Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice

4. Funkcje sklejane - spline functions

Marian Bubak, Katarzyna Rycerz

Department of Computer Science
AGH University of Science and Technology
Krakow, Poland
kzajac@agh.edu.pl
dice.cyfronet.pl

Contributors
Mateusz Woś
Michał Matusiak
Kamil Doległo

Outline

Wprowadzenie

- wywodzą się z praktyki inżynierskiej
- do kreślenia elementów konstrukcyjnych w przemyśle używano elastycznej listewki drewnianej (liniału) nazywanej giętką (ang.spline)
- liniał prowadzono przez zadane punkty za pomocą ciężarków
- liniał uginał się wzdłuż krzywej „najgładszej"
- alternatywa: użycie krzywików

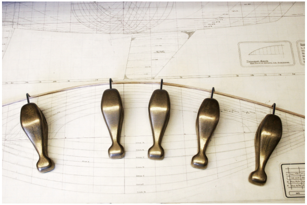


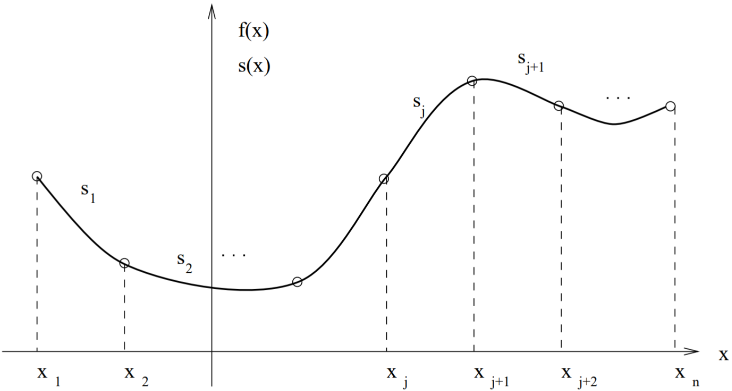
Figure: źródło: http://www.alatown.com/spline/

Definicja funkcji sklejanej

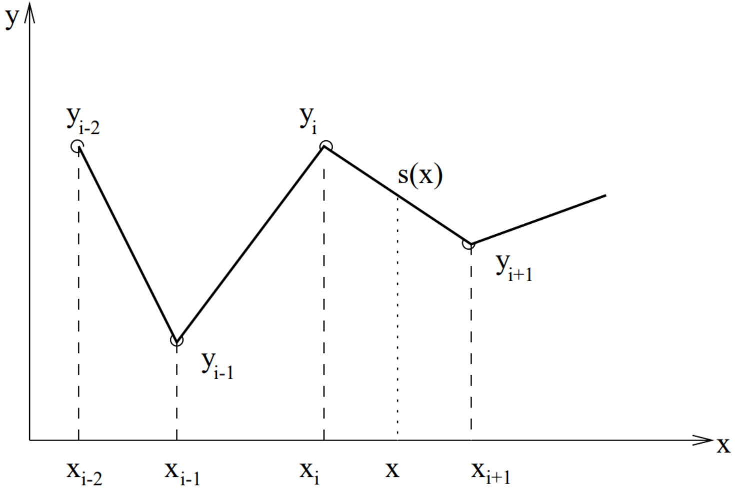
Funkcję $s(x) = s(x, \Delta n)$ określoną na $[a, b]$ nazywamy funkcją sklejaną stopnia m $(m \geqslant 1)$ jeżeli:

- $s(x)$ jest wielomianem stopnia $\leqslant m$ na każdym $[x_i, x_{i+1}]$
- $s(x) \in C^{m-1}[a, b]$

Δn - podział $[a, b]$ na (n-1) podprzedziałów przez węzły:
$a = x_1 < x_2 < \ldots < x_i < \ldots < x_n = b$


f(x)
s(x)
s_1
s_2
s_j
s_{j+1}
. . .
. . .
x
x_1
x_2
x_j
x_{j+1}
x_{j+2}
x_n

Liniowa funkcja sklejana



Liniowa funkcja sklejana

Interpolacja podziałowa, liniowa: Dla $x \in [x_i,\ x_{i+1}]$:

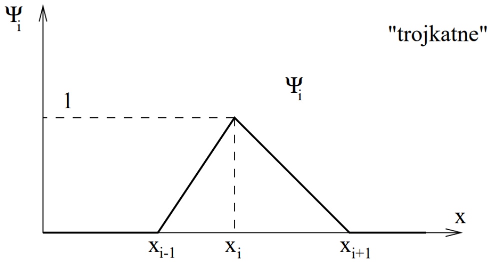
$$y(x) = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) = \underbrace{\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}}_{\Psi_i} y_i + \underbrace{\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}}_{\Psi_{i+1}} y_{i+1} (*)$$

Dla $x \in [x_{i-1},\ x_i]$:

$$y(x) = \underbrace{\frac{x_i - x}{x_i - x_{i-1}}}_{\Psi_{i-1}} y_{i-1} + \underbrace{\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}}_{\Psi_i} y_i$$

Funkcja kształtu (shape function)

$$\Psi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} & x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}] \end{cases}$$



Ważne

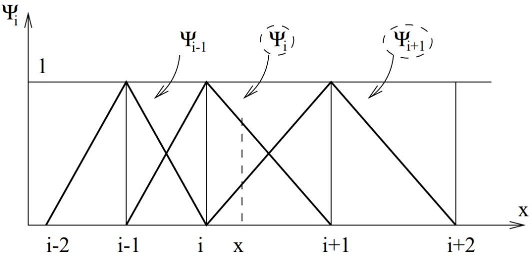
$$\Psi_i(x_j) = \begin{cases} 0 \; dla \; j \neq i \\ 1 \; dla \; j = i \end{cases}$$

Funkcje B-sklejane 1 stopnia

Interpolującą funkcję sklejaną stopnia 1-go można zapisać:

$$s(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \Psi_i(x)$$

gdzie $\Psi_i(x), i = 0, \ldots, n$ - baza przestrzeni liniowej funkcji sklejanych 1-go stopnia



Interpolacja sześcienna (cubic spine)

W praktyce najczęściej używane.

- s_i on $[x_i, x_{i+1}] \rightarrow$ cubic polynomial:
  $s_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$
- $s_i(x_{i+1}) = f(x_{i+1})$
- $s_i(x_{i+1}) = s_{i+1}(x_{i+1})$
- $s_i^{'}(x_{i+1}) = s_{i+1}^{'}(x_{i+1})$
- $s_i^{''}(x_{i+1}) = s_{i+1}^{''}(x_{i+1})$

Wypisując takie warunki dla każdego z "wewnętrznych" punktów intepolacji i dodając warunki brzegowe można stworzyć układ równań i go rozwiązywać
Istnieje jednak sprytniejsze podejście !

Konstrukcja interpolujących sześciennych funkcji sklejanych

Ponieważ $s_i(x)$ - sześcienna,
to $s_i''(x)$ -liniowa na przedziale $[x_i, x_{i+1}]$
wprowadzam $h_i = x_{i+1} - x_i$, wtedy (z (*)):

$$s_i''(x) = s_i''(x_i)\frac{x_{i+1}-x}{h_i} + s_i''(x_{i+1})\frac{x-x_i}{h_i}(**)$$

całkując dwukrotnie otrzymuję:

$$s_i(x) = \frac{s_i''(x_i)}{6h_i}(x_{i+1}-x)^3 + \frac{s_i''(x_{i+1})}{6h_i}(x-x_i)^3 + C(x-x_i) + D(x_{i+1}-x),$$

gdzie C, D - stałe całkowania.
korzystając z warunków interpolacji :
$s_i(x_i) = y_i$ oraz $s_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$ mogę wyliczyć C i D

Po wyliczeniu C i D z warunków interpolacji mamy:
$s_i(x) = \frac{s_i^{''}(x_i)}{6h_i}(x_{i+1} - x)^3 + \frac{s_i^{''}(x_{i+1})}{6h_i}(x - x_i)^3 + (\frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{s_i^{''}(x_{i+1})h_i}{6})(x - x_i) + (\frac{y_i}{h_i} - \frac{s_i^{''}(x_i)h_i}{6})(x_{i+1} - x)$

W powyższym wzorze nie znamy $s_i^{''}(x)$. Aby je wyliczyć korzystamy z warunku ciągłości pierwszej pochodnej. Różniczkujemy więć $s_i(x)$

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

Dla przejrzystości wprowadzamy symbole: $\sigma_i = \frac{1}{6}s''(x_i)$ oraz $\Delta_i = \frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}$ (uwaga: Δ oznacza co innego niż na poprzednim wykładzie), wtedy:

$s_i^{'}(x_i) = -2\sigma_i h_i - \sigma_{i+1}h_i + \Delta_i$
$s_i'(x_i) = \ \Delta_i - h_i(\sigma_{i+1} + 2\sigma_i)$
Natomiast od drugiej strony:
$s_{i-1}'(x_i) = \ \Delta_{i-1} + h_{i-1}(2\sigma_i + \sigma_{i-1})$

Warunek ciągłości: $s'_{i-1}(x_i) = s'_i(x_i)$

$$\boxed{\Delta_{i-1} + h_{i-1}(2\sigma_i + \sigma_{i-1}) = \Delta_i - h_i(\sigma_{i+1} + 2\sigma_i)}$$

otrzymujemy układ (n-2) równań liniowych (dla punktów pośrednich):

$$h_{i-1}\sigma_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)\sigma_i + h_i\sigma_{i+1} = \Delta_i - \Delta_{i-1}, \quad i = 2, 3, ..., n-1$$

ale ponieważ mamy n niewiadomych σ_i konieczne jest określanie dwóch dodatkowych warunków.

Istnieje wiele sposobów określania dodatkowych warunków.

1. $$\left.\begin{array}{l} C_1(x) - \text{f. sześcienna przez pierwsze 4 punkty} \\ C_n(x) - \text{f. sześcienna przez ostatnie 4 punkty} \end{array}\right\} \rightarrow$$

$$\boxed{s'''(x_1) = C_1''' \quad s'''(x_n) = C_n'''}$$

Stałe C_1''' i C_n''' mogą być określone bez znajomości $C_1(x)$ i $C_n(x)$:

$$\Delta_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \text{ ; przybliża 1-szą pochodną}$$

$$\Delta_i^{(2)} = \frac{\Delta_{i+1} - \Delta_i}{x_{i+2} - x_i} \text{ ; } 2\Delta_i^{(2)} \approx f''$$

$$\Delta_i^{(3)} = \frac{\Delta_{i+1}^{(2)} - \Delta_i^{(2)}}{x_{i+3} - x_i} \text{ ; } 6\Delta_i^{(3)} \approx f'''$$

i ogólnie dla ilorazów róznicowych:

$$\Delta_0^{(0)} = f[x_0] \equiv f(x_0)$$

$$\Delta_0^{(1)} = f[x_0,\ x_1] \equiv \frac{f[x_1]-f[x_0]}{x_1-x_0} = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

$$\Delta_0^{(3)} = f[x_0,\ x_1,\ x_2] \equiv \frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}$$

$$\dots\dots$$

$$\Delta_0^{(n)} = f[x_0,\ x_1,\ \dots,\ x_k] \equiv \frac{f[x_1,\dots,x_k]-f[x_0,\dots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$$

mamy związek między ilorazami różnicowymi a pochodnymi:

$$f[x_0,\dots,x_n] = \frac{f^{(n)}(\eta)}{n!}, \quad \eta \in [x_0,\dots,x_n] \quad (\eta\text{- pewien punkt})$$

Przypomnienie

To wynika z uogólnionego twierdzenie o wartości średniej (poprzedni wykład)

Różniczkując wzór na $s''(x)$ w przedziale $[x_i, x_{i+1}]$ (**)
otrzymujemy: $s_i'''(x) = \frac{-s_i''(x_i)}{h_i} + \frac{s_i''(x_{i+1})}{h_i} = \frac{-6\sigma_i}{h_i} + \frac{6\sigma_{i+1}}{h_i}$
Wtedy:

$$s'''(x_1) = c_1'''(x_1) \Rightarrow \frac{6}{h_1}(\sigma_2 - \sigma_1) = 6\Delta_1^{(3)} \qquad | \cdot h_1^2$$

$$s'''(x_n) = c_n'''(x_1) \Rightarrow \frac{6}{h_{n-1}}(\sigma_n - \sigma_{n-1}) = 6\Delta_{n-3}^{(3)} \qquad | \cdot h_{n-1}^2$$

po przekształceniu: (cel = symetria)

$$\begin{cases} -h_1\sigma_1 + h_1\sigma_2 = h_1^2\Delta_1^{(3)} \\ h_{n-1}\sigma_{n-1} - h_{n-1}\sigma_n = -h_{n-1}^2\Delta_{n-3}^{(3)} \end{cases}$$

mamy:

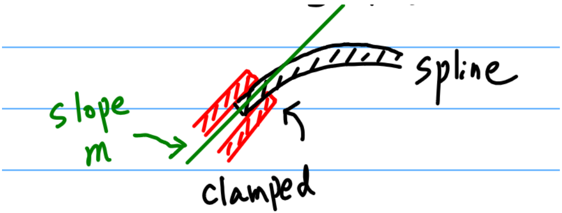
$$\begin{bmatrix} -h_1 & h_1 & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & h_{n-1} & -h_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \vdots \\ \sigma_{n-1} \\ \sigma_n \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} h_1^2 \Delta_1^{(3)} \\ \Delta_2 - \Delta_1 \\ \Delta_3 - \Delta_2 \\ \vdots \\ \Delta_{n-1} - \Delta_{n-2} \\ -h_{n-1}^2 \Delta_{n-3}^{(3)} \end{bmatrix}$$

Inne ważne możliwości określania warunków

- natural cubic spline: $s''(x_1) = s''(x_n) = 0$ (free boundary)
- clamped boundary: $s'(x_1) = f_1', \quad s'(x_n) = f_n'$ (pierwsze pochodne na krańcach znane bądź przybliżone ilorazami różnicowymi)
- $s''(x_1) = y_1''; \quad s^n(x_n) = y_n''$ (drugie pochodne na krańcach znane bądź przybliżone ilorazami różnicowymi, szczególny przypadek to natural cubic splines)
- not-a-knot condition $s_1'''(x_2) = s_2'''(x_2)$ oraz $s_{n-1}'''(x_{n-1}) = s_n'''(x_{n-1})$ czyli $s'''(x)$ ciągła w x_2 oraz x_{n-1}
- interpolowanie spline'ami funkcji periodycznych $s(x_1) = s(x_n)$, $s'(x_1) = s'(x_n)$ oraz $s''(x_1) = s''(x_n)$

Clamped boundary condition



źródło: `http://runge.math.smu.edu/HiPerfSciComp/_downloads/CubicSpline.pdf`

Dla obliczeń - zwłaszcza wielokrotnego określania wartości s(x) korzystna jest postać:

$$s(x) = y_i + b_i \cdot (x - x_i) + c_i \cdot (x - x_i)^2 + d_i \cdot (x - x_i)^3 \;\; dla\ x \in [x_i,\ x_{i+1}]$$

b_i, c_i, d_i - określone dla każdego przedziału:

$b_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - h_i \cdot (\sigma_{i+1} + 2\sigma_i)$

$c_i = 3 \cdot \sigma_i$

$d_i = \frac{\sigma_{i+1} - \sigma_i}{h_i}$

Błąd interpolacji funkcji sklejanych

Przykładowo dla *clamped boundary condition* udowodniono :

- $a = x_1, x_2, ..., x_n = b$
- $f \in C^4[a,\ b], \qquad \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)| \leqslant M$
- $s'(x_1) = f'(x_1), \quad s'(x_n) = f'(x_n)$

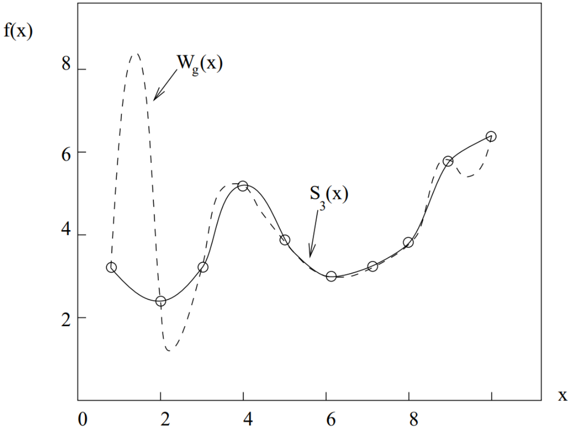
to:

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - s(x)| \leqslant \frac{5}{384} \cdot M \cdot \max_{1\leqslant i\leqslant n-1} (x_{i+1} - x_i)^4$$

Wniosek: jeśli dodamy 10 razy więcej punktów intepolacji, długość przedziału $x_{i+1} - x_i$ zmniejszy się 10-krotnie, a ograniczenie górne błedu zmniejszy się 10^4 razy !
Dowód A. Hall, W. Weston Meyer "Optimal error bounds for cubic spline interpolation", `https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002190457690040X`)

Zalety

- dokładniejsza, bezpieczniejsza interpolacja - patrz rysunek!



Zalety c.d.

- wartości $s_3(x)$ łatwe do wyznaczania
- w praktyce - s_3 wystarczające
- przydatne dla węzłów równoodległych
- można używać dla określenia $\Rightarrow \frac{d^{(n)}}{dx^n} f(x)$ i $\int f(x)dx$

Funkcje B-sklejane

- stosowane w grafice komputerowej do modelowania figur o skomplikowanych kształtach
- bazują na fakcie, że funkcje sklejane można wyrazić za pomocą kombinacji liniowej funkcji bazowych
- takie funkcje bazowe nazywamy funkcjami B-sklejanymi (B-splines)
- dla danego zestawu węzłów interpolacji - funkcje bazowe łatwo wyliczyć rekurencyjnie
- algorytmy o dobrych własnościach numerycznych

Funkcje B-sklejane

$B_{j,k}(x)$ - B-spline rzędu k:

- $B_{j,0} = \begin{cases} 1 & , \ x_j \leqslant x \leqslant x_{j+1} \\ 0 & , \ \text{poza przedziałem} \end{cases}$
- wyższe rzędy $(k > 0)$ - rekurencyjnie:

$$B_{j,k}(x) = \frac{x - x_j}{x_{j+k} - x_j} B_{j,k-1}(x) + \frac{x_{j+k+1} - x}{x_{j+k+1} - x_{j+1}} B_{j+1,k-1}(x)$$

- np. $B_{j,1} = \Psi_j$ (patrz interpolacja liniową funkcją sklejaną)

Reprezentacja funkcji sklejanej stopnia k

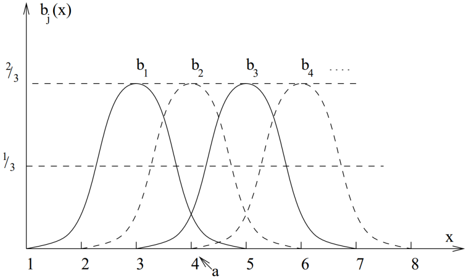
$$S(x) = \sum_j p_j B_{j,k}(x)$$

gdzie p_j - współczynniki (w grafice komputerowej są to tzw. zadane punkty kontrolne)

Funkcje B-sklejane - własności

- $B_{j,k}(x) > 0, x \in [x_j \; x_{j+k+1}]$
- $B_{j,k}(x) = 0, x \notin [x_j \; x_{j+k+1}]$
- w przedziale $[x_j, \; x_{j+1}]$ istotne jest tylko $k+1$ funkcji : $B_{j-k,k}(x) \ldots B_{j,k}(x) \neq 0$
- normalizacja: $\sum_j B_{j,k}(x) = \sum_{j=l-k}^{l} B_{j,k}(x) = 1$ dla $x_l \leqslant x \leqslant x_{l+1}$

Funkcje B-sklejane stopnia 3



$$\underbrace{B_{j,3}(x)}_{b_j(x)} = \begin{cases} \frac{1}{6}z^3 & , z = \frac{x-x_j}{d} \quad x \in [x_j, x_{j+1}] \\ \frac{1}{6}[1+3(1+z(1-z))z] & , z = \frac{x-x_{j+1}}{d} \quad x \in [x_{j+1}, x_{j+2}] \\ \frac{1}{6}[1+3(1+z(1-z))(1-z)] & , z = \frac{x-x_{j+2}}{d} \quad x \in [x_{j+2}, x_{j+3}] \\ \frac{1}{6}(1-z)^3 & , z = \frac{x-x_{j+3}}{d} \quad x \in [x_{j+3}, x_{j+4}] \\ 0 & , x \notin [x_j, x_{j+4}] \end{cases}$$