Aineiston esittäminen funktiolla

1. Tunnetun funktion approksimointi
   - funktion laskeminen peruslaskutoimitusten avulla
   - alkuperäisen funktion laskeminen voi olla liian raskasta

Funktion arvot tunnetaan tarkasti joissakin pisteissä. Muut arvot lasketaan interpoloimalla.

- funktio ja derivaatat tunnetaan yhdessä pisteessä
  - Taylorin sarja
  - Padé-approksimaatio
- tasavälinen pistejoukko
  - interpolointipolynomit
- mielivaltainen pistejoukko
  - Lagrangen interpolointipolynomi
  - spline-funktiot
  - bezier-käyrät

2. Pienimmän neliösumman sovitus

Aineistossa satunnaista hajontaa, joten sitä ei voi kuvata täsmällisesti.

- lineaarinen sovitus (lineaarikombinaatio muuten mielivaltaisista funktioista)
- epälineaarinen sovitus

Sovituksen kriteerit

Funktioiden välinen ”etäisyyttä” $d(f, g)$ eli normia $\| f - g \|$ pyritään minimoimaan. Normi voidaan määritellä monella tavalla.

L_1-normi

$$\| f - g \|_1 = \int |f - g| \, dx$$

Sallii suuret poikkeamat, jos ne rajoittuvat lyhyelle välille.

L_2-normi vastaa euklidisen avaruuden etäisyyttä

$$\| f - g \|_2 = \sqrt{\int |f - g|^2 \, dx}.$$

Yleisemmin L_p-normi

$$\| f - g \|_p = \left(\int |f - g|^p \, dx \right)^{1/p}.$$

L_∞-normi eli maksiminormi

$$\| f - g \|_\infty = \sup |f - g|.$$

Estää suuret poikkeamat, mutta sovitus ei välttämättä missään kovin hyvä.

Taylorin sarjat

Olkoon f funktio $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$. Funktion kuvaajan pisteeseen x_0 asetetun tangentin yhtälö on

$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0),$$

missä $f'(x_0)$ on funktion f derivaatan df/dx arvo pisteessä x_0. Funktion arvoja pisteen x_0 lähellä voidaan arvioida tangentin avulla:

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0).$$

Arvio on sitä huonompi, mitä enemmän derivaatta f' muuttuu välillä $[x_0, x]$. Tätä muutosta kuvaa toinen derivaatta f'' jne.

Funktion arvo pisteessä x on

$$\begin{aligned} f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \\ + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n + \dots \end{aligned}$$

missä $f^{(n)}(x_0)$ on funktion n:nnen derivaatan arvo pisteessä x_0 ja $n!$ on n-kertoma $= 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot n$. Tämä on funktion f Taylorin sarja pisteessä x_0.

Esimerkkejä (kaikissa näissä on $x_0 = 0$):

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{1+x} &= 1 - x + x^2 - x^3 + \cdots \qquad \text{suppenee, kun} |x| < 1 \\
\frac{1}{1-x} &= 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots \\
\sqrt{1+x} &= 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \frac{1}{16}x^3 - \cdots \\
\sqrt{1-x} &= 1 - \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 - \frac{1}{16}x^3 - \cdots \\
\frac{1}{\sqrt{1+x}} &= 1 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 - \frac{5}{16}x^3 - \cdots \\
\frac{1}{\sqrt{1-x}} &= 1 + \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 + \frac{5}{16}x^3 + \cdots \\
e^x &= 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots + \frac{1}{n!}x^n + \cdots \qquad \text{kaikilla } x \\
\ln(1+x) &= x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 + \cdots \qquad x \in (-1, 1] \\
\sin x &= x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \cdots \qquad \text{kaikilla } x \\
\cos x &= 1 - \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 - \cdots \qquad \text{kaikilla } x \\
\tan x &= x + \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{15}x^5 + \cdots \qquad |x| < \frac{\pi}{2}
\end{aligned}
$$

Usein käytettyjä ovat lineaariapproksimaatiot, kuten

$$
\begin{aligned}
\sqrt{1+x} &\approx 1 + \frac{1}{2}x, \\
\frac{1}{\sqrt{1+x}} &\approx 1 - \frac{1}{2}x,
\end{aligned}
$$

Rationaaliapproksimaatiot

Approksimoidaan funktiota rationaalilausekkeella

$$\frac{a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^4}{1 + b_1 x + \ldots b_m x^m}.$$

Kertoimien etsiminen johtaa yleensä optimointitehtävään.

Usein käytetty yksinkertainen menetelmä on Padé-approksimaatio.

Esimerkiksi eksponenttifunktion Taylorin sarja pisteessä $x = 0$ on

$$f(x) = e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \ldots$$

Yritetään muodostaa rationaaliapproksimaatio, joka on muotoa

$$R(x) = \frac{a + bx + cx^2}{1 + dx}.$$

Vaadimme nyt, että tämä antaa pisteessä $x = 0$ saman arvon kuin Taylorin sarja, ja että myös molempien derivaatat ovat samoja.

Tarkastellaan erotusta

$$\begin{aligned} f(x) - R(x) &= 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 - \frac{a + bx + cx^2}{1 + dx} \\ &= \frac{(1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3)(1 + dx) - (a + bx + cx^2)}{1 + dx}. \end{aligned}$$

Vaadimme, että origossa tämä erotus ja sen derivaatat ovat nollia. Osoittajan on oltava identtisesti nolla.

Kirjoitetaan osoittaja auki ja ryhmitellään termit muuttujan x potenssien mukaan:

$$(1 - a) + (1 + d - b)x + (\frac{1}{2} + d - c)x^2 + (\frac{1}{6} + \frac{1}{2}d)x^3 + \frac{1}{6}x^4.$$

Jotta tämä olisi identtisesti nolla, on x:n jokaisen potenssin kertoimen erikseen oltava nolla. Viimeistä termiä ei saada häviämään, mutta kyseessä on kolmannen asteen approksimaatiota, joten termi voidaan heittää pois. Saadaan yhälöryhmä

$$\begin{aligned} 1 - a &= 0, \\ 1 + d - b &= 0, \\ \frac{1}{2} + d - c &= 0, \\ \frac{1}{6} + \frac{1}{2}d &= 0, \end{aligned}$$

josta

$$\begin{aligned}
a &= 1, \\
b &= \frac{2}{3}, \\
c &= \frac{1}{6}, \\
d &= -\frac{1}{3}.
\end{aligned}$$

Approksimaatio on

$$f(x) = \frac{1 + \frac{2}{3}x + \frac{1}{6}x^2}{1 - \frac{1}{3}x}.$$

Esimerkiksi pisteessä $x = 1$ neljän termin Taylorin sarja antaisi arvoksi $2\frac{2}{3} \approx 2.667$. Rationaaliapproksimaatiosta saadaan $f(1) = \frac{11}{4} = 2.750$.

Sama vika kuin Taylorin sarjalla: se antaa yhdessä pisteessä funktion arvon täsmälleen oikein, mutta ei pyri minimoimaan virhettä muissa pisteissä.

Tšebyševin polynomit

Palautuskaava

$$\cos(n+1)\phi + \cos(n-1)\phi = 2\cos\phi\,\cos n\phi.$$

Todistus:

$$\begin{aligned}
&\cos(n+1)\phi + \cos(n-1)\phi \\
&= \cos(n\phi + \phi) + \cos(n\phi - \phi) \\
&= \cos n\phi \cos\phi - \sin n\phi \sin\phi + \cos n\phi \cos\phi + \sin n\phi \sin\phi \\
&= 2\cos n\phi \cos\phi.
\end{aligned}$$

Palautuskaavasta saadaan

$$\begin{aligned}
\cos 2\phi &= 2\cos^2\phi - 1, \\
\cos 3\phi &= 2\cos\phi\,\cos 2\phi - \cos\phi \\
&= 4\cos^3\phi - 3\cos\phi \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Kulman ϕ monikertojen kosinit voidaan palauttaa muotoon, jossa esiintyy vain $\cos\phi$:n potensseja. Saadaan joukko lausekkeita, jotka ovat $\cos\phi$:n polynomeja. Merkitään

$$x = \cos\phi,$$

Määritellään Tshebyshevin polynomi T_n kaavalla

$$T_n(x) = \cos n\phi = \cos(n \arccos x).$$

$$\begin{aligned}
T_0(x) &= \cos 0 = 1, \\
T_1(x) &= \cos\arccos x = x. \\
T_2(x) &= \cos(2\arccos x) = \cos 2\phi \\
&= 2\cos^2\phi - 1 \\
&= 2x^2 - 1, \\
T_3(x) &= 4x^3 - 3x, \\
T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1 \\
T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x.
\end{aligned}$$

Oletetaan, että x on aina välillä $-1 \le x \le +1$.

Ominaisuuksia

Symmetria:

$$T_n(-x) = (-1)^n T_n(x).$$

Nollakohdat

Koska funktion $\cos\phi$ nollakohdat ovat $\phi = (2k+1)\pi/2$, $k = 0, 1, \ldots$, funktion $\cos n\phi$ nollakohdat ovat

$$\phi = \frac{2k+1}{n}\frac{\pi}{2}, \quad k = 0, 1, \ldots$$

Koska $T_n(x) = \cos n\phi$, nämä ovat samalla polynomin T_n nollakohtia. Muuttujan x avulla lausuttuina nollakohdat ovat

$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{n}\frac{\pi}{2}\right), \quad k = 0, 1, \ldots, n-1.$$

Ortogonaalisuus

Tshebyshevin polynomit muodostavat keskenään ortogonaalisten funktioiden joukon, jos painofunktioksi valitaan $1/\sqrt{1-x^2}$:

$$\int_{-1}^{+1} \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \begin{cases} 0, & n \neq m, \\ \pi/2, & n = m \neq 0, \\ \pi, & n = m = 0. \end{cases}$$

Äärelliselle pistejoukolle ortogonaalisuus pätee seuraavassa muodossa

$$\sum_{i=0}^{K} T_n(x_i)T_m(x_i) = \begin{cases} 0, & n \neq m, \\ (K+1)/2, & n = m \neq 0, \\ K+1, & n = m = 0, \end{cases}$$

missä pisteet x_i ovat polynomin T_{K+1} nollakohdat, $n \leq K$, $m \leq K$.

Minimaalisuus

Tshebyshevin polynomi on määritelmän mukaan jonkin kulman kosini, joten se ei itseisarvoltaan voi olla ykköstä suurempi (väliäll $-1 \leq x \leq 1$). Ääriarvokohdissa sen arvo on joko 1 tai -1. Maksiminormi on siten täsmälleen 1.

Palautuskaavan avulla voidaan helposti todistaa, että polynomin T_n korkeimman potenssin kerroin on 2^{n-1}. Jos polynomi kerrotaan luvulla 2^{1-n}, saadaan polynomi, jonka korkeimman potenssin kerroin on ykkönen.

Kaikista niistä polynomeista, joiden korkeimman potenssin kerroin on ykkönen, polynomilla $2^{1-n}T_n$ on pienin maksiminormi.

Polynomilla $2^{1-n}T_n$ on $n+1$ ääriarvokohtaa välillä $-1 \leq x \leq 1$. Näistä $n-1$ on pisteitä, joissa derivaatta häviää. Lisäksi polynomilla on ääriarvot välin päätepisteissä. Olkoot ääriarvokohdat $x_0 = -1$, x_1, ..., $x_n = 1$. Nämä ovat vuorotellen minimejä ja maksimeja. Oletetaan, että x_0 on maksimi.

Vastaoletus: oletetaan, että P_n on toinen n-asteinen polynomi, jolla on vielä pienempi maksiminormi. Koska x_0 on polynomin $2^{1-n}T_n$ maksimi, täytyy olla

$$P(x_0) < 2^{1-n}T_n(x_0).$$

Vastaavasti x_1 on minimi, jossa on oltava

$$P(x_1) > 2^{1-n}T_n(x_1).$$

Näin P_n on ääriarvokohdissa vuorotellen pienempi tai suurempi kuin $2^{1-n}T_n$.

$$\begin{aligned} P_n(x_0) - 2^{1-n}T_n(x_0) &< 0, \\ P_n(x_1) - 2^{1-n}T_n(x_1) &> 0, \\ P_n(x_2) - 2^{1-n}T_n(x_2) &< 0, \\ &\vdots \end{aligned}$$

Funktio $P_n(x) - 2^{1-n}T_n(x)$ vaihtaa merkkiä n kertaa. Koska kummassakin termissä korkeimman potenssin kerroin on ykkönen, nämä korkeimmat potenssit kumoavat toisensa, ja funktio on $n-1$-asteinen polynomi. Tällaisella polynomilla on kuitenkin vain $n-1$ nollakohtaa, joten se ei voi vaihtaa merkkiään n kertaa. Ristiriita $\Rightarrow$ vastaoletus ei pidä paikkaansa.

Miten on n pistettä x_k, $k = 1, \ldots, n$ sijoitettava välille $-1 \leq x \leq 1$ siten, että polynomin $(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$ maksiminormi tulee mahdollisimman pieneksi? Pisteiden on oltava Tshebyshevin polynomin T_n nollakohtia.

Interpolointi

Tasavälinen aineisto

Tunnetaan funktion arvot pisteissä x_i, $f(x_i) = y_i$.

$$
\begin{array}{cccccc}
i & x & f(x) & \Delta f & \Delta^2 f & \Delta^3 f \\
 & & & & & \\
-1 & x_{-1} & y_{i-1} & & & \\
 & & & \Delta f_{-1} & & \\
0 & x_0 & y_0 & & \Delta^2 f_{-1} & \\
 & & & \Delta f_0 & & \Delta^3 f_{-1} \\
1 & x_1 & y_1 & & \Delta^2 f_0 & \\
 & & & \Delta f_1 & & \\
2 & x_2 & y_2 & & &
\end{array}
$$

Merkitään $h = x_1 - x_0$.

Askeloperaattori $Ef(x) = f(x+h)$.

Eteenpäinen differenssi $\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$.

Taaksepäinen differenssi $\nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$.

Kaikki ovat lineaarisia operaattoreita.

Operaattoreille voidaan johtaa mm. seuraavat ominaisuudet:

$$E^2 f(x) = E(Ef(x)) = E(f(x+h)) = f(x+2h).$$

$$E^n f(x) = f(x+nh).$$

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x) = Ef(x) - f(x) = (E-1)f(x),$$

josta

$$\Delta = E - 1.$$

Newtonin-Gregoryn interpolointipolynomi:

$$\begin{aligned}
P(x_0 + sh) &= E^s f(x_0) = (1+\Delta)^s f(x_0) \\
&= \left[1 + s\Delta + \binom{s}{2}\Delta^2 + \dots\right] f(x_0) \\
&= f_0 + s\Delta f_0 + \binom{s}{2}\Delta^2 f_0 + \dots
\end{aligned}$$

$$P_2(x_0 + sh) = f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_0.$$

Kun $s = 0, 1, 2$, tämä kulkee pisteiden (x_0, y_0), $(x_0 + h, y_1)$ ja $(x_0 + 2h, y_2)$ kautta:

$$\begin{aligned}
&P_2(x_0) = P_2(x_0 + 0h) = y_0, \\
&P_2(x_1) = P_2(x_0 + 1h) = y_0 + \Delta f_0 = y_1, \\
&P_2(x_2) = P_2(x_0 + 2h) = y_0 + 2\Delta f_0 + \Delta^2 f_0 = y_2
\end{aligned}$$

P_2 voidaan käsittää myös s:n funktioksi, kun $s = (x - x_0)/h$ on mielivaltainen reaaliluku.

Samalla tavoin voidaan johtaa myös korkeamman asteisia interpolointipolynomeja.

Eteenpäisten differenssien sijasta voidaan käyttää myös taaksepäisiä tai molempia yhdessä.

Edellä esitetty menetelmä soveltuu vain tasaväliselle aineistolle.

Esimerkki:

x	y
10	2.0
30	3.0
50	3.8
75	4.8
100	5.2

Aineistossa 5 pistettä, joten se voidaan esittää neljännen asteen polynomin avulla:

$$y = P_4(n) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4.$$

Sijoittamalla annetut arvot saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{aligned}
a_0 + 10a_1 + 100a_2 + 1\,000a_3 + 10\,000a_4 &= 2.0,\\
a_0 + 30a_1 + 900a_2 + 27\,000a_3 + 810\,000a_4 &= 3.0,\\
a_0 + 50a_1 + 2\,500a_2 + 125\,000a_3 + 6250\,000a_4 &= 3.8,\\
a_0 + 75a_1 + 5\,625a_2 + 421\,875a_3 + 31640\,625a_4 &= 4.8,\\
a_0 + 100a_1 + 10\,000a_2 + 1000\,000a_3 + 100000\,000a_4 &= 5.2.
\end{aligned}$$

Tämä on lineaarinen yhtälöryhmä, jonka ratkaisu on

$$\begin{aligned}
a_0 &= 1.234,\\
a_1 &= 0.09115,\\
a_2 &= -0.001672,\\
a_3 &= 0.00002347,\\
a_4 &= -0.0000001189.
\end{aligned}$$

Työlästä!

Lagrangen interpolointi

Etsitään ensin joukko kardinaalifunktioita, polynomeja, joiden arvot annetuissa pisteissä ovat vain nollia tai ykkösiä.

Jos esitettäviä pisteitä on n kappaletta, kardinaalifunktioita tarvitaan n kappaletta, L_i, $i = 1, \ldots, n$. Valitaan ne siten, että $L_i(x_i) = 1$, $L_i(x_j) = 0$, $i \neq j$.

Edellisessä esimerkissä $n = 4$, joten kardinaalifunktiot ovat neljännen asteen polynomeja. Algebran peruslauseen mukaan ne voidaan kirjoittaa neljän tekijän tulona:

$$\begin{aligned} L_1(x) &= A_1(x - x_2)(x - x_3)(x - x_4)(x - x_5), \\ &\vdots \\ L_5(x) &= A_5(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)(x - x_4). \end{aligned}$$

Vakiot A_i saadaan ehdosta $L_i(x_i) = 1$; esim.

$$A(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)(x_1 - x_4)(x_1 - x_5) = 1.$$

Ensimmäinen kardinaalifunktio on siten

$$L_1(x) = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} \frac{x - x_3}{x_1 - x_3} \frac{x - x_4}{x_1 - x_4} \frac{x - x_5}{x_1 - x_5}.$$

Esimerkkitapauksen kardinaalifunktiot

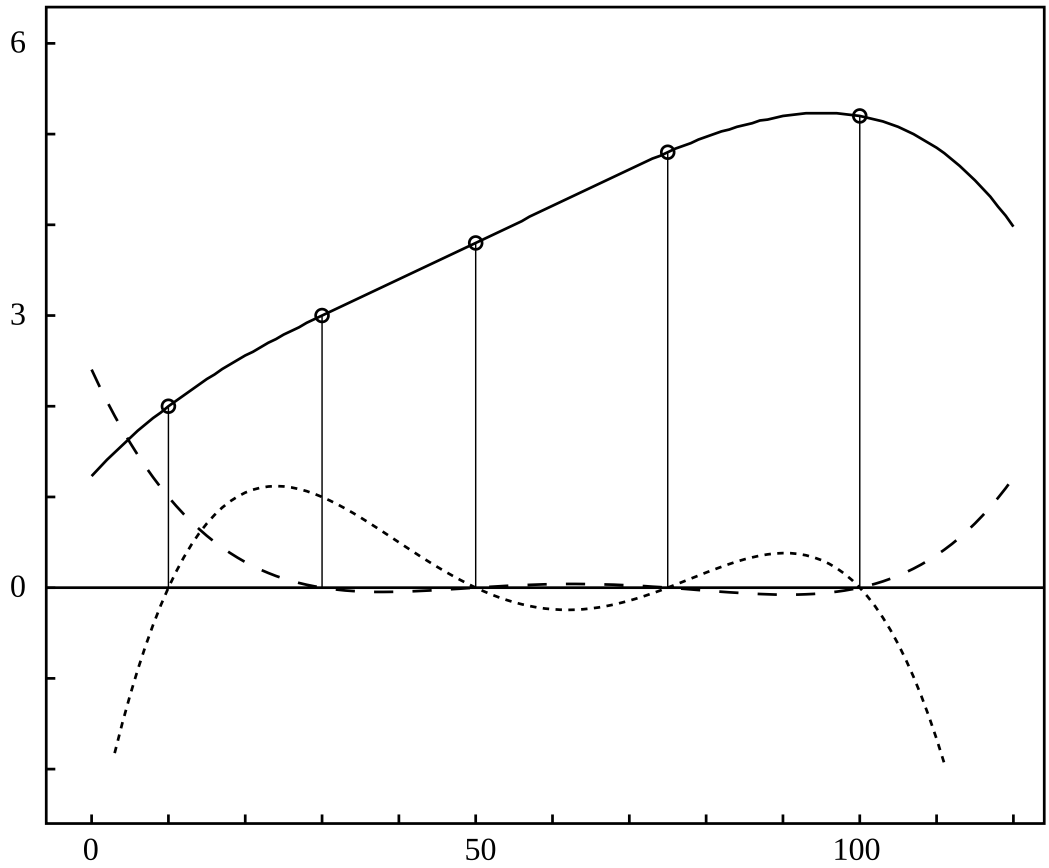
$$\begin{aligned} L_1(x) &= \frac{1}{4680000}(x - 30)(x - 50)(x - 75)(x - 100), \\ L_2(x) &= \frac{1}{-800000}(x - 10)(x - 50)(x - 75)(x - 100), \\ L_3(x) &= \frac{1}{700000}(x - 10)(x - 30)(x - 75)(x - 100), \\ L_4(x) &= \frac{1}{-1421875}(x - 10)(x - 30)(x - 50)(x - 100), \\ L_5(x) &= \frac{1}{7875000}(x - 10)(x - 30)(x - 50)(x - 75). \end{aligned}$$

Interpolointipolynomi voidaan muodostaa kardinaalifunktioiden lineaarikombinaationa:

$$P(x) = y_1 L_1(x) + y_2 L_2(x) + \cdots + y_n L_n(x).$$

Esimerkissä

$$P(x) = 2L_1(x) + 3L_2(x) + 3.8L_3(x) + 4.8L_4(x) + 5.2L_5(x).$$



Polynomeja voi käyttää interpolointiin, mutta ei ekstrapolointiin.

Spline-funktiot

Esimerkki:

x	y
0.0	0
1.2	6
2.0	11
3.5	9
4.1	17
5.0	24

Aineistoa ei voi kunnolla kuvata yhdellä funktiolla.

Käytetään paloittaista sovitusta: aineisto jaetaan sopiviin väleihin, ja kuhunkin väliin sovitetaan eri funktio.

Spline-funktiot ovat kolmannen asteen polynomeja, joiden kertoimet valitaan siten, että osavälien rajoilla toiset derivaatat ovat jatkuvia.

Esimerkin aineistossa on 6 pistettä 5 väliä. Kuvataan käyrää viidellä kolmannen asteen polynomilla

$$S_i(x) = a_i + b_i\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) + c_i\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right)^2 + d_i\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right)^3, \quad i = 1, \ldots, 5,$$

missä

$$h_i = x_{i+1} - x_i.$$

Ensimmäinen ja toinen derivaatta:

$$S_i'(x) = \frac{1}{h_i}\left(b_i + 2c_i\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right) + 3d_i\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right)^2\right),$$

$$S_i''(x) = \frac{1}{(h_i)^2}\left(2c_i + 6d_i\left(\frac{x - x_i}{h_i}\right)\right).$$

Ensimmäistä väliä esittävän polynomin täytyy kulkea molempien päätepisteiden kautta:

$$S_1(0) = a_1 = 0,$$
$$S_1(1.2) = a_1 + b_1 + c_1 + d_1 = 6.$$

Ensimmäisen välin päätepisteessä polynomin S_1 ensimmäinen ja toinen derivaatta ovat samoja kuin polynomin S_2 vastaavat derivaatat toisen välin alussa:

$$S_1'(1.2) = S_2'(1.2),$$
$$S_1''(1.2) = S_2''(1.2),$$

eli

$$\frac{1}{1.2}(b_1 + 2c_1 + 3d_1) = \frac{1}{0.8}b_2,$$
$$\frac{1}{1.2^2}(2c_1 + 6d_1] = \frac{1}{0.8^2}2c_2.$$

Esimerkissä välejä 5 kappaletta, ja kutakin väliä kohti saadaan neljä yhtälöä, joten periaatteessa saadaan 20 yhtälöä. Derivaattoja koskeva yhtälö ei päde viimeiselle välille: Yhtälöitä on 18, mutta määrättäviä vakioita 20.

Kaksi vakiota voidaan valita halutulla tavalla.

Luonnollinen splini: toiset derivaatat nollia ensimmäisessä ja viimeisessä pisteessä.

$$S_1''(0) = 2c_1 = 0,$$
$$S_5''(5) = 2c_5 + 6d_5 = 0.$$

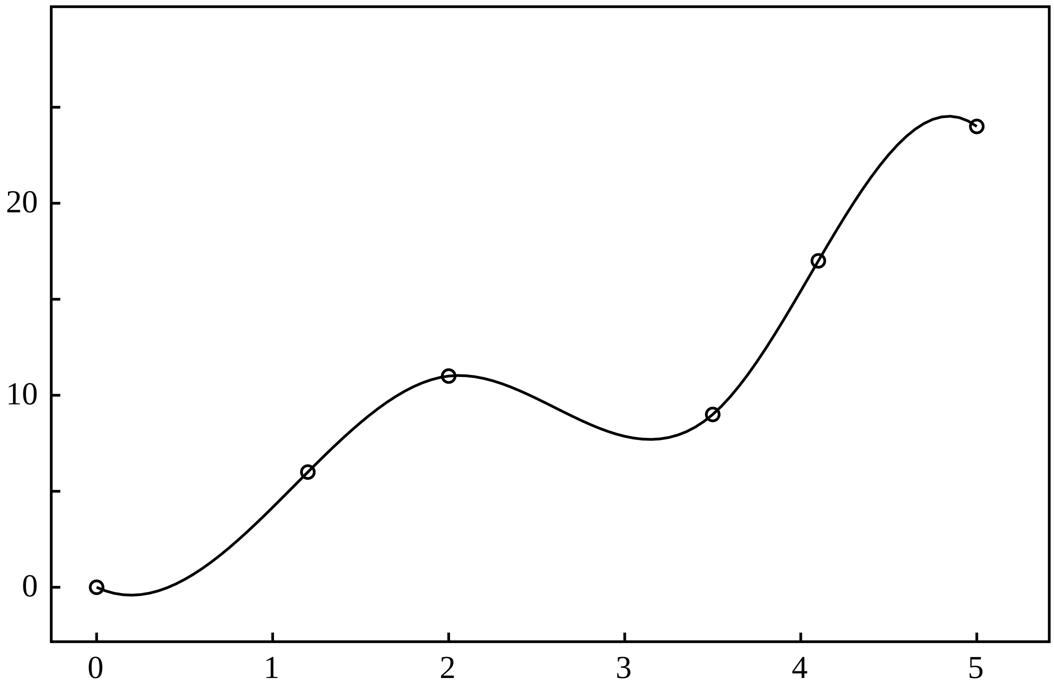
Saadaan lineaarinen yhtälöryhmä

$$\begin{array}{ccccccccc}
a_1 & & & & & & & & = 0, \\
a_1 & + & b_1 & + & c_1 & + & d_1 & & = 6, \\
b_1 & + & 2c_1 & + & 3d_1 & & & - \quad 1.500b_2 & = 0, \\
 & & 2c_1 & + & 6d_1 & & & - \quad 4.5002c_2 & = 0, \\
 & & 2c_1 & & & & & & = 0, \\
a_2 & & & & & & & & = 6, \\
a_2 & + & b_2 & + & c_2 & + & d_2 & & = 11, \\
b_2 & + & 2c_2 & + & 3d_2 & & & - \quad 0.533b_3 & = 0, \\
 & & 2c_2 & + & 6d_2 & & & - \quad 0.5692c_3 & = 0, \\
 & & & & & & & & \vdots \\
a_5 & & & & & & & & = 17, \\
a_5 & + & b_5 & + & c_5 & + & d_5 & & = 24, \\
 & & 2c_5 & + & 6d_5 & & & & = 0,
\end{array}$$

Kertoimet a_i saadaan suoraan ja niiden arvot voidaan sijoittaa yhtälöihin, joissa ne esiintyvät.

Tämän ratkaisu on

i	a_i	b_i	c_i	d_i
1	0.0	4.54	0.00	1.46
2	6.0	5.94	1.94	−2.89
3	11.0	2.19	−23.68	19.50
4	9.0	5.32	5.57	−2.89
5	17.0	11.67	−7.00	2.33



Edellä saatu yhtälöryhmä ei ole kätevin mahdollinen.

$$
\begin{aligned}
y &= a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3, \\
y_i &= a_i, \\
y_{i+1} &= a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3, \\
y' &= b_i + 2c_i(x - x_i) + 3d_i(x - x_i)^2, \\
y_i' &= b_i, \\
y_{i+1}' &= b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2, \\
y'' &= 2c_i + 6d_i(x - x_i), \\
y_i'' &= 2c_i, \\
y_{i+1}'' &= 2c_i + 6d_i h_i
\end{aligned}
$$

Otetaan uusiksi muuttujiksi toisen derivaatan arvot $D_i = y_i''$. Tuntemattomille vakioille saadaan lausekkeet

$$
\begin{aligned}
a_i &= y_i, \\
c_i &= D_i/2, \\
d_i &= (D_{i+1} - D_i)/6h_i, \\
b_i &= \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{2h_i D_i + h_i D_{i+1}}{6}.
\end{aligned}
$$

Välin i alussa $y_i' = b_i$. Edellisen välin avulla laskettuna derivaatta on

$$
\begin{aligned}
y_i' &= b_{i-1} + 2c_{i-1}(x_i - x_{i-1}) + 3d_{i-1}(x_i - x_{i-1})^2 \\
&= b_{i-1} + 2c_{i-1}h_{i-1} + 3d_{i-1}h_{i-1}^2.
\end{aligned}
$$

Asetetaan nämä lausekkeet yhtä suuriksi ja lausutaan vakiot derivaattojen D_i ja y-arvojen avulla:

$$
\begin{aligned}
y_i' &= \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{2h_i D_i + h_i D_{i+1}}{6} \\
&= 3\left(\frac{D_i - D_{i+1}}{6h_{i-1}}\right) h_{i-1}^2 + 2\left(\frac{D_{i-11}}{2}\right) h_{i-1} \\
&\quad + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} - \frac{2h_{i-1}D_{i-1} + h_{i-1}D_i}{6},
\end{aligned}
$$

joka sievenee muotoon

$$
\begin{aligned}
&h_{i-1}D_{i-1} + (2h_{i-1} + 2h_i)D_i + h_i D_{i+1} \\
&= 6\left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}\right), \\
&i = 2, \ldots, n-1.
\end{aligned}
$$

Tässä on $n-2$ yhtälöä ja n tuntematonta D_i. Lisäksi voidaan valita esimerkiksi $D_1 = D_n = 0$, jolloin kerroinmatriisi on

$$\begin{pmatrix} 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & 0\cdots & 0 & 0 \\ h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & 0\cdots & 0 & 0 \\ 0 & h_3 & 2(h_3+h_4) & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) \end{pmatrix}.$$

Tämä on tridiagonaalinen yhtälöryhmä, joka on helppo ratkaista.

```
subroutine cubicspline(n, x, y, a, b, c, d)
 integer, intent(in) :: n
 real, intent(in), dimension(maxpoint) :: x, y
 real, intent(out), dimension(maxpoint) :: a, b, c, d

 integer i
 real, dimension(maxpoint,4) :: u
 real, dimension(maxpoint) :: s, h
 real t

 do i=1,n-1          ! h = askel x-suunnassa
   h(i) = x(i+1)-x(i)
 end do

 do i=1,n-2          ! lasketaan kerroinmatriisi
  u(i, 1) = h(i)
  u(i, 2) = 2*(h(i)+h(i+1))
  u(i, 3) = h(i+1)   ! oikean puolen vektori
  u(i, 4) = 6.0* ((y(i+2)-y(i+1))/h(i+1) &
       - (y(i+1)-y(i))/h(i))
 end do
 u(1,1) = 0.0
 u(n-2,3) = 0.0

 do i=2,n-2          ! eliminointi
  t = u(i, 1)/u(i-1, 2)
  u(i, 2) = u(i,2) - t * u(i-1, 3)
  u(i, 4) = u(i,4) - t * u(i-1, 4)
 end do

 u(n-2,4) = u(n-2,4) / u(n-2,2)  ! takaisinsijoitus
 do i=n-3,1,-1
  u(i,4) = (u(i, 4) - u(i, 3) * u(i+1, 4))/u(i,2)
 end do

 s(1) = 0.0          ! toiset derivaatat
 do i=2,n-1
  s(i)=u(i-1,4)
 end do
 s(n) = 0.0

 do i=1,n-1          ! splinien kertoimet
  a(i) = y(i)
  b(i) = (y(i+1)-y(i))/h(i) - (2.0*h(i)*s(i) + h(i)*s(i+1))/6.0
  c(i) = s(i) / 2.0
  d(i) = (s(i+1)-s(i))/(6*h(i))
 end do

end subroutine
```

Splinejä voidaan jäykistää, jolloin ne mutkittelevat vähemmän, mutta eivät enää kuvaa aineistoa aivan täsmällisesti.

Splinit sopivat interpolointiin, mutta eivät ekstrapolointiin.

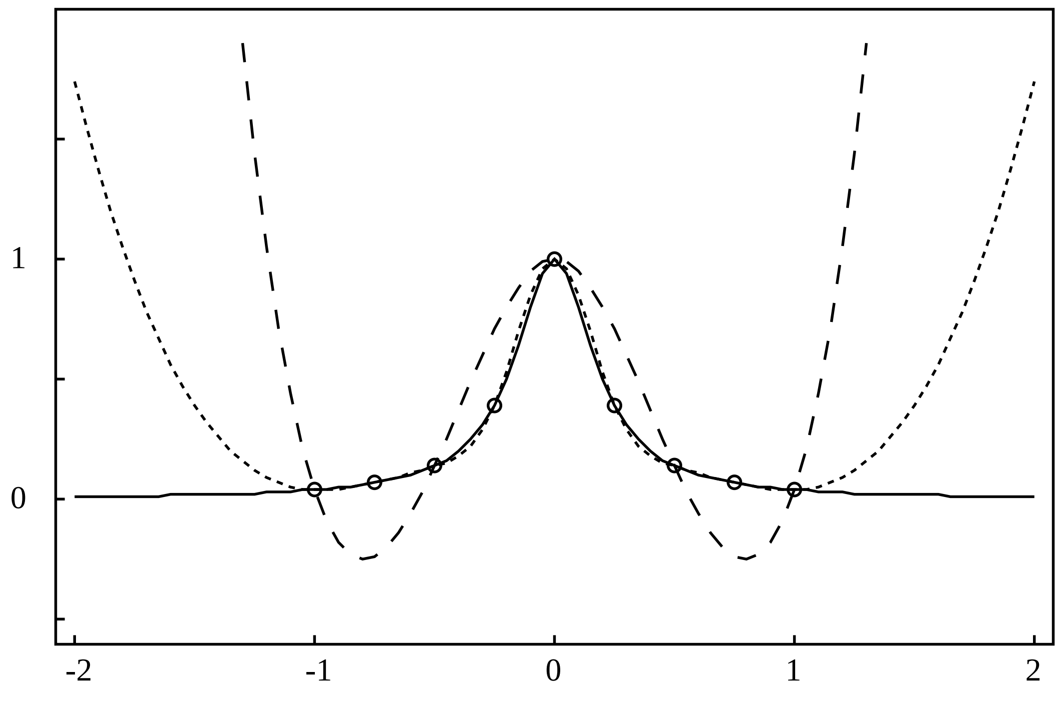
Jos aineistossa on jyrkkiä vaihteluita tai pitkiä tyhjiä välejä, käyrään voi tulla ylimääräisiä mutkia ja heilahteluja.

Splinien ongelmia voi korjata lisäämällä uusia havaintopisteitä. Tärkeätä on, että pisteitä on riittävän tiheässä jyrkkien mutkien ympäristössä.

Jos aineiston yhtä pistettä muutetaan, koko ratkaisu on laskettava uudestaan. Splinien kerroinmatriisi on nauhamatriisi, ja yhden pisteen muutoksesta aiheutuva häiriö vaimenee yleensä nopeasti kaueammas siirryttäessä.

Esimerkki: Rungen funktio

$$y = \frac{1}{1 + 25x^2}.$$



Kaksiulotteiset käyrät

Edellä oletettiin, että vaaka-akselilla oleva muuttuja on koko ajan kasvava.

Jos aineisto on yleistä käyrää esittävä pistejoukko, x-koordinaattia ei voi käyttää riippumattomana muuttujana.

Jos molemmat koordinaatit riippuvat jostakin parametrista t, se voidaan valita riippumattomaksi muuttujaksi. Saadaan kaksi funktiota $x = x(t)$ ja $y = y(t)$, jolloin vastaava piste tasossa on $(x(t), y(t))$.

Muussa tapauksessa valitaan jokin parametrointi. Esimerkiksi

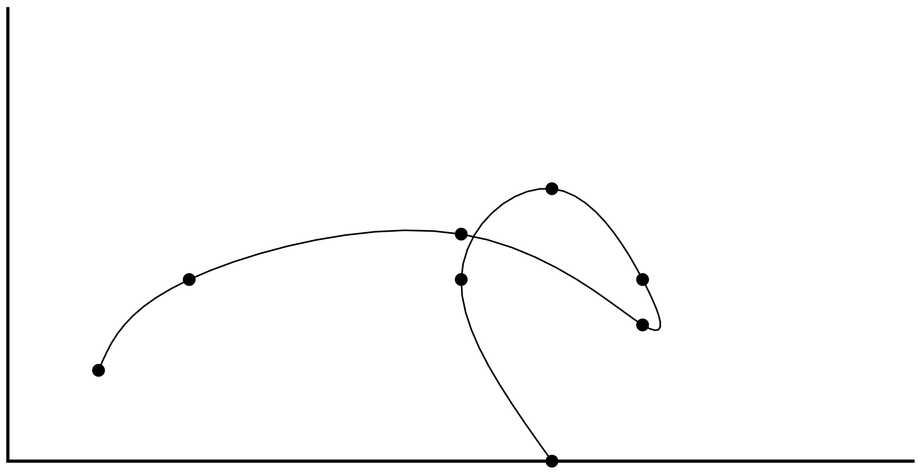
$$\begin{aligned} x_i(t) &= a_i + b_i t + c_i t^2 + d_i t^3, \\ y_i(t) &= a'_i + b'_i t + c'_i t^2 + d'_i t^3. \end{aligned}$$

missä $0 \leq t \leq 1$.

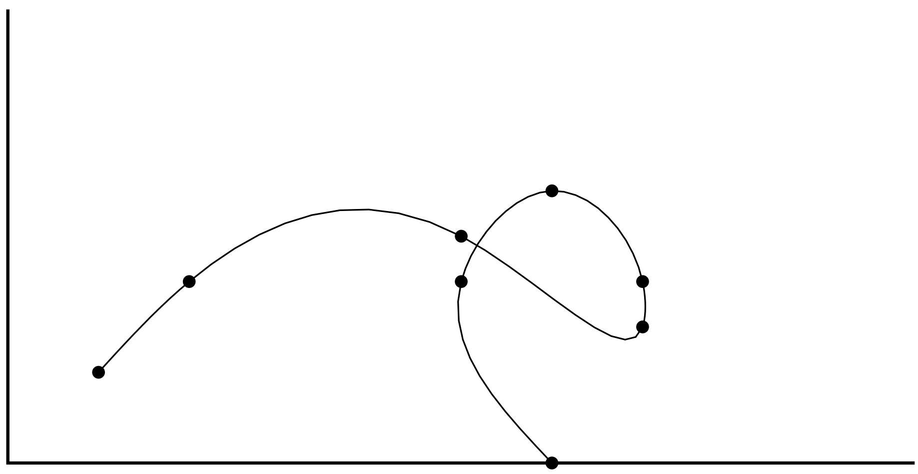
Spline-funktion sovitus mielivaltaiseen 2D-pistejoukkoon:

```
program splin2
 implicit none
 integer, parameter :: maxpoint=100, npt=10
 real, dimension(maxpoint) :: &
    x, y, &      ! original data
    t, &         ! parameter
    ax, bx, cx, dx,&! spline coefficients
    ay, by, cy, dy
 real, dimension(0:npt) :: &
    x1, y1       ! interpolated points
 integer :: n, &     ! number of points
        i, k
 real :: h, s

 ! read the data from standard input
 call getdata(n,x,y)

 ! parameter, x=x(t), y=y(t)
 do i=1,n
   t(i)=i
 end do

 ! solve the spline coefficients
 call cubicspline(n, t,x, ax,bx,cx,dx)
 call cubicspline(n, t,y, ay,by,cy,dy)

 ! plot the original data
 call init("xx.ps", 3.0, 10.0, 1.0, 1.0)
 call frame(0.0, 0.0, 10.0, 5.0)
 call plotpoints(x,y,1,1,n)

 ! plot n-1 spline polynomials
 do i=1,n-1
  h = t(i+1)-t(i)
  do k=0,npt
   s = k*h/npt
   x1(k) = ax(i) + bx(i)*s + cx(i)*s**2 + dx(i)*s**3
   y1(k) = ay(i) + by(i)*s + cy(i)*s**2 + dy(i)*s**3
  end do
  call plotcurve(x1, y1, 0, 0, npt, 0.5, 0)
 end do

 ...

end program
```

```
1.0 1.0
2.0 2.0
5.0 2.5
7.0 1.5
7.0 2.0
6.0 3.0
5.0 2.0
6.0 0.0
```



```
t(1)=0.0
do i=2,n
   t(i)=t(i-1)+sqrt((x(i)-x(i-1))**2+(y(i)-y(i-1))**2)
end do
```



Bézier-käyrät

Bernšteinin interpolointipolynomi on kompleksitason käyrä

$$z(t) = (1-t)^3 z_1 + 3t(1-t)^2 z_2 + 3t^2(1-t) z_3 + t^3 z_4,$$

missä $0 \leq t \leq 1$ ja pisteet z_i ovat käyrän neljä kontrollipistettä.

Pierre Bézier alkoi käyttää näitä 1960-luvulla tietokoneavusteisessa suunnittelussa.

Bézier-käyrä määritellään kahden päätepisteen ja kahden kontrollipisteen avulla. Käyrä kulkee aina päätepisteiden kautta. Kontrollipisteillä ilmoitetaan tangenttien suunnat päätepisteissä.

Käyrä lähtee päätepistestä kontrollipisteen suuntaan sitä suorempana mitä kauempana kontrollipiste on.

Sopii hyvin juuri interaktiiviseen käyttöön.

PostScript-kielessä on valmiina operaattori (`curveto`) Bézier-käyrän piirtämiseen.