Metody obliczeniowe w nauce i technice

Funkcje sklejane

Aga Patro
pt_15:00

1. Specyfikacja sprzętu i narzędzia wykorzystane w realizacji

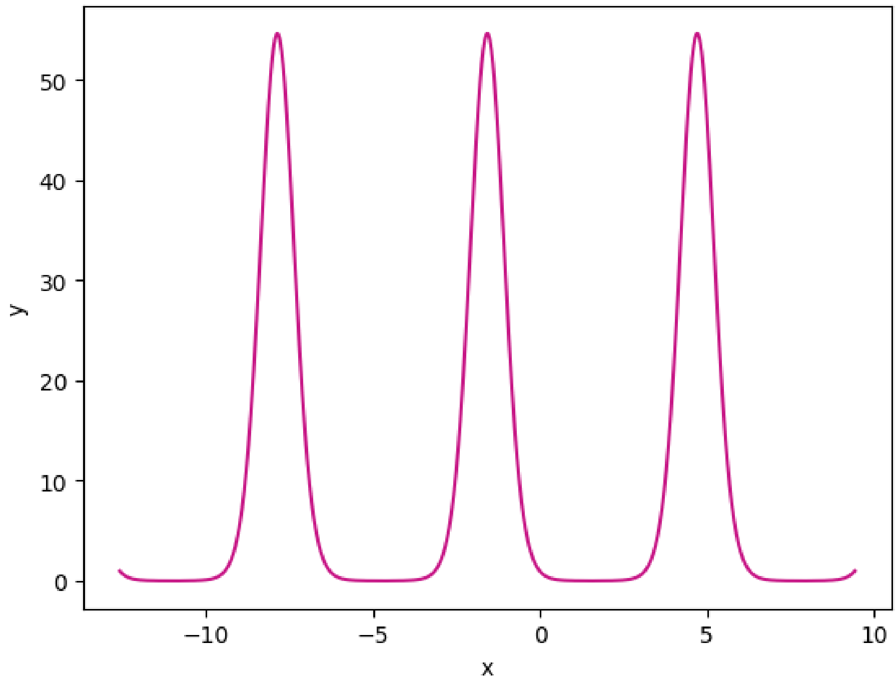
System: Debian Linux Parrot OS x64
Procesor: AMD Ryzen 5 4500U, 6 rdzeni, 6 wątków, 4.00GHz
Pamięć RAM: 16 GB
Środowisko: Jupyter Notebook
Język: Python 3

2. Temat ćwiczenia

Celem ćwiczenia było, by dla zadanej funkcji $e^{-4sin(x)}$ na przedziale od -4π do 3π wyznaczyć interpolacyjną funkcję sklejaną trzeciego stopnia oraz drugiego stopnia. Dla obu rodzajów funkcji (2-go i 3-go stopnia) należało wykonać obliczenia dla co najmniej dwóch różnych warunków brzegowych. Podobnie jak poprzednio należało określić dokładność interpolacji – dla różnej liczby przedziałów i dla różnych warunków brzegowych. Porównać interpolację funkcjami sklejanymi drugiego i trzeciego stopnia. Graficznie zilustrować interesujące przypadki. Opisać dokładnie przyjęte warunki brzegowe.

3. Dane

Mamy zadaną funkcję $e^{-4sin(x)}$ na przedziale od -4π do 3π.



Wykres 3.1. Wykres funkcji e^(-4sin(x))

4. Realizacja i wyniki ćwiczenia

4.1 Funkcja sklejana 2-ego stopnia

4.1.1 Obliczenia

Do interpolacji funkcją sklejaną 2-ego stopnia został użyty wzór:

$$(1)\ S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2,\ i \in [0, \ldots, n - 1]$$

gdzie każdy segment $S_i(x)$ jest interpolującym wielomianem drugiego rzędu w przedziale $[x_i, x_{i+1}]$.

Funkcja jest funkcją sklejaną 2-ego stopnia, gdy spełnia następujące warunki:

1) $S_i(x) = y_i,\ i \in [0, \ldots, n - 1]$
2) $S_{i+1}(x_{i+1}) = S_i(x_{i+1}),\ i \in [0, \ldots, n - 2]$
3) $S'_{i+1}(x_{i+1}) = S'_i(x_{i+1}),\ i \in [0, \ldots, n - 2]$

z 1):

$$(2)\ S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 = a_i$$

$$y_i = a_i$$

z 3):

$$(3)\ b_{i+1} + 2c_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1}) = b_i + 2c_i(x_{i+1} - x_i) \Rightarrow c_i = \frac{b_{i+1} - b_i}{2(x_{i+1} - x_i)}$$

z 1) i 2):

$$(4)\ y_{i+1} = y_i + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 \Rightarrow b_i + b_{i+1} = 2\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

gdy przesuniemy indeksy $i \to i - 1$ otrzymujemy:

$$(5)\ b_{i-1} + b_i = 2\gamma_i$$

$$(6)\ \gamma_i = \frac{\gamma_i - \gamma_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

Teraz jedyne niewiadome w równaniu to wartości współczynników b_i. Aby rozwiązać równanie zapisujemy je w postaci macierzowej (7):

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & & & 0 \\ & 1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\gamma_1 \\ 2\gamma_2 \\ \vdots \\ 2\gamma_{n-1} \end{pmatrix}$$

Możemy to zapisać jako:

$$b_1 + b_2 = 2\gamma_2$$
$$b_2 + b_3 = 2\gamma_3$$
$$\ldots$$
$$b_{n-2} + b_{n-1} = 2\gamma_{n-1}$$
$$b_{n-1} + b_n = 2\gamma_n$$

Jest to układ o n niewiadomych i $n - 1$ równaniach. Brakujące równanie wstawimy korzystając z warunku brzegowego.

Warunki brzegowe:

1) Splajn naturalny

$$(8)\ S'_1(x_1) = 0 \ \vee\ S'_{n-1}(x_n) = 0$$

Korzystając z różniczki obliczonej względem x :

$$(9)\ S'_i(x) = 2a_i(x - x_i) + b_i$$
$$(10)\ 2a_1(x_1 - x_1) + b_1 = 0$$
$$(11)\ b_i = 0$$

Podstawiając wyliczony warunek brzegowy do wcześniej wyznaczonego równania otrzymujemy:

$$b_1 = 0$$
$$b_1 + b_2 = 2\gamma_2 \rightarrow b_2 = 2\gamma_2$$
$$b_2 + b_3 = 2\gamma_3 \rightarrow b_3 = 2\gamma_3 - b_2 = 2(\gamma_2 - \gamma_3)$$
$$\dots$$
$$b_{n-1} + b_n = 2\gamma_n \rightarrow b_n = 2(\gamma_n - \gamma_{n-1} + \gamma_{n-2} + \gamma_{n-3} - \dots)$$

Pozostałe współczynniki obliczamy z wcześniej wyznaczonych wzorów.

2) Splajn zaciskany (*ang. clamped boundary*)

Przyjmujemy, że jedna z pierwszych pochodnych na krańcach jest znana lub przybliżona przy pomocy ilorazów różnicowych:

$$(12)\ S'_1(x_1) = f'_i \ \vee \ S'_{n-1}(x_n) = f'_{n-1}$$
$$(13)\ S'_1(x_1) = \frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} = \frac{y_2-y_1}{x_2-x_1}$$
$$(14)\ 2a_1(x_1 - x_1) + b_1 = \frac{y_2-y_1}{x_2-x_1} \leftrightarrow b_1 = \frac{y_2-y_1}{x_2-x_1}$$

Otrzymujemy:

$$b_1 = \gamma_2$$
$$b_1 + b_2 = 2\gamma_2 \rightarrow b_2 = 2\gamma_2 - b_1 = \gamma_2$$
$$b_2 + b_3 = 2\gamma_3 \rightarrow b_3 = 2\gamma_3 - b_2 = 2\gamma_3 - \gamma_2$$
$$\dots$$
$$b_{n-1} + b_n = 2\gamma_n \rightarrow b_n = 2(\gamma_n - \gamma_{n-1} + \gamma_{n-2} + \gamma_{n-3} - \dots)$$

By zrealizować ćwiczenie, została zaimplementowana funkcja interpolująca 2-ego stopnia *quadratic_spline* zgodnie z powyżej wyprowadzonymi wzorami.

4.1.2 Wyniki

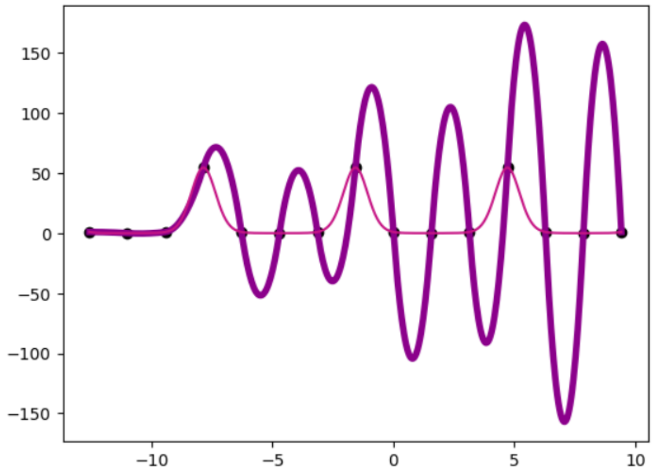
Poniżej przedstawiłam wyniki eksperymentu funkcji sklejanej drugiego stopnia. Błąd średniokwadratowy liczony jest dla 500 punktów. Na wykresach kolorem różowym przedstawiony jest wykres funkcji początkowej, natomiast kolorem fioletowym przedstawiony jest wykres wielomianu otrzymanego w wyniku eksperymentu. Można zauważyć że wykres wielomianu jest grubszy od wykresu funkcji początkowej. Jest to spowodowane tym, by dla większej ilości węzłów, gdy wykresy bardzo na siebie nachodzą, można było zauważyć otrzymany wielomian.

Liczba Węzłów	**Splajn naturalny**		**Splajn zaciskany**	
	Błąd średniokwadratowy	**Błąd maksymalny**	**Błąd średniokwadratowy**	**Błąd maksymalny**
5	942.8394	59.74138	997.3640	63.2720
7	1741.4356	102.9394	1684.7152	101.5431
10	786.5889	63.6321	780.0241	63.4051
15	4866.2093	157.5437	4886.7329	157.7891
20	589.2111	56.3949	582.5262	56.1516
30	84.8815	18.3264	82.3960	18.0931
60	0.06346	0.9112	0.02573	0.7250
100	0.0235	0.2596	0.0023	0.1157
150	0.0110	0.1538	0.00058	0.04365
250	0.0040	0.0875	9.2747e(-05)	0.0146
400	0.0016	0.0550	1.5942e(-05)	0.0056
1000	0.0002	0.022	4.6018e(-07)	0.0009

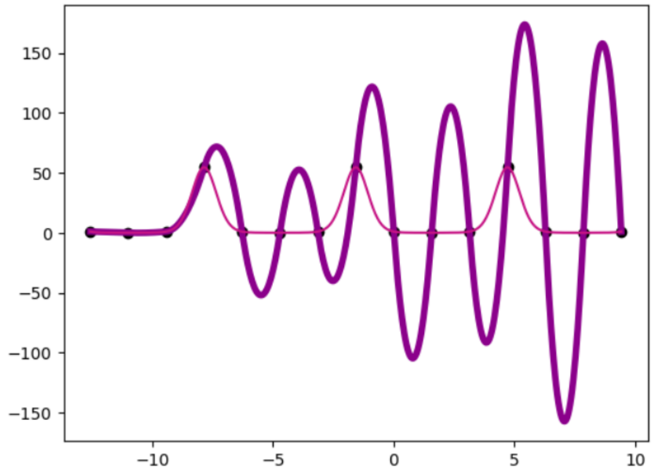
Tabela 4.1.2.1 Tabela błędów otrzymanych dla funkcji sklejanej 2-ego stopnia w zależności od liczby węzłów oraz typu warunku brzegowego

W powyższej tabeli (4.1.2.1) możemy zauważyć że im większa liczba węzłów, tym mniejszy jest błąd maksymalny. Efekt Rungego jest zauważalny dla liczby węzłów mniejszej od 60. Porównując warunki brzegowe, mniejsze błędy otrzymujemy dla warunku splajn zaciskany.

Największy efekt Rungego otrzymujemy dla liczby 15 węzłów dla obu warunków brzegowych.



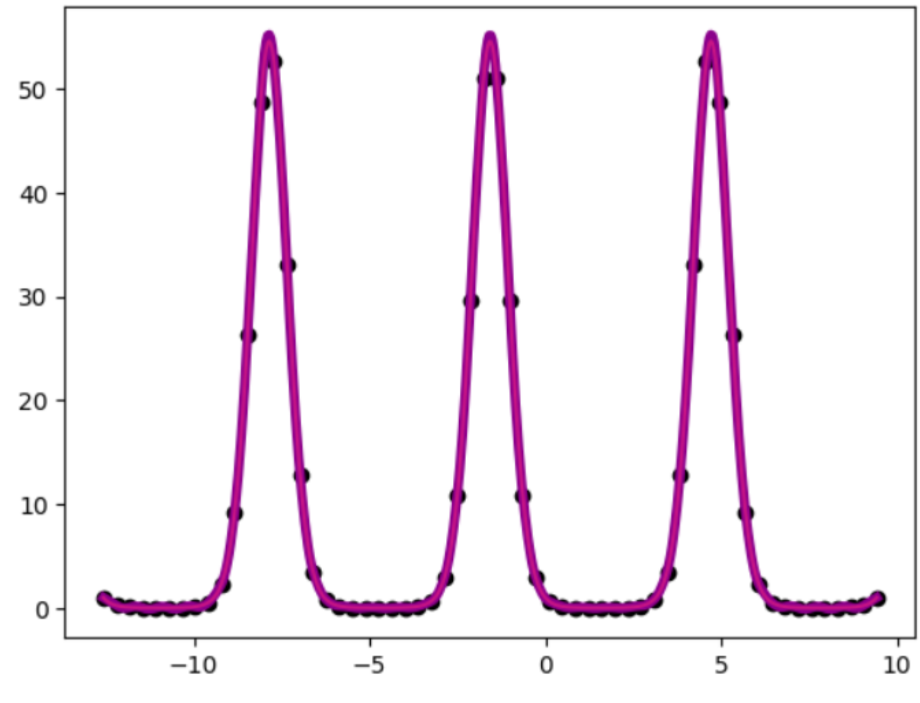
Wykres 4.1.2.1 Wykres dla 15 węzłów dla splajnu naturalnego



Wykres 4.1.2.2 Wykres dla 15 węzłów dla splajnu zaciskowego

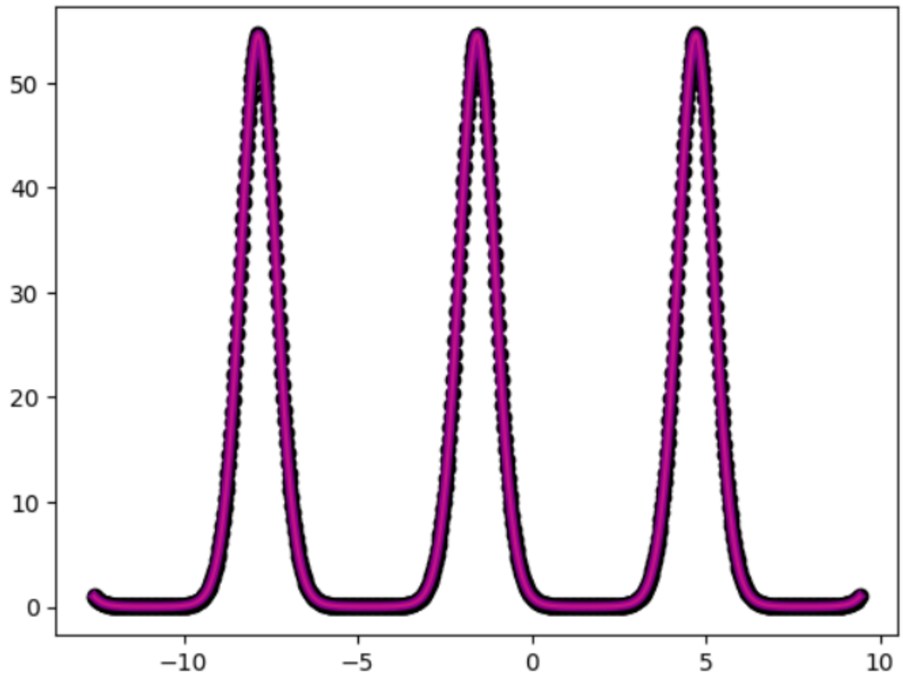
Jak widać powyżej, wykresy praktycznie się nie różnią.

Wykres otrzymanego wielomianu zaczyna pokrywać się z wykresem podanej funkcji dla liczby 60 węzłów, dla obu warunków brzegowych.



Wykres 4.1.2.3 Wykres dla liczby 60 węzłów, dla splajnu zaciskanego

Najmniejszy błąd maksymalny otrzymujemy dla liczby 1000 węzłów dla splajnu zaciskanego.



Wykres 4.1.2.4 Wykres dla liczby 1000 węzłów, dla splajnu zaciskanego

4.2 Funkcja sklejana 3-ego stopnia

4.2.1 Obliczenia

Do interpolacji funkcją sklejaną 3-ego stopnia został użyty wzór:

$$(1)\ S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3,\ i \in [0, ..., n-1]$$

gdzie każdy segment $S_i(x)$ jest interpolującym wielomianem drugiego rzędu w przedziale $[x_i, x_{i+1}]$.

Funkcja jest funkcją sklejaną 3-ego stopnia, gdy spełnia następujące warunki:

1) $S_i(x_{i+1}) = f(x_{i+1}),\ i \in [0, ..., n-1]$
2) $S_{i+1}(x_{i+1}) = S_i(x_{i+1}),\ i \in [0, ..., n-2]$
3) $S'_i(x_{i+1}) = S'_{i+1}(x_{i+1}),\ i \in [0, ..., n-2]$
4) $S''_i(x_{i+1}) = S''_{i+1}(x_{i+1}),\ i \in [0, ..., n-2]$

Funkcja $S_i(x)$ jest funkcją sześcienną, więc $S''_i(x)$ jest liniowa na przedziale $[x_i, x_{i+1}]$.
Niech $h_i = x_{i+1} - x_i$ więc funkcję $S''_i(x)$ możemy zapisać w postaci liniowej zależności:

$$(2)\ S''_i(x) = S''_i(x_i)\frac{x_{i+1} - x_i}{h_i} + S''_i(x_{i+1})\frac{x - x_i}{h_i}$$

Całkujemy dwukrotnie funkcję (2) i otrzymujemy:

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

gdzie C i D to stałe całkowania, które wyliczamy z warunków interpolacji.

Po wyliczeniu otrzymujemy:

$$(4)\ S_i(x) = \frac{S''_i(x_i)}{6h_i}(x_{i+1} - x)^3 +$$

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

Wyliczamy $S''_i(x)$ z warunku ciągłości pierwszej pochodnej, więc różniczkujemy $S_i(x)$:

$$(5)\ S_i(x_i) = -\frac{h_i}{3}S''_i(x_i) - \frac{h_i}{3}S''_i(x_{i+1}) - \frac{y_i}{h_i} + \frac{y_{i+1}}{h_i}$$

Niech

$$(6)\ \sigma_i = \frac{1}{6}S''_i(x_i)\ \wedge\ (7)\ \Delta_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i}$$

z (5) otrzymujemy:

$$(8)\ S'_i(x_i) = \Delta_i - h_i(\sigma_{i+1} + 2\sigma_i)$$

$$(9)\ S'_{i-1}(x_i) = \Delta_{i-1} + h_{i-1}(2\sigma_i + \sigma_{i-1})$$

Z warunku 3)

$$(9)\ \Delta_{i-1} + h_{i-1}(2\sigma_i + \sigma_{i-1}) = \Delta_i - h_i(\sigma_{i+1} + 2\sigma_i)$$

Po przekształceniach (9) otrzymujemy:

$$(10)\ h_{i-1}\sigma_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)\sigma_i + h_i\sigma_{i+1} = \Delta_i - \Delta_{i-1}\ , \quad i \in 2,\ 3,\ \dots,\ n-1$$

Czyli:

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

Po wyliczeniu wartości σ_i wyliczamy współczynniki:

$d_i = f(x_i)$

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

$b_i = 3\ \sigma_i$

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

Warunki brzegowe:

1) Splajn naturalny

$$(10)\ S''(x_i) = S''(x_n) = 0$$

Z (6) i (10):

$$(11)\ S''(x_1) = S_1''(x_1) = 0 \Leftrightarrow \sigma_1 = 0$$

$$(12)\ S''(x_n) = S_n''(x_n) = 0 \Leftrightarrow \sigma_n = 0$$

Otrzymujemy:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & \\ & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \sigma_{n-1} \\ \sigma_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \Delta_2 - \Delta_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \Delta_{n-1} - \Delta_{n-2} \\ 0 \end{bmatrix}$$

2) Splajn sześcienny

$C_1(x)$ - funkcja sześcienna przechodząca przez pierwsze 4 punkty

$C_n(x)$ - funkcja sześcienna przechodząca przez ostatnie 4 punkty

Więc:

$$(13)\ S'''(x_1) = C'''_1 \ \wedge\ (14)\ S'''(x_n) = C'''_n$$

Stałe C'''_1 i C'''_n mogą być określone bez znajomości $C_1(x)$ i $C_n(x)$:

$$(15)\ \Delta_i^{(1)} = \frac{y_{i+1}-y_i}{x_{i+1}-x_i} \qquad \Delta_i^{(2)} = \frac{\Delta_{i+1}^{(1)}-\Delta_i^{(1)}}{x_{i+2}-x_i} \qquad \Delta_i^{(3)} = \frac{\Delta_{i+1}^{(2)}-\Delta_i^{(2)}}{x_{i+3}-x_i}$$

Różniczkując wzór na $S''(x)$ w przedziale $[x_i,\ x_{i+1}]$ i korzystając z (13) i (14):

$$(16)\ S'''(x_1) = C'''_1(x_1) = \frac{6}{h_1}(\sigma_2 - \sigma_1) = 6\Delta_1^{(3)}$$

$$(17)\ S'''(x_n) = C'''_n(x_n) = \frac{6}{h_{n-1}}(\sigma_n - \sigma_{n-1}) = 6\Delta_{n-3}^{(3)}$$

Po przekształceniach otrzymujemy:

$$(18) - h_1\sigma_1 + h_1\sigma_2 = h_1^{\ 2}\Delta_1^{(3)}$$

$$(19)\ h_{n-1}\sigma_{n-1} + h_{n-1}\sigma_n = -\ h_{n-1}^{\ 2}\Delta_1^{(3)}$$

Ostatecznie otrzymujemy:

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

By zrealizować ćwiczenie, została zaimplementowana funkcja interpolująca 3-ego stopnia *cubic_spline* zgodnie z powyżej wyprowadzonymi wzorami.

4.2.2 Wyniki

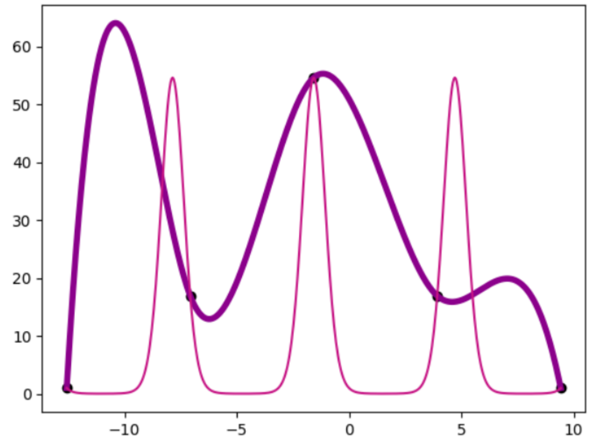
Poniżej przedstawiłam wyniki eksperymentu funkcji sklejanej trzeciego stopnia. Błąd średniokwadratowy liczony jest dla 500 punktów. Na wykresach kolorem różowym przedstawiony jest wykres funkcji początkowej, natomiast kolorem fioletowym przedstawiony jest wykres wielomianu otrzymanego w wyniku eksperymentu. Można zauważyć że wykres wielomianu jest grubszy od wykresu funkcji początkowej. Jest to spowodowane tym, by dla większej ilości węzłów, gdy wykresy bardzo na siebie nachodzą, można było zauważyć otrzymany wielomian.

Liczba Węzłów	**Splajn naturalny**		**Splajn sześcienny**	
	Błąd średniokwadratowy	**Błąd maksymalny**	**Błąd średniokwadratowy**	**Błąd maksymalny**
5	734.2822	48.7152	1035.3324	63.984
7	465.3677	53.7763	424.7301	51.3450
10	250.9903	46.3960	269.5197	46.0792
15	55.2474	16.6546	55.5333	16.5959
20	23.0571	20.5367	23.0505	20.5367
30	2.7971	6.5626	2.7987	6.5626
60	0.0030	0.2836	0.0031	0.2836
100	2.117e(-05)	0.0222	3.551e(-05)	0.0474
150	7.255e(-07)	0.0054	2.717e(-06)	0.0201
250	1.368e(-08)	0.0012	1.560e(-07)	0.0067
400	2.547e(-10)	0.0001	4.936e(-09)	0.0010
1000	1.110e(-13)	1.731e(-06)	1.114e(-13)	1.731e(-06)

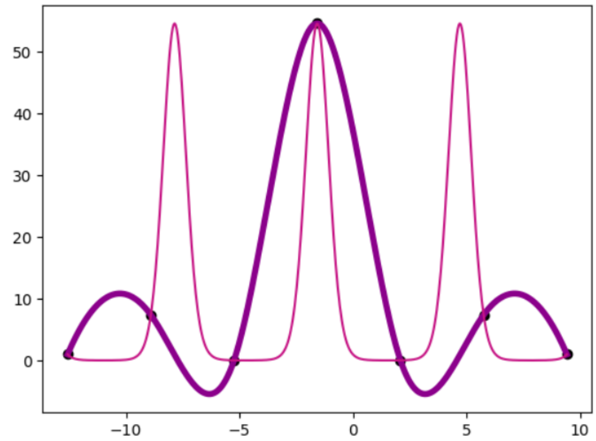
Tabela 4.2.2.1 Tabela błędów otrzymanych dla funkcji sklejanej 3-ego stopnia w zależności od liczby węzłów oraz typu warunku brzegowego

W powyższej tabeli (4.2.2.1) możemy zauważyć że im większa liczba węzłów, tym mniejszy jest błąd maksymalny. Efekt Rungego jest praktycznie niezauważalny. Porównując warunki brzegowe, mniejsze błędy otrzymujemy dla warunku splajn naturalny dla liczby węzłów większej od 100.

Największy błąd maksymalny uzyskujemy dla liczby 5 węzłów dla splajnu sześciennego oraz dla liczby 7 węzłów splajnu naturalnego

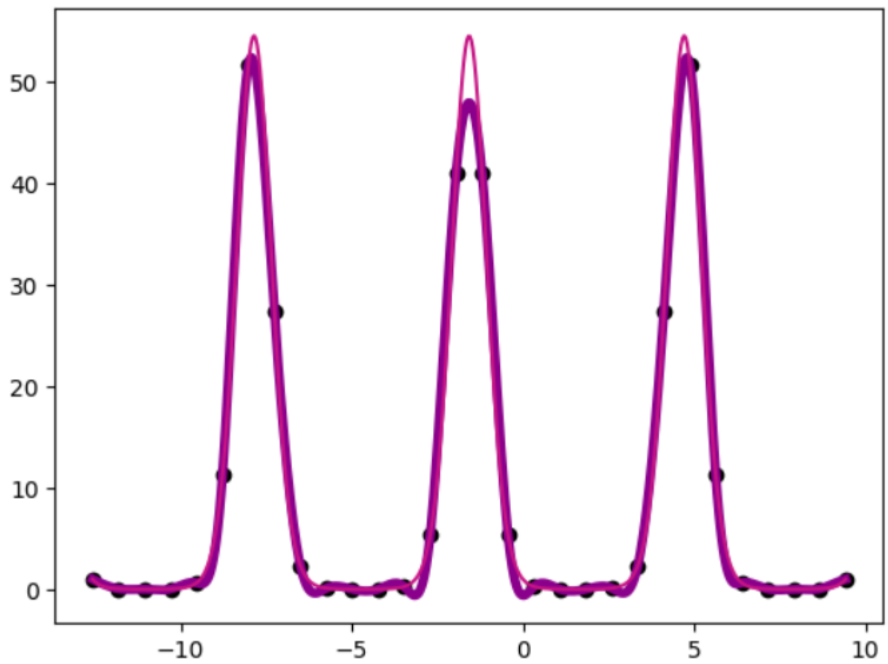


Wykres 4.2.2.1 Wykres dla liczby 5 węzłów, dla splajnu sześciennego



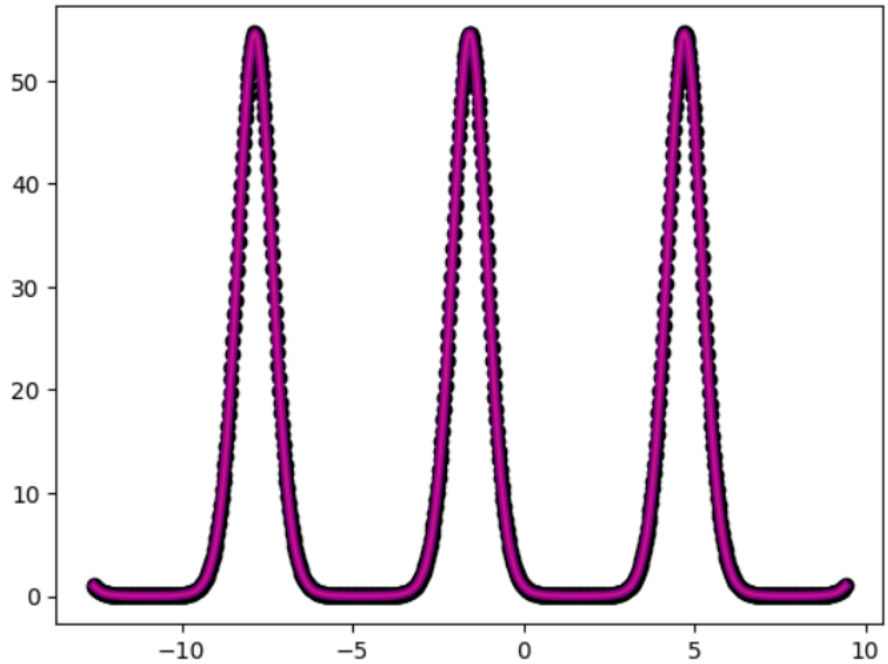
Wykres 4.2.2.2 Wykres dla liczby 7 węzłów, dla splajnu naturalnego

Najmniejszy błąd maksymalny (dla małej liczby węzłów, tj < 60) otrzymujemy dla 30 węzłów dla obu warunków brzegowych.



Wykres 4.2.2.3 Wykres dla liczby 30 węzłów, dla splajnu naturalnego

Najmniejszy błąd maksymalny otrzymujemy dla liczby 1000 węzłów dla splajnu naturalnego.



Wykres 4.2.2.4 Wykres dla liczby 1000 węzłów, dla splajnu naturalnego

5. Wnioski

Analizując zestawienia błędów, możemy zauważyć, że funkcje 3-ego stopnia są bardziej efektywne niż funkcje 2-ego stopnia.

Porównując interpolacje funkcjami sklejanymi i interpolacje w zagadnieniu Lagrange'a oraz Hermite'a, możemy zauważyć, że efekt Rungego nie występuje w interpolacji funkcjami sklejanymi. Ponadto, dla funkcji sklejanych nie zauważamy błędów spowodowanych obliczeniami komputera (wykresy nie "rozjeżdżają się"), tak jak było to widoczne dla interpolacji Lagrange'a lub Hermite'a.

Interpolacja funkcjami sklejanymi jest dokładniejsza od interpolacji w zagadnieniu Lagrange'a oraz Hermite'a. Dokładność wzrasta łącznie ze wzrostem liczby węzłów, czego zdecydowanie nie można było zauważyć dla poprzednich interpolacji.

6. Bibliografia

[1] Wykłady dr Katarzyny Rycerz z przedmiotu "Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice"

[2] Michoń Weronika, "Funkcja Sklejana", Wrocław 2020
http://www.math.uni.wroc.pl/~p-wyk4/mag2020/refs/Sem_mag2_WMichon.pdf

[3] Johannes Zeman, "Worksheet 5: Spline Interpolation Solutions",
Stuttgart University 2017
https://www2.icp.uni-stuttgart.de/~icp/mediawiki/images/1/10/SS_2017_PC_ws5_solution.pdf