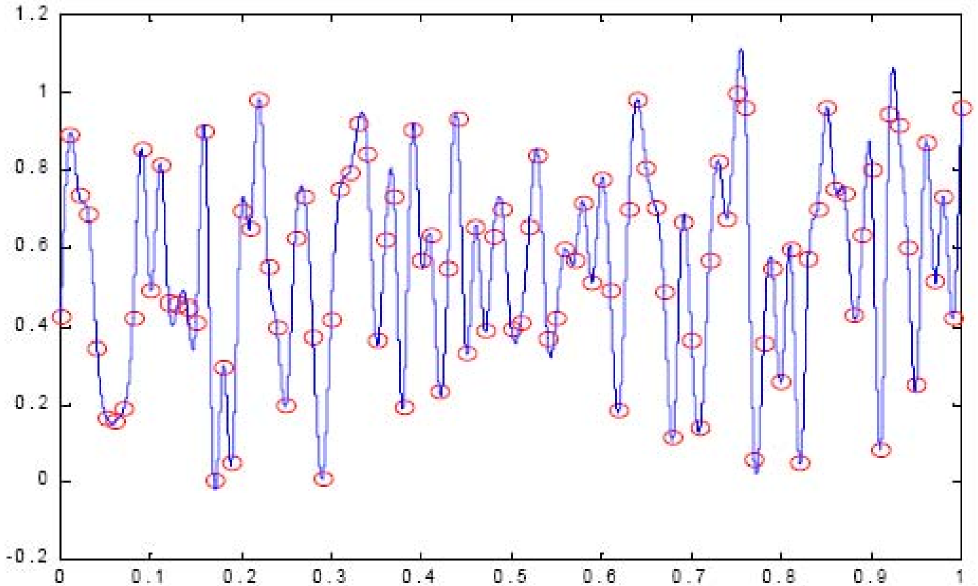
Παρεμβολή με φυσική κυβική spline

Κυβική spline παρεμβολής σε 100 σημεία



Κυβική spline παρεμβολής σε 100 σημεία





Εκτίμηση Σφάλματος Παρεμβολής με κυβικές spline

Θεώρημα Έστω $f \in C^4[a,b]$, $\Delta := a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ και $S \in S_3(\Delta)$ η spline με συνοριακές συνθήκες (8) και έστω

$$h = \max_{1 \leq i \leq n}(x_i - x_{i-1}), \qquad M = \frac{h}{\min_{1 \leq i \leq n}(x_i - x_{i-1})}.$$

Τότε υπάρχουν σταθερές $C_m, m = 0, 1, 2, 3$ (ανεξάρτητες των f και h) τ.ω.

$$||f^{(m)} - S^{(m)}||_\infty \leq C_m h^{4-m} ||f^{(4)}||_\infty$$

για τις εξής τιμές σταθερών

$$C_0 = \frac{5}{384}, \quad C_1 = \frac{1}{24}, \quad C_2 = \frac{3}{8}, \quad C_3 = \max\left\{2, \frac{1}{2}(M + \frac{1}{M})\right\}.$$

Εκτίμηση Σφάλματος Παρεμβολής με κυβικές spline

Θεώρημα Έστω $f \in C^4[a,b]$, $\Delta := a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ και $S \in S_3(\Delta)$ η spline με συνοριακές συνθήκες (8) και έστω

$$h = \max_{1 \le i \le n} (x_i - x_{i-1}), \qquad M = \frac{h}{\min_{1 \le i \le n}(x_i - x_{i-1})}.$$

Τότε υπάρχουν σταθερές $C_m, m = 0, 1, 2, 3$ (ανεξάρτητες των f και h) τ.ω.

$$||f^{(m)} - S^{(m)}||_\infty \le C_m h^{4-m} ||f^{(4)}||_\infty$$

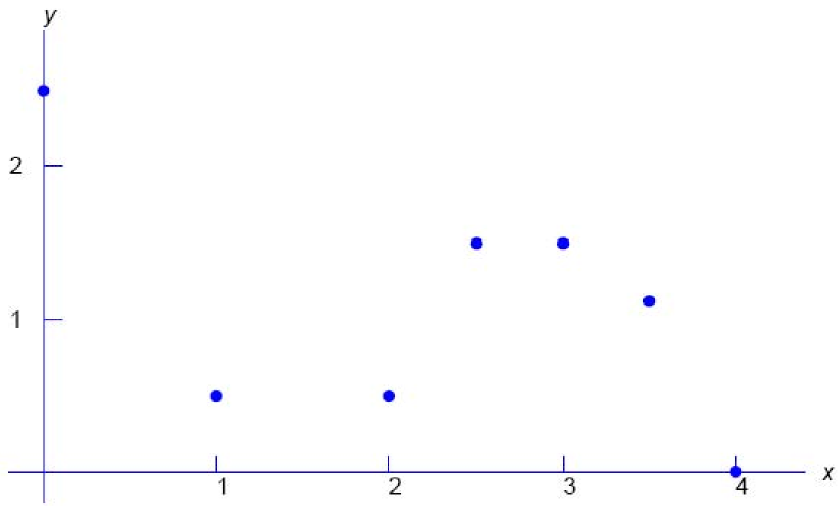
για τις εξής τιμές σταθερών

$$C_0 = \frac{5}{384}, \quad C_1 = \frac{1}{24}, \quad C_2 = \frac{3}{8}, \quad C_3 = \max\left\{2, \frac{1}{2}(M + \frac{1}{M})\right\}.$$

Για μία συνάρτηση $f \in C^4[a,b]$ οι κυβικές spline δίνουν $O(h^4)$ ακρίβεια προσέγγισης καθώς και $O(h^{4-m})$ ακρίβεια για την προσέγγιση των παραγώγων $m-$τάξης.

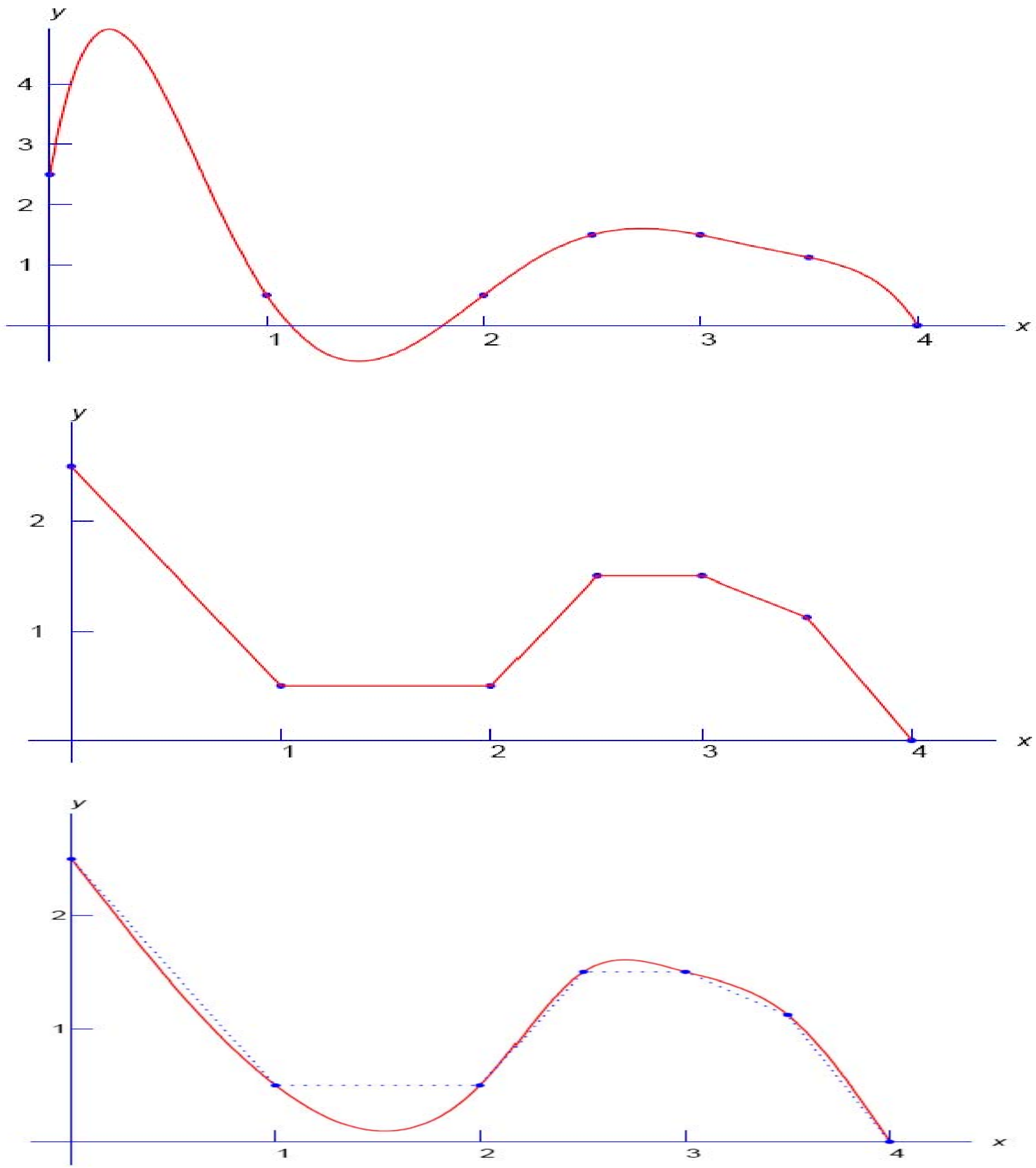
Άσκηση Δίνονται τα δεδομένα

x	0	1	2	2.5	3	3.5	4
y	2.5	0.5	0.5	1.5	1.5	1.125	0



Να υπολογιστούν (α) Το πολυώνυμο παρεμβολής (β) Η κατά τμήματα γραμμική spline και (γ) Η φυσική κυβική spline, που παρεμβάλλουν στα δεδομένα

Τα γραφήματα των απαντήσεων για κάθε ερώτημα:



Συμπληρωματικές Παρατηρήσεις

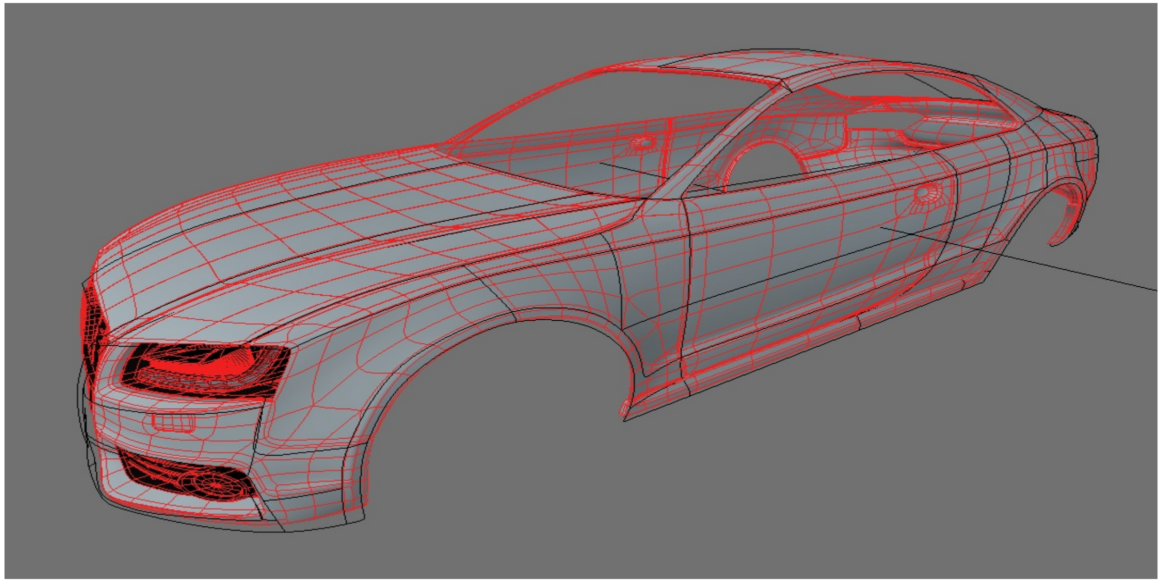
▷ Υπάρχουν και άλλοι τύποι splines (ιδιαίτερα χρήσιμοι στις εφαρμογές)

- (Κυβικές) **Hermite splines** (ισότητας πρώτων παραγώγων στους κόμβους)
- **Bezier splines** (Κυβικές αλλά με άλλα πολυώνυμα βάσης)
- $B-$**splines** (άλλες συναρτήσεις βάσης, δεν ικανοποιούν τις συνθήκες παρεμβολής ακριβώς)
- Non-uniform Rational B-splines (**NURBS**) (με περισσότερο έλεγχο στη μορφή των καμπυλών)

Συμπληρωματικές Παρατηρήσεις

▷ Υπάρχουν και άλλοι τύποι splines (ιδιαίτερα χρήσιμοι στις εφαρμογές)

- (Κυβικές) **Hermite splines** (ισότητας πρώτων παραγώγων στους κόμβους)
- **Bezier splines** (Κυβικές αλλά με άλλα πολυώνυμα βάσης)
- $B-$**splines** (άλλες συναρτήσεις βάσης, δεν ικανοποιούν τις συνθήκες παρεμβολής ακριβώς)
- Non-uniform Rational B-splines (**NURBS**) (με περισσότερο έλεγχο στη μορφή των καμπυλών)



ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4
ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

ΚΕΦ. 4: ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

- Στη (διακριτή) προσέγγιση ελαχίστων τετραγώνων αναφερόμαστε σε τρόπους **προσαρμογής** συναρτήσεων σε γνωστά δεδομένα (data).

ΚΕΦ. 4: ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

- Στη (διακριτή) προσέγγιση ελαχίστων τετραγώνων αναφερόμαστε σε τρόπους **προσαρμογής** συναρτήσεων σε γνωστά δεδομένα (data).

- Θέλουμε να προσαρμόσουμε συναρτήσεις σε δεδομένα οι οποίες να **ελαχιστοποιούν αποστάσεις** (αποκλίσεις-σφάλματα-υπόλοιπα). Οι αποστάσεις υπολογίζονται από τη (διανυσματική) νόρμα που προέρχεται από το εσωτερικό γινόμενο.

ΚΕΦ. 4: ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

- Στη (διακριτή) προσέγγιση ελαχίστων τετραγώνων αναφερόμαστε σε τρόπους **προσαρμογής** συναρτήσεων σε γνωστά δεδομένα (data).

- Θέλουμε να προσαρμόσουμε συναρτήσεις σε δεδομένα οι οποίες να **ελαχιστοποιούν αποστάσεις** (αποκλίσεις-σφάλματα-υπόλοιπα). Οι αποστάσεις υπολογίζονται από τη (διανυσματική) νόρμα που προέρχεται από το εσωτερικό γινόμενο.

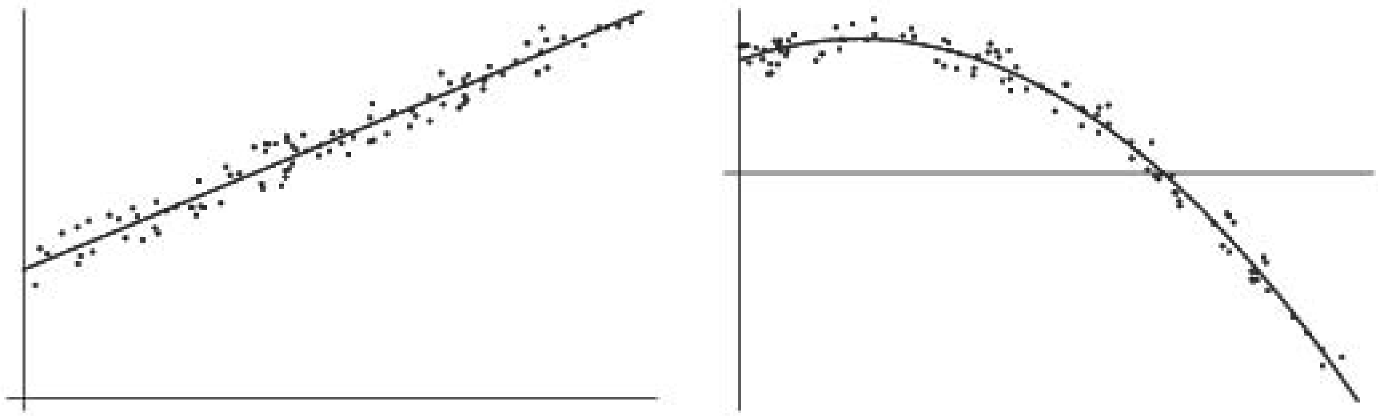
- Συνεπώς πρέπει να υπολογίσουμε την "καλύτερη" στο είδος της συνάρτηση για να πετύχουμε τέτοιου είδους προσεγγίση δηλαδή, τη **βέλτιστη προσέγγιση** από ένα συγκεκριμένο χώρο συναρτήσεων.

ΚΕΦ. 4: ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

- Στη (διακριτή) προσέγγιση ελαχίστων τετραγώνων αναφερόμαστε σε τρόπους **προσαρμογής** συναρτήσεων σε γνωστά δεδομένα (data).

- Θέλουμε να προσαρμόσουμε συναρτήσεις σε δεδομένα οι οποίες να **ελαχιστοποιούν αποστάσεις** (αποκλίσεις-σφάλματα-υπόλοιπα). Οι αποστάσεις υπολογίζονται από τη (διανυσματική) νόρμα που προέρχεται από το εσωτερικό γινόμενο.

- Συνεπώς πρέπει να υπολογίσουμε την “καλύτερη” στο είδος της συνάρτηση για να πετύχουμε τέτοιου είδους προσεγγίση δηλαδή, τη **βέλτιστη προσέγγιση** από ένα συγκεκριμένο χώρο συναρτήσεων.



● Η ιδέα κατασκευής της καλύτερα προσαρμοζόμενης συνάρτησης (**από ένα συγκεκριμένο χώρο συναρτήσεων**) σέ ένα σύνολο n δεδομένων, στηρίζεται στην ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των αποστάσεων των δοσμένων n σημείων από τη προσαρμοζόμενη συνάρτηση.

●Η ιδέα κατασκευής της καλύτερα προσαρμοζόμενης συνάρτησης (**από ένα συγκεκριμένο χώρο συναρτήσεων**) σέ ένα σύνολο n δεδομένων, στηρίζεται στην ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των αποστάσεων των δοσμένων n σημείων από τη προσαρμοζόμενη συνάρτηση.

● Στις εφαρμογές (στατιστική, προσέγγιση πειραματικών δεδομένων , κ.ά.) δίνονται n σημεία $x_i, i = 1, \ldots, n$ και n πραγματικοί αριθμοί $y_i, i = 1, \ldots, n$. Θέλουμε τότε να προσαρμόσουμε μία συνάρτηση $f := f(x, a_1, a_2, \ldots a_m)$ (με αγνώστους $a_1, a_2, \ldots a_m$) τ.ω. το άθροισμα των τετραγώνων των υπολοίπων να είναι ελάχιστο, δηλ.

$$\min \sum_{i=1}^{n} \Big[y_i - f(x_i, a_1, a_2, \ldots a_m)\Big]^2 = \min ||E||_2^2$$

- Η ιδέα κατασκευής της καλύτερα προσαρμοζόμενης συνάρτησης (**από ένα συγκεκριμένο χώρο συναρτήσεων**) σέ ένα σύνολο n δεδομένων, στηρίζεται στην ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των αποστάσεων των δοσμένων n σημείων από τη προσαρμοζόμενη συνάρτηση.

- Στις εφαρμογές (στατιστική, προσέγγιση πειραματικών δεδομένων , κ.ά.) δίνονται n σημεία $x_i, i = 1, \ldots, n$ και n πραγματικοί αριθμοί $y_i, i = 1, \ldots, n$. Θέλουμε τότε να προσαρμόσουμε μία συνάρτηση $f := f(x, a_1, a_2, \ldots a_m)$ (με αγνώστους $a_1, a_2, \ldots a_m$) τ.ω. το άθροισμα των τετραγώνων των υπολοίπων να είναι ελάχιστο, δηλ.

$$\min \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - f(x_i, a_1, a_2, \ldots a_m) \right]^2 = \min ||E||_2^2$$

- Η αναγκαία συνθήκη για να ελαχιστοποιείται η ποσότητα E είναι

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = 0, \quad \text{για} \quad i = 1, \ldots, m$$

Γραμμική Προσέγγιση Ελαχίστων Τετραγώνων

Με τον όρο γραμμική προσέγγιση εννοούμε την προσαρμογή ενός πολυωνύμου p, βαθμού το πολύ ένα **(ευθεία παλινδρόμησης)**, σένα πλήθος σημείων $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$, δηλ. ψάχνουμε

$$\boxed{p(x) = ax + b}$$

Γραμμική Προσέγγιση Ελαχίστων Τετραγώνων

Με τον όρο γραμμική προσέγγιση εννοούμε την προσαρμογή ενός πολυωνύμου p, βαθμού το πολύ ένα **(ευθεία παλινδρόμησης)**, σένα πλήθος σημείων $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$, δηλ. ψάχνουμε

$$\boxed{p(x) = ax + b}$$

και θέλουμε να προσδιορίσουμε τις σταθερές a και b, ε.ω. η συνάρτηση E

$$E(a, b) = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - (ax_i + b) \right]^2, \quad \text{να ελαχιστοποιείται.}$$

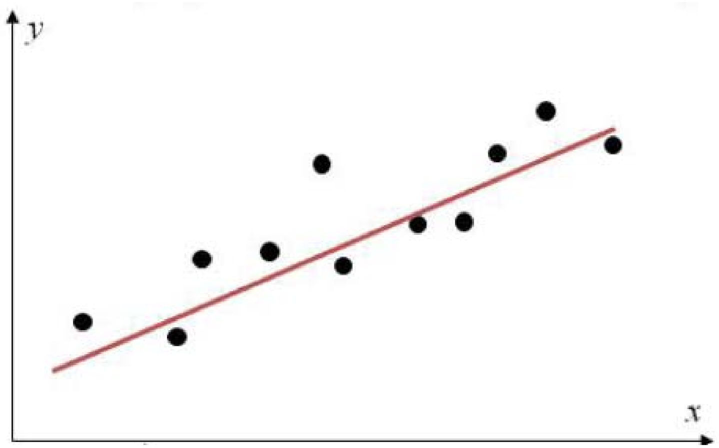
Γραμμική Προσέγγιση Ελαχίστων Τετραγώνων

Με τον όρο γραμμική προσέγγιση εννοούμε την προσαρμογή ενός πολυωνύμου p, βαθμού το πολύ ένα **(ευθεία παλινδρόμησης)**, σένα πλήθος σημείων $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$, δηλ. ψάχνουμε

$$\boxed{p(x) = ax + b}$$

και θέλουμε να προσδιορίσουμε τις σταθερές a και b, ε.ω. η συνάρτηση E

$$E(a,b) = \sum_{i=1}^{n} \Big[y_i - (ax_i + b) \Big]^2, \quad \text{να ελαχιστοποιείται.}$$



Η ελαχιστοποίηση επιτυγχάνεται όταν

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 \quad \Rightarrow \quad -2\sum_{i=1}^{n}\Big[y_i - (ax_i + b)\Big]x_i = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial b} = 0 \quad \Rightarrow \quad -2\sum_{i=1}^{n}\Big[y_i - (ax_i + b)\Big] = 0$$

Η ελαχιστοποίηση επιτυγχάνεται όταν

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 \quad \Rightarrow \quad -2\sum_{i=1}^{n}\Big[y_i - (ax_i + b)\Big]x_i = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial b} = 0 \quad \Rightarrow \quad -2\sum_{i=1}^{n}\Big[y_i - (ax_i + b)\Big] = 0$$

Οι παραπάνω σχέσεις δίνουν τις εξισώσεις (**ΚΑΝΟΝΟΝΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ**)

$$\begin{aligned} a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb &= \sum_{i=1}^{n} y_i \end{aligned}$$

και σε μορφή πινάκων

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i \end{bmatrix}$$

Η ορίζουσα του πίνακα είναι

$$\delta = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^{n} (x_i - x_j)^2 \neq 0$$

Η (μοναδική) λύση του συστήματος είναι

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\delta}\Big[n \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i\Big] \\ b &= \frac{1}{\delta}\Big[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \sum_{i=1}^{n} x_i\Big] \end{aligned}$$

Υπάρχουν περιπτώσεις που τα δεδομένα $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$ δεν είναι εμφανώς διεσπαρμένα κατά τη διεύθυνση κάποιας ευθείας. Το ερώτημα είναι, κατά πόσο η επιλεγείσα προσαρμογή της γραμμικής προσέγγισης στα σημεία είναι ικανοποιητική ή όχι.

Υπάρχουν περιπτώσεις που τα δεδομένα $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$ δεν είναι εμφανώς διεσπαρμένα κατά τη διεύθυνση κάποιας ευθείας. Το ερώτημα είναι, κατά πόσο η επιλεγείσα προσαρμογή της γραμμικής προσέγγισης στα σημεία είναι ικανοποιητική ή όχι.

Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος χρησιμοποιούμε τον **Συντελεστή Συσχέτισης** r και το r^2 Συντελεστής Προσδιορισμού.

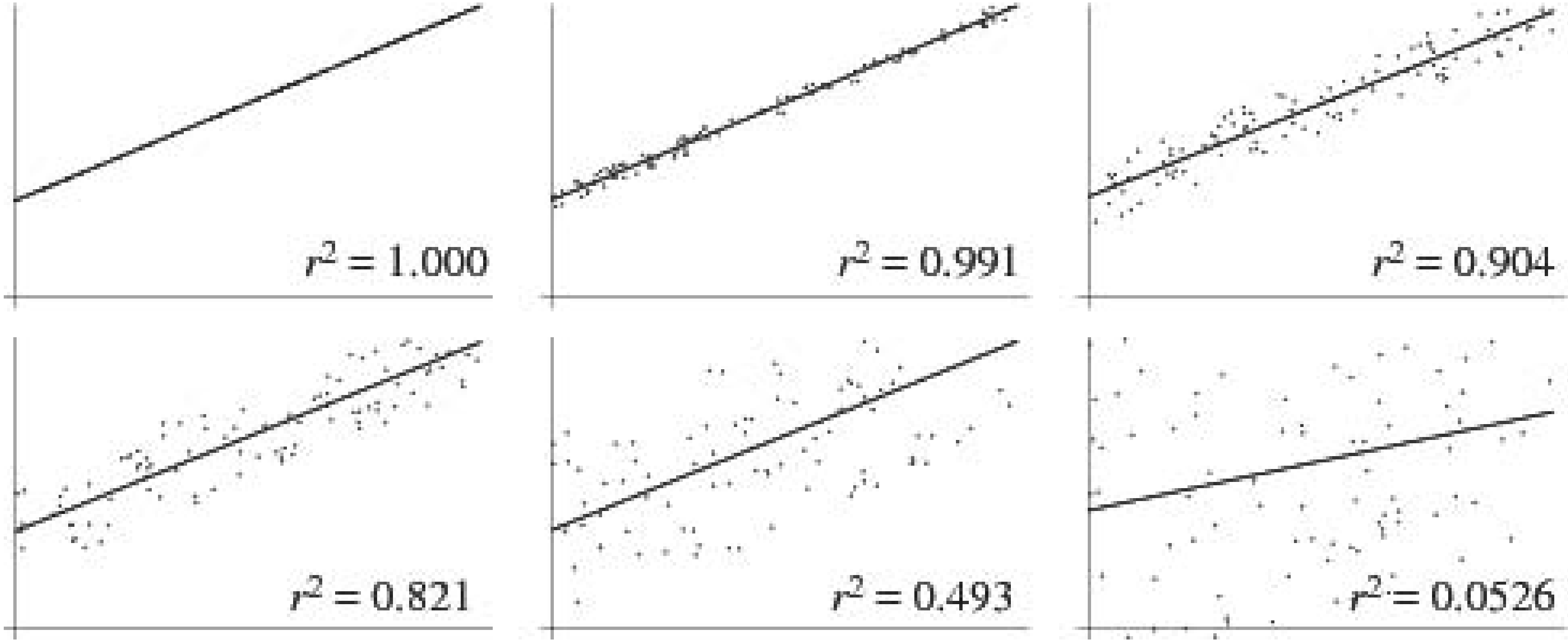
$$r = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{\sqrt{\left(n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right)\left(n\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2\right)}}$$

Υπάρχουν περιπτώσεις που τα δεδομένα $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$ δεν είναι εμφανώς διεσπαρμένα κατά τη διεύθυνση κάποιας ευθείας. Το ερώτημα είναι, κατά πόσο η επιλεγείσα προσαρμογή της γραμμικής προσέγγισης στα σημεία είναι ικανοποιητική ή όχι.

Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος χρησιμοποιούμε τον **Συντελεστή Συσχέτισης** r και το r^2 Συντελεστής Προσδιορισμού.

$$r = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{\sqrt{\left(n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right)\left(n\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2\right)}}$$

Ο συντελεστής r παίρνει τιμές από -1 μέχρι 1 (και το $r^2 \in [0, 1]$) Όσο πιο μικρή είναι η διασπορά των σημείων ακατέρωθεν της ευθείας ελαχίστων τετραγώνων η τόσο η απόλυτη τιμή του συντελεστή τείνει προς τη μονάδα, άρα τόσο καλύτερη η προσέγγιση.



Ο Συντελεστή Συσχέτισης (ή Προσδιορισμού) μετρά την εξάρτηση μεταξύ των x_i και y_i. Όσο πιό μικρή είναι η διασπορά των σημείων εκατέρωθεν της ευθείας, τόσο η εξάρτηση είναι πιο ισχυρή.

Άσκηση Δίνονται τα σημεία $(1,0),(2,3),(3,5),(4,8),(5,10),(6,13)$. Να προσδιοριστεί η ευθεία ελαχίστων τετραγώνων, καθώς και ο συντελεστης προσδιορισμού.

Άσκηση Δίνονται τα σημεία $(1,0), (2,3), (3,5), (4,8), (5,10), (6,13)$. Να προσδιοριστεί η ευθεία ελαχίστων τετραγώνων, καθώς και ο συντελεστης προσδιορισμού.

Λύση Με τα παραπάνω δεδομένα σχηματίζουμε τον πίνακα

i	x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	x_iy_i
1	1	0	1	0	0
2	2	3	4	9	6
3	3	5	9	25	15
4	4	8	16	64	32
5	5	10	25	100	50
6	6	13	36	169	78
$\sum =$	**21**	**39**	**91**	**367**	**181**

'Ασκηση Δίνονται τα σημεία $(1,0), (2,3), (3,5), (4,8), (5,10), (6,13)$. Να προσδιοριστεί η ευθεία ελαχίστων τετραγώνων, καθώς και ο συντελεστης προσδιορισμού.

Λύση Με τα παραπάνω δεδομένα σχηματίζουμε τον πίνακα

i	x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$
1	1	0	1	0	0
2	2	3	4	9	6
3	3	5	9	25	15
4	4	8	16	64	32
5	5	10	25	100	50
6	6	13	36	169	78
$\sum =$	**21**	**39**	**91**	**367**	**181**

Λύνοντας τις κανονικές εξισώσεις

$$\begin{bmatrix} 91 & 21 \\ 21 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 181 \\ 39 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad a = 2.543, \quad b = -2.4$$

και $r^2 = 0.998$ (πολύ ικανοποιητική προσαρμογή).