MOwNiT Funkcje Sklejane

Dane sprzętowe:

Do obliczeń użyłem języka Python 3.10.4 , system operacyjny wykorzystywany przeze mnie to Ubuntu 20.04.

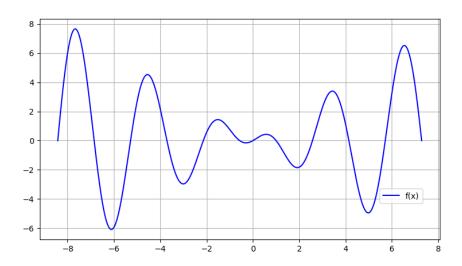
Procesor to 16 wątkowy AMD® Ryzen 7 4800h 8 x 2.9Ghz, Pamieć RAM 16GB DDR4

Obliczenia są wykonywane przez załączony do opracowania program wykorzystujący bibliotekę numpy do operacji na wektorach i macierzach. Wykresy rysowane były z pomocą biblioteki matplotlib.

Zadana funkcja:

$$f(x) = -k \cdot x \cdot \sin(m(x-1))$$

k=1, m=2, [-3pi+1, 2pi+1]



Doświadczenie:

Doświadczenie polegało na uruchomieniu programy obliczającego interpolowany wielomian dla liczby węzłów $\in \{4, 5, 8, 10, 12, 14, 18, 20, 25, 30, 40, 50\}$.

Doświadczenie było wykonywane jedynie dla węzłów równoodległych.

Błędy były liczone zgodnie z wzorem na SSE (Sum Squared Error).

Wykresy były rysowane przez obliczenie wartości interpolowanej funkcji dla 1000 równoodległych punktów na podanym w punkcie wyżej przedziale.

Na każdym z wykresów widnieja wszystkie testowane przeze mnie funkcje:

- funkcja sklejana 2 stopnia z warunkiem naturalnym
- funkcja sklejana 2 stopnia z warunkiem Clamped Boundary
- funkcja sklejana 3 stopnia z warunkiem naturalnym
- funkcja sklejana 3 stopnia z warunkiem Cubic Function

Wyprowadzenie wzoru na spline 2 stopnia

Równanie ogólne funkcji sklejanej 2 stopnia:

$$S_i(x) = a_i(x-x_i)^2 + b_i(x-x_i) + c_i, i \in [1, 2, ..., n-1]$$

 $i \in [1, 2, ..., n-1]$

Warunki konieczne:

$$S_{i}(x_{i}) = y_{i} \qquad i \in [1, 2, ..., n-1]$$

$$S_{i+1}(x_{i+1}) = S_{i}(x_{i+1}) \qquad i \in [1, 2, ..., n-2]$$

$$\frac{d}{dx}S_{i+1}(x_{i+1}) = \frac{d}{dx}S_{i}(x_{i+1}) \qquad i \in [1, 2, ..., n-2]$$

Z 1 warunku otrzymujemy

$$S_{i}(x_{i}) = a_{i}(x_{i} - x_{i})^{2} + b_{i}(x_{i} - x_{i}) + c_{i} = c_{i}, y_{i} = c_{i}$$

$$\frac{d}{dx}S_{i}(x) = 2a_{i}(x - x_{i}) + b_{i}$$

Dodatkowo wykorzystując warunek 3:

$$\frac{d}{dx}S_{i+1}(x_{i+1}) = \frac{d}{dx}S_{i}(x_{i+1})$$

$$2a_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1}) + b_{i+1} = 2a_{i}(x_{i+1} - x_{i}) + b_{i}$$

$$2a_{i}(x_{i+1} - x_{i}) = b_{i+1} - b_{i}$$

$$a_{i} = \frac{b_{i+1} - b_{i}}{2(x_{i+1} - x_{i})}$$

Wykorzystując 1 oraz 2 warunek możemy zapisać:

$$S_{i+1}(x_{i+1}) = S_i(x_{i+1})$$

$$a_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1})^2 + b_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1}) + c_{i+1} = a_i(x_{i+1} - x_i)^2 + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i$$

$$y_{i+1} = a_i(x_{i+1} - x_i)^2 + b_i(x_{i+1} - x_i) + y_i$$

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

$$y_{i+1} = (x_{i+1} - x_i) \left(\frac{b_{i+1} - b_i}{2} + b_i\right) + y_i$$

$$b_i + b_{i+1} = 2\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Przenumerowując indeks dostajemy:

$$b_{i-1} + b_i = 2 \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

$$b_{i-1} + b_i = 2\gamma_i, \gamma_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

Zauważając, że jedynymi niewiadomymi są wartości b_i ponieważ znamy wartości c_i , natomiast wartości a_i możemy obliczyć na podstawie b_i .

Otrzymujemy więc następujący układ równań:

$$b_1 + b_2 = 2\gamma_2$$

$$b_2 + b_3 = 2\gamma_3$$
...
$$b_{n-2} + b_{n-1} = 2\gamma_{n-1}$$

$$b_{n-1} + b_n = 2\gamma_n$$

Układ ten ma n niewiadomych ale tylko n-1 równań. Musimy więc skorzystać z warunku brzegowego.

Warunki brzegowe

Natural Spline

$$\frac{d}{dx}S_1(x_1)=0$$

Ponieważ brakuje nam jednego równania, wystarczy że uwzględnimy powyższy warunek.

$$2a_1(x_1-x_1)+b_1=0$$

 $b_1=0$

Po uwzględnieniu powyższego warunku brzegowego otrzymujemy ukłąd równań:

$$b_{1}=0$$

$$b_{1}+b_{2}=2\gamma_{2}$$

$$b_{2}+b_{3}=2\gamma_{3}$$
...
$$b_{n-2}+b_{n-1}=2\gamma_{n-1}$$

$$b_{n-1}+b_{n}=2\gamma_{n}$$

Możemy zauważyć, że teraz bardzo łatwo rozwiązać układ równań w sposób iteracyjny. W ogólności dostajemy następujące rozwiązanie:

$$b_i = 2\sum_{i=2}^{i} (-1)^{j+i} \gamma_j$$
 $i \in \{2,3,4,...,n\}$

Pozostałe współczynniki łatwo obliczyć na podstawie uprzednio podanych wzorów.

Clamped Boundary

W tym warunku brzegowym przyjmujemy, że pierwsza pochodna na krańcach jest znana lub przybliżona przy pomocy ilorazów różnicowych.

$$\frac{d}{dx}S_1(x_1) = f_1$$

Wyżej wspomniane ilorazy różnicowe (jeśli pochodna nie jest znana) wyrażają się wzorem:

$$S_1(x_1) = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$$

Możemy zatem zapisać:

$$2a_1(x_1-x_1)+b_1=\frac{y_2-y_1}{x_2-x_1}\Leftrightarrow b_1=\frac{y_2-y_1}{x_2-x_1}=\gamma_2$$

Uwzględniając powyższy warunek brzegowy otrzymujemy układ równań, który znów łatwo obliczyć iteracyjnie:

$$b_{1}=y_{2}$$

$$b_{1}+b_{2}=2y_{2}$$

$$b_{2}+b_{3}=2y_{3}$$
...
$$b_{n-2}+b_{n-1}=2y_{n-1}$$

$$b_{n-1}+b_{n}=2y_{n}$$

W ogólności otrzymujemy następujący wynik:

$$b_1 = b_2 = y_2$$

$$b_i = 2(\sum_{j=3}^{i} (-1)^{j+i} \gamma_j) + (-1)^i \gamma_2, i \in \{3, 4, ..., n\}$$

Pozostałe współczynniki obliczamy z wyznaczonych wcześniej wzorów.

Wyprowadzenie wzorów na spline 3 stopnia

Równanie ogólne funkcji sklejanej 3 stopnia:

$$S_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i, i \in [1, 2, ..., n-1]$$
 $i \in [1, 2, ..., n-1]$

Warunki konieczne dla funkcji sklejanej 3 stopnia

$$S_{i}(x_{i+1}) = f(x_{i+1})$$

$$S_{i}(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1})$$

$$S'_{i}(x_{i+1}) = S'_{i+1}(x_{i+1})$$

$$S''_{i}(x_{i+1}) = S''_{i+1}(x_{i+1})$$

Ponieważ funkcja sklejana jest 3 stopnia, zatem jej druga pochodna jest liniowa. Wprowadźmy oznaczenia:

$$h_i = X_{i+1} - X_i$$

Drugą pochodną możemy zatem zapisać:

$$S_{i}^{"}(x) = S_{i}^{"}(x_{i}) \frac{x_{i+1} - x}{h_{i}} = S_{i}^{"}(x_{i+1}) \frac{x - x_{i}}{h_{i}}$$

Całkując obustronnie otrzymujemy

$$S_{i}(x) = \frac{S_{i}''(x_{i})}{6h_{i}}(x_{i+1}-x)^{3} + \frac{S_{i}''(x_{i+1})}{6h_{i}}(x-x_{i})^{3} + C(x-x_{i}) + D(x_{i+1}-x)$$

Korzystając z warunków interpolacji, możemy wyznaczyć stałe całkowania. Otrzymujemy wtedy wzór:

$$S_{i}(x) = \frac{S_{i}'(x_{i})}{6h_{i}}(x_{i+1}-x)^{3} + \frac{S_{i}''(x_{i+1})}{6h_{i}}(x-x_{i})^{3} + \left(\frac{y_{i+1}}{h_{i}} - \frac{S_{i}''(x_{i+1})h_{i}}{6}\right)(x-x_{i}) + \left(\frac{y_{i}}{h_{i}} - \frac{S_{i}''(x_{i})h_{i}}{6}\right)(x_{i+1}-x)$$

Niewiadomą w równaniu jest jedynie druga pochodna funkcji sklejanej. W celu jej wyznaczenia różniczkujemy S(x)

$$S_{i}'(x) = \frac{-h_{i}}{3}S_{i}''(x_{i}) - \frac{h_{i}}{6}S_{i}''(x_{i+1}) - \frac{y_{i}}{h_{i}} + \frac{y_{i+1}}{h_{i}}$$

Wprowadźmy oznaczenia:

$$\sigma_i = \frac{1}{6} S_i''(x_i) \qquad \Delta_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i}$$

Możemy zatem zapisać:

$$S_i(x) = \Delta_i - h_i(\sigma_{i+1} + 2\sigma_i)$$

 $S_{i-1}(x) = \Delta_{i-1} + (2\sigma_i + \sigma_{i-1})$

Oraz z warunku ciągłości $S'_{i-1}(x) = S'_{i-1}(x)$ otrzymujemy:

$$\Delta_{i} - h_{i} (\sigma_{i+1} + 2\sigma_{i}) = \Delta_{i-1} + h_{i-1} (2\sigma_{i} + \sigma_{i-1})$$

$$h_{i-1}\sigma_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_{i})\sigma_{i} + h_{i}\sigma_{i+1} = \Delta_{i} - \Delta_{i-1}, i \in \{2, 3, ..., n-1\}$$

Zauważmy, że mamy n niewiadomych, natomiast tylko n-2 równań. Musimy więc określić dwa dodatkowe warunki brzegowe.

Warunki brzegowe

Cubic Function

Przyjmijmy, że:

 $C_1(x)$ - funkcja 3 stopnia przechodząca przez 4 pierwsze węzły

 $C_n(x)$ - funkcja 3 stopnia przechodząca przez 4 ostatnie węzły

Możemy zatem zapisać:

$$S^{"}(x_1) = C_1^{"} \qquad \qquad S^{"}(x_n) = C_n^{"}$$

Korzystając z metody ilorazów różnicowych, możemy wyznaczyć przybliżoną wartość 3 pochodnych w.w. funkcji.

$$\Delta_i^{(1)} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \qquad \qquad \Delta_i^{(2)} = \frac{\Delta_{i+1}^{(1)} - \Delta_i^{(1)}}{x_{i+2} - x_i} \qquad \qquad \Delta_i^{(3)} = \frac{\Delta_{i+1}^{(2)} - \Delta_i^{(2)}}{x_{i+3} - x_i}$$

Przybliżenie n pochodnej otrzymujemy mnożąc $n! \cdot \Delta_i^{(n)}$ więc:

$$S'''(x_1) = C_1''' = 3! \cdot \Delta_1^{(3)} = 6 \cdot \Delta_1^{(3)}$$

$$S'''(x_n) = C_n''' = 3! \cdot \Delta_{n-3}^{(3)} = 6 \cdot \Delta_{n-3}^{(3)}$$

Po przekształceniach otrzymujemy 2 brakujące warunki

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

Otrzymujemy układ równań, po uwzględnieniu powyższych warunków brzegowych.

$$\begin{vmatrix} -h_1 & h_1 & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & h_{n-1} & -h_{n-1} \end{vmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \dots \\ \sigma_{n-1} \\ \sigma_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} h_1^2 \Delta_1^{(3)} \\ \Delta_2 - \Delta_1 \\ \Delta_3 - \Delta_2 \\ \dots \\ \Delta_{n-1} - \Delta_{n-2} \\ -h_{n-1}^2 \Delta_{n-3}^{(3)} \end{aligned}$$

Natural Spline

Przyjmijmy, że:

$$S''(x_1) = S''(x_n) = 0$$

Korzystając z poprzednio zdefiniowanych oznaczeń otrzymujemy:

$$\sigma_{i} = \frac{1}{6} S_{i}^{"}(x_{i})$$

$$S^{"}(x_{1}) = S_{1}^{"}(x_{1}) = 0 \Longrightarrow \sigma_{1} = 0$$

$$S^{"}(x_{n}) = S_{n}^{"}(x_{n}) = 0 \Longrightarrow \sigma_{n} = 0$$

Znamy więc już 2 wartości niewiadomych w układzie, więc możemy go rozwiązać dla znanych σ :

$$\begin{bmatrix} h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \dots \\ \sigma_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta_2 - \Delta_1 \\ \Delta_3 - \Delta_2 \\ \dots \\ \Delta_{n-1} - \Delta_{n-2} \end{bmatrix}$$

Oraz uwzględnić:

$$\sigma_1 = \sigma_n = 0$$

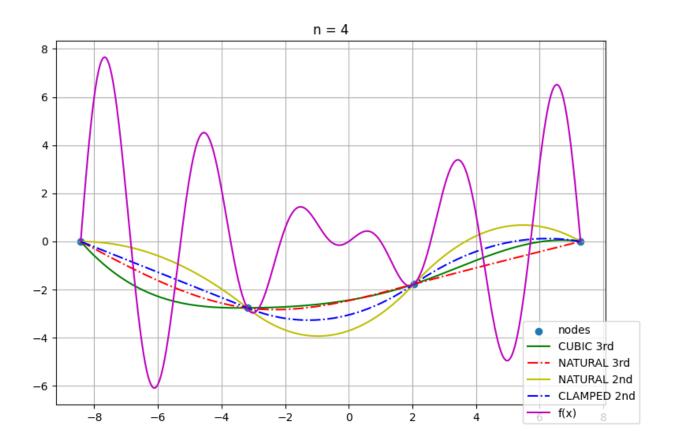
Wyniki doświadczenia

Tabela 1. Błędy otrzymane dla wykonanych obliczeń (kolumny oznaczają dla jakiego typu funkcji sklejanej jest to błąd).

Liczba węzłów	spline 2 stopnia Warunek naturalny	Spline 2 stopnia Z clamped boundary	Spline 3 stopnia Z warunkiem Naturalnym	Spline 3 stopnia Cubic
4	14713.0989367049	14164.6694028447	13955.4678622423	14309.1098757576
5	29727.6302273456	25353.9635116979	17237.4997839205	18179.1976325432
8	35397.8105008861	29491.1752865589	18597.8197101335	21566.604409219
10	22042.8100570401	20645.5919598968	12962.9621904407	14917.8418914855
12	55806.0099718729	50641.6704927019	5877.2747047429	5013.20037486729
14	61966.3787210651	49382.5888029238	823.444354474927	330.251732400301
18	16493.3167232858	7583.50324236701	47.3989373542036	79.8517111283668
20	11126.8447064143	3840.23770650301	15.5694357382797	53.2173072732875
25	5573.87035484668	986.907812471112	1.83492531179025	14.3600529438245
30	3421.16338366898	336.012708491153	0.398109085588733	3.96830142708824
40	1715.95696325603	64.7675380667858	0.050164301475433	0.469279597684517
50	1042.15871982906	18.6197757434749	0.012390936427545	0.089929720584604
60	703.095544506816	6.84934832253572	0.004308184411002	0.023745984782554
70	507.394436309508	2.9790683616653	0.00183433979315	0.007792885178559
80	383.845617080766	1.4626025536163	0.000893194449903	0.002988263977581
100	242.058913753249	0.454785958107854	0.000275832883707	0.00060810441974

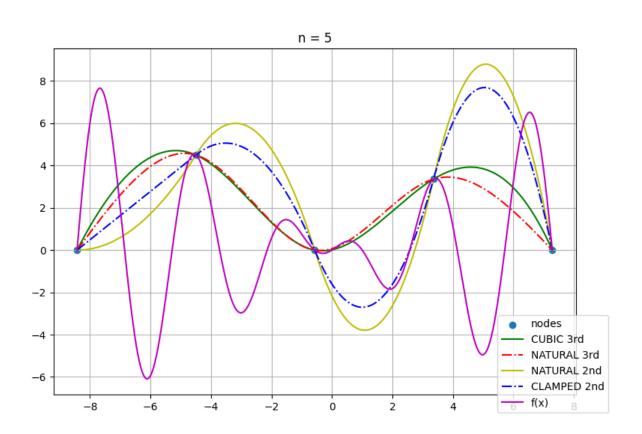
Analizując tabelę możemy zauważyć, iż spline 3 stopnia znacznie lepiej przybliża funkcję (tj. ma istotnie mniejszy błąd SSE). Dla spline 2 stopnia możemy zauważyć dużą przewagę zastosowania warunku brzegowego naturalnego nad clamped boundary , potwierdzają to znacznie niższe wartości SSE dla ww. warunku brzegowego dla dużych **n.**

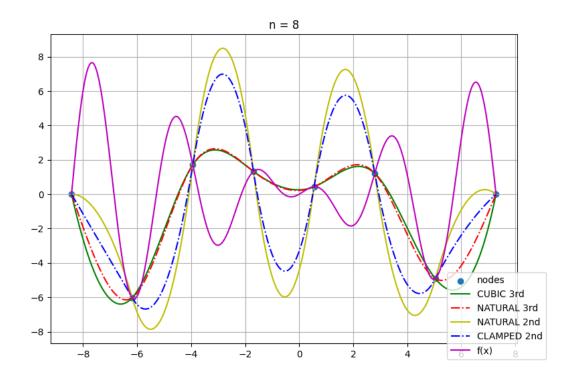
Dal spline 3 stopnia, możemy zauważyć że niezależnie od wybranego warunku brzegowego otrzymujemy dokładniejszą interpolacje (mniejszy SSE) niż dla spline 2 stopnia. W tym przypadku również warunki brzegowe mają istotny wpływ na wyniki. Warunek naturalny w porównaniu z Cubic function wypada znacznie lepiej. Bowiem suma błędu kwadratowego spada znacznie szybciej niż w cubic function.



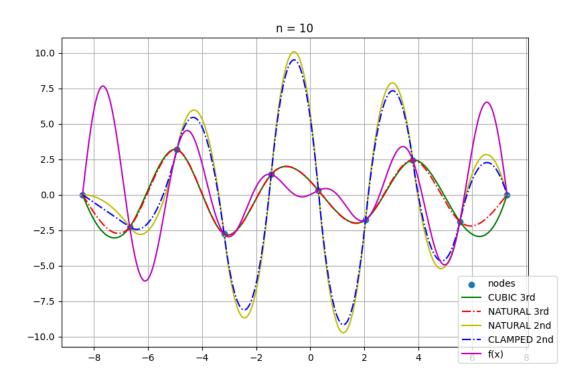
Wykres 2. Interpolacja dla 5 węzłów

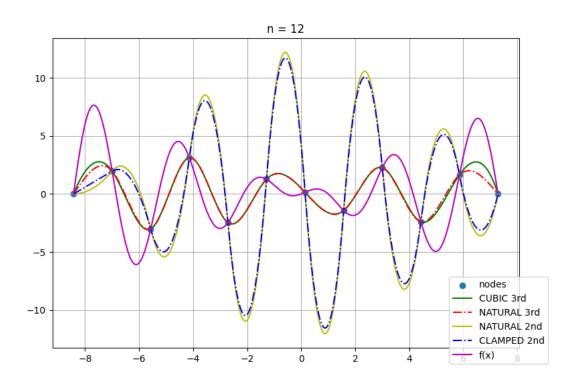
Wykres 3. Interpolacja dla 8 węzłów



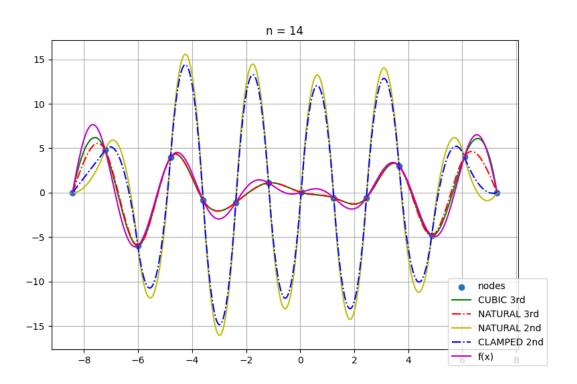


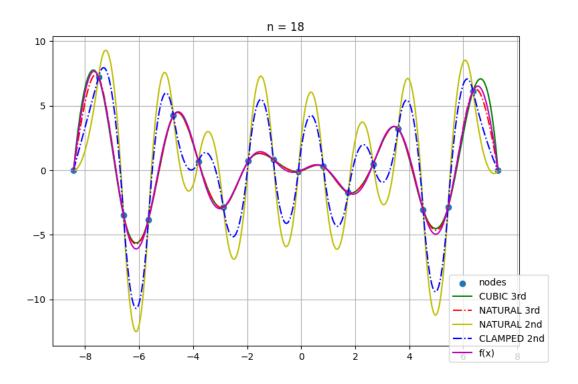
Wykres 4. Interpolacja dla 10 węzłów



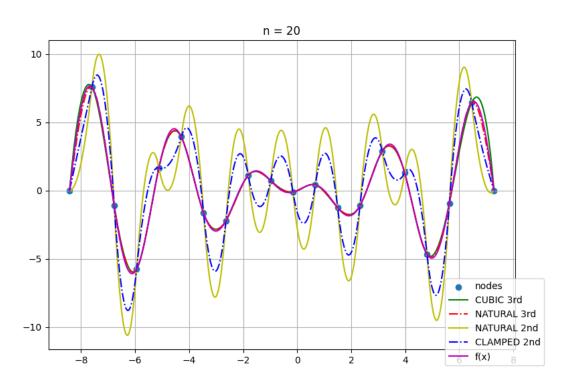


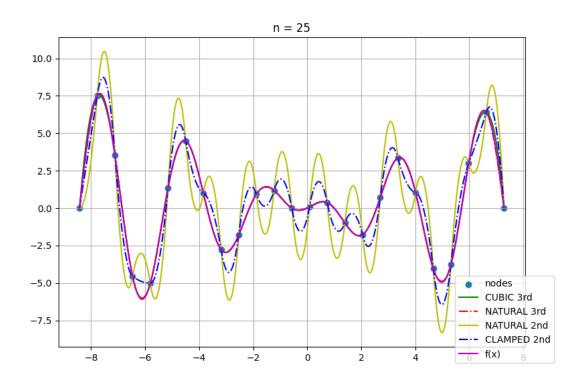
Wykres 6. Interpolacja dla 14 węzłów



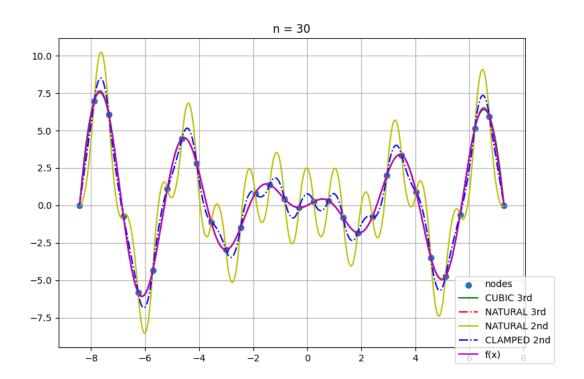


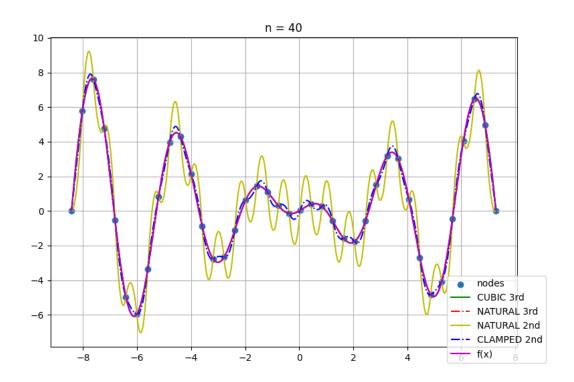
Wykres 8. Interpolacja dla 20 węzłów



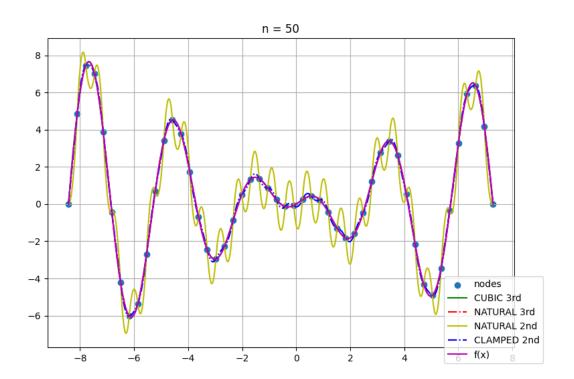


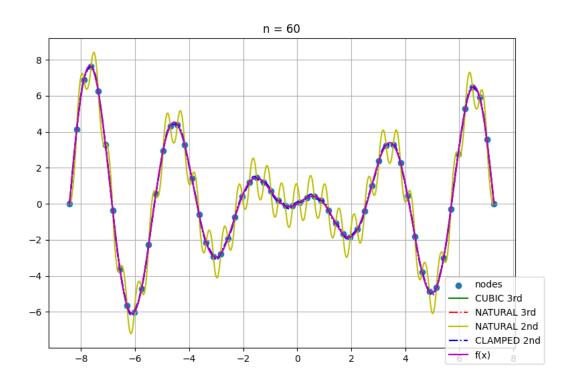
Wykres 10. Interpolacja dla 30 węzłów



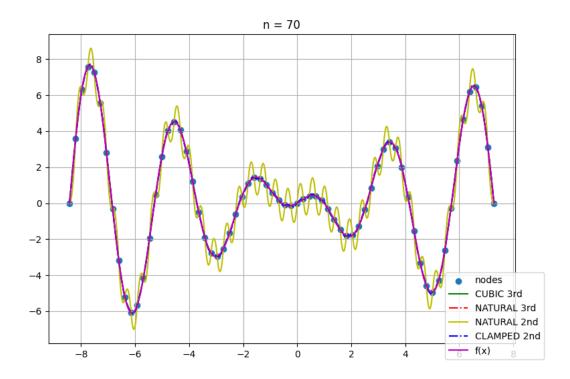


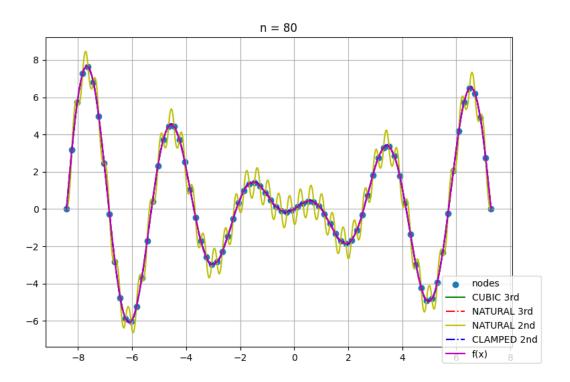
Wykres 12. Interpolacja dla 50 węzłów



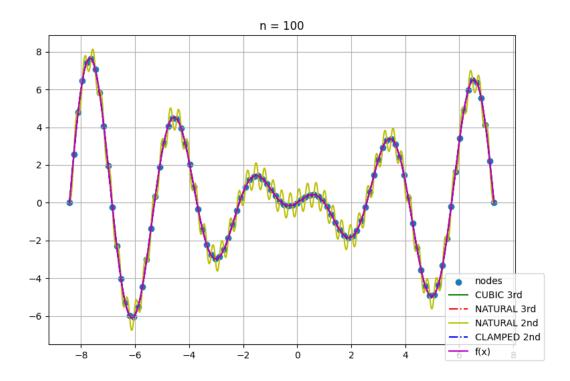


Wykres 14. Interpolacja dla 70 węzłów





Wykres 16. Interpolacja dla 100 węzłów



Wnioski:

- Poprzez analizę powyższych danych możemy zauważyć różnice między dokładnością przybliżeniu interpolowanej funkcji przez interpolacyjną funkcję sklejaną stopnia 2 oraz 3. Interpolacyjna funkcja sklejana 3 stopnia za każdym razem dawała zauważalnie lepsze wyniki od funkcji stopnia 2. Różnice stają się tym bardziej zauważalne im większa jest zadana liczba węzłów. Interpolacyjna funkcja sklejana 3 rzędu ZNACZNIE szybciej zaczyna praktycznie pokrywać się z zadaną funkcją.
- Powyżej określonej liczby węzłów (ok 40) dla spline 3 stopnia, możemy zauważyć iż zwiększenie liczby węzłów przestaje się istotnie przekładać na zwiększenie dokładności funkcji sklejanej.
- Zauważalne są również konsekwencje wyboru warunków brzegowych, oraz ich wpływ na dokładność funkcji sklejanej
- Dla liczby węzłów ok. 18, dla funkcje sklejanej 3 stopnia zaczyna być widoczna różnica między dokładnością przybliżenia funkcji sklejanej dla warunku brzegowego Naturalnego oraz Cubic Function.
- Dla liczby węzłów od ok 18-20 bardziej widoczna również staje się przewaga w dokładności interpolacji funkcji dla spline 2 stopnia przy uzyciu warunku brzegowego Clamped Boundary nad warunkiem brzegowym Naturalnym.
- Błąd dla warunku brzegowego Natural Spline (stopień 2) zdaje się przypominać zachowanie funkcji które widzieliśmy przy efekcie Runge'go.