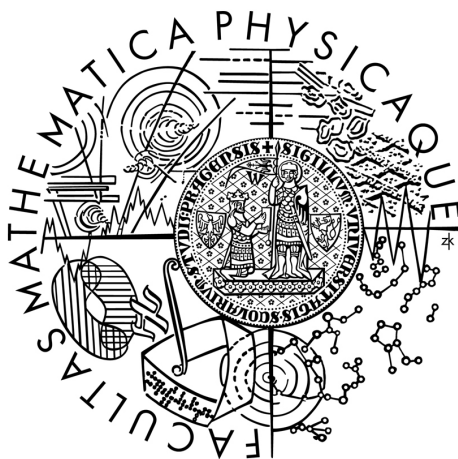


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Kateřina Oukropcová

Zhlazující kvadratické a kubické spliny

Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Václav Kučera, Ph.D.

Studijní program: Matematika

Studijní obor: Finanční matematika

Praha 2014

Ráda bych touto cestou poděkovala svému vedoucímu bakalářské práce panu RNDr. Václavu Kučerovi, Ph.D. za odborný dohled, cennou pomoc v průběhu zpracování této práce a také za vstřícnost a věnovanou ochotu při konzultacích. Mé poděkování patří také mému příteli za morální podporu i za zapůjčení literatury.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne 31. 7. 2014

Název práce: Zhlazující kvadratické a kubické spliny

Autor: Kateřina Oukropcová

Katedra: Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Václav Kučera, Ph.D., Katedra numerické matematiky

Abstrakt: Cílem této bakalářské práce je zpracovat téma zhlazujících kvadratických a kubických splinů na rovnoměrném dělení. Nejdříve jsou zadefinovány základní pojmy v oblasti splinů, následně je představena problematika interpolačních splinů zaměřena na minimalizující vlastnosti splinů lichého i sudého stupně, poté problematika zhlazujících splinů pro spliny lichého stupně a spliny kvadratické. Dále jsou odvozeny algoritmy konstrukce zhlazujícího kubického a kvadratického splinu. V poslední kapitole jsou s použitím softwaru Matlab tyto algoritmy implementovány a aplikovány na sady testovacích dat. Výsledky jsou prezentovány grafickou formou. Na závěr jsou tyto výsledky zhodnoceny.

Klíčová slova: interpolace, aproximace, kubický spline, kvadratický spline, zhlazující spline

Title: Smoothing quadratic and cubic splines

Author: Kateřina Oukropcová

Department: Department of Numerical Mathematics

Supervisor: RNDr. Václav Kučera, Ph.D., Department of Numerical Mathematics

Abstract: The aim of this bachelor thesis is to study the topic of smoothing quadratic and cubic splines on uniform partitions. First, we define the basic concepts in the field of splines, next we introduce interpolating splines with a focus on their minimizing properties for odd degree and quadratic splines and finally smoothing odd degree and quadratic splines. We derive algorithms for the construction of smoothing cubic and quadratic splines. In the last chapter, the presented algorithms are implemented in Matlab and applied to test data. Obtained results are presented in graphic form and discussed.

Keywords: interpolation, approximation, cubic spline, quadratic spline, smoothing spline

Obsah

Úvod	2
1 Základní pojmy a označení	3
1.1 Spliny	3
1.2 Hilbertovy prostory	5
1.3 Ortogonální projekce	6
2 Teorie	7
2.1 Interpolační spliny	7
2.1.1 Interpolační spliny lichého stupně	7
2.1.2 Interpolační spliny sudého stupně	11
2.2 Zhlazující spliny	14
2.2.1 Zhlazující spliny lichého stupně	14
2.2.2 Zhlazující kvadratické spliny	22
2.3 Konstrukce zhlazujících splinů	29
2.3.1 Konstrukce zhlazujícího kubického splinu	29
2.3.2 Konstrukce zhlazujícího kvadratického splinu	33
3 Implementace	38
3.1 Sestrojení algoritmů	38
3.2 Numerické výsledky	41
Závěr	49
Literatura	50

Úvod

Tato bakalářská práce si klade za cíl představit na základě literatury [2], [3] a [4] problematiku kubických a kvadratických zhlazujících splinů, a to jak teoreticky, tak i formou sestavení a otestování jejich algoritmů. Výsledky by měly být graficky zpracovány, aby bylo umožněno prozkoumat a čtenářům pomoci vytvořit si představu, jaký výstup se dá očekávat při dané míře aproximace.

Aproximace splinem je mnohdy výhodnější než běžné polynomiální aproximace. Třeba takový Lagrangeův interpolační polynom má pro rovnoměrně rozdělené uzly a vysoké stupně polynomu tendenci oscilovat, čemuž spline s vhodně zvolenými okrajovými podmínkami zamezí. Tento jev je popsán například v [8].

Spliny mají v technické praxi mnohé využití. Lze se s nimi setkat například v oblastech numerické interpolace a aproximace, při numerickém řešení rovnic různého typu za daných počátečních a okrajových podmínek či při řešení optimalizačních a integrálních úloh. Podrobnější přehled praktické aplikace lze nalézt v [5]. Konkrétně interpolace se využívá k pospojení diskrétních dat, k náhradě příliš složitých funkcí či u funkcí, které nelze přímo vyčíslit. Aproximace ve smyslu nejmenších čtverců je zase užitečná například ve statistice při náhradě rozsáhlých souborů dat hladkými křivkami či k vyhlazování naměřených dat zatížených chybami nebo náhodným šumem. K této aproximaci slouží právě tzv. zhlazující spliny. V našem případě se však z důvodu možnosti rozličného využití budeme zabývat zkonstruováním zhlazujících splinů bez jakékoli konkrétnější aplikace.

Představme si nyní strukturu práce. V první kapitole si nejprve zavedeme často užívaná označení a zadefinujeme si některé pojmy související se spliny, dále s Hilbertovými prostory a nakonec s ortogonální projekcí. Poslední dvě zmíněné oblasti budou zapotřebí k dokázání lemmat a vět z druhé kapitoly.

V následující kapitole se budeme zabývat teorií interpolačních a zhlazujících splinů. Dokážeme si jejich minimalizující vlastnost, existenci a jednoznačnost, ukážeme si možné volby doplňujících podmínek a také si vyjádříme vztahy, které poté využijeme k odvození algoritmů konstrukce zhlazujícího kubického a kvadratického splinu.

V poslední kapitole jsou pomocí softwaru Matlab zhlazující spliny zkonstruovány a graficky zpracovány na základě různých vstupních, testovacích dat. Jednotlivé výsledky jsou okomentovány a poté je zhodnocena celková efektivita zhlazujících splinů jako nástroje v oblasti numerické aproximace ve smyslu nejmenších čtverců.

Kapitola 1

Základní pojmy a označení

Než se začneme plně věnovat tématu splinů, budeme potřebovat zavést některá označení. Taktéž nejprve uvedeme několik definic.

V této bakalářské práci se budeme pohybovat v různých číselných oborech. Množinu reálných čísel budeme značit \mathbb{R} , množinu komplexních čísel \mathbb{C} , množinu přirozených čísel \mathbb{N} . Množina \mathbb{N}_0 bude znamenat $\mathbb{N} \cup \{0\}$.

Dále budeme pracovat s polynomy, kdy symbol $P_m(I)$ bude označovat prostor polynomů stupně nejvýše m na intervalu I . Běžně také budeme užívat k -tou derivaci funkce s , kterou označíme $s^{(k)}$. V textu budeme zmiňovat i Sobolevovy prostory, na nichž mají funkce pouze slabé derivace, avšak jejich značení zavedeme stejné, tedy $s^{(k)}$. Pro $k = 1, 2, 3$ však budeme užívat zjednodušené symboly s', s'', s''' . Pro derivaci v bodě x_i zleva zavedeme označení s'_{i-} , pro derivaci v bodě x_i zprava s'_{i+} . Prostor všech funkcí s m -tou spojitou derivací na intervalu $\langle a, b \rangle$ značme $\mathbb{C}_{\langle a, b \rangle}^m$.

Pozn.: Funkce s definovaná na intervalu I je polynom stupně nejvýše $m - 1$ právě tehdy, když její m -tá derivace je na celém intervalu I nulová. Tedy

$$s(x) \in P_{m-1}(I) \Leftrightarrow s^{(m)}(x) = 0, \forall x \in I.$$

Tuto skutečnost budeme později využívat.

1.1 Spliny

V této části si zdefinujeme základní pojmy, se kterými se budeme setkávat v celé práci. Obecné definice některých pojmů pro naše účely zkonkrétníme. Například polynomiální spline se obecně definuje na nerovnoměrném dělení s různou násobností uzlů (viz [6]), kdežto my se omezíme na obyčejný polynomiální spline na rovnoměrném dělení.

Definice 1. *Nechť $I = \langle a, b \rangle$ je konečný uzavřený interval na reálné ose. Nechť $x_0 = a$, $x_{N+1} = b$, $x_j = a + jh$, kde $j = 0, \dots, N + 1$ pro $N \in \mathbb{N}$. Potom množinu $\pi = \{x_j\}_{j=0}^{N+1}$ nazveme rovnoměrné dělení intervalu I s krokem h .*

Poznamenejme, že pro krok h platí $h = \frac{b-a}{N+1}$.

Definice 2. Necht' je dán interval I a jeho rovnoměrné dělení $\pi = \{x_j\}_{j=0}^{N+1}$. Necht' je dále dáno číslo $m \in \mathbb{N}$ a reálná funkce s definovaná na intervalu I . Tuto funkci nazýváme obyčejný polynomiální spline stupně $m - 1$ (resp. řádu m) s uzly x_1, \dots, x_N , jsou-li splněny následující podmínky:

1. Existují polynomy $s_j \in P_{m-1}$, $j = 0, \dots, N$ tak, že $s(x) = s_j(x)$ pro $x \in \langle x_j, x_{j+1} \rangle$.
2. Je-li $m > 1$, pak $s_{j-1}^{(k)}(x_j) = s_j^{(k)}(x_j)$ pro všechna $k = 0, 1, \dots, m - 2$ a všechna $j = 1, \dots, N$. V případě $m = 1$ není mezi hodnotami $s_{j-1}(x_j)$ a $s_j(x_j)$ žádná souvislost, takže funkce s může být v bodě x_j nespojitá.

Pro zjednodušení budeme od současné chvíle obyčejné polynomiální spliny nazývat prostě spliny.

Prostor splinů stupně $m - 1$ (resp. řádu m) s uzly x_1, \dots, x_N budeme značit symbolem $S(P_{m-1}, \pi)$, kde $\pi = \{x_j\}_{j=0}^{N+1}$.

Pro prostor splinů lichého stupně $2n - 1$ k danému dělení π budeme namísto $S(P_{2n-1}, \pi)$ používat zjednodušené značení $Sp_n(\pi)$. V našem případě se zaměříme především na kubické spliny $Sp_2(\pi)$.

Definice 3. Prostor přirozených splinů $\mathcal{N}Sp_n(\pi)$ lichého stupně $2n - 1$ na intervalu I k danému dělení π definujeme takto:

$$\mathcal{N}Sp_n(\pi) = \{s \in Sp_n(\pi) : s|_{\langle x_0, x_1 \rangle} \in P_{n-1}, \text{ a } s|_{\langle x_N, x_{N+1} \rangle} \in P_{n-1}\}.$$

Pozn.: Potom pro takto definovaný prostor přirozených splinů zřejmě platí

$$s^{(k)}(a) = s^{(k)}(x_1) = s^{(k)}(x_N) = s^{(k)}(b) = 0 \text{ pro } k = n, \dots, 2n - 1.$$

Definice 4. Necht' $\{x_j\}_{j=0}^{N+1}$ je rovnoměrné dělení intervalu $\langle a, b \rangle$ a f je reálná funkce definovaná v bodech $\{x_j\}_{j=1}^N$. Pak funkci s nazveme $S(P_{m-1}, \pi)$ -interpolací funkce f , jestliže

1. $s \in S(P_{m-1}, \pi)$,
2. pro všechna $j = 1, \dots, N$ je $s(x_j) = f(x_j)$.

Speciálně pro $s \in Sp_n(\pi)$ se jedná o $Sp_n(\pi)$ -interpolaci.

1.2 Hilbertovy prostory

V této části se budeme zabývat definicemi souvisejícími s Hilbertovými prostory. Tyto prostory využijeme v následující kapitole k dokázání lemmat o existenci a jednoznačnosti zhlazujících splinů. Podrobnější výklad lze najít v [7].

Definice 5. *Nechť V je lineární prostor nad \mathbb{R} s binární operací (\cdot, \cdot) , která má následující vlastnosti:*

$$(i) \quad \forall x \in V : (x, x) \geq 0,$$

$$(ii) \quad \forall x \in V : (x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0,$$

$$(iii) \quad \forall x, y \in V : (x, y) = (y, x),$$

$$(iv) \quad \forall x, y, z \in V \quad \forall \alpha, \beta \in T : (\alpha x + \beta y, z) = \alpha(x, z) + \beta(y, z).$$

Pak říkáme, že dvojice $(V, (\cdot, \cdot))$ tvoří lineární prostor se skalárním součinem. Operaci (\cdot, \cdot) nazýváme skalární součin na V (též unitární lineární prostor).

Definice 6. *Nechť V je lineární prostor nad \mathbb{R} . Normou na V rozumíme zobrazení $\|\cdot\| : V \rightarrow [0, \infty)$ takové, že platí:*

$$(i) \quad \forall x \in V : \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0,$$

$$(ii) \quad \forall x \in V \quad \forall \alpha \in T : \|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|,$$

$$(iii) \quad \forall x, y \in V : \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|.$$

Pak říkáme, že dvojice $(V, \|\cdot\|)$ tvoří normovaný lineární prostor.

Definice 7. *Nechť $(X, \|\cdot\|)$ je normovaný lineární prostor a $\{x_n\}$ je posloupnost prvků $(X, \|\cdot\|)$. Nechť $x \in (X, \|\cdot\|)$. Potom říkáme, že*

$$\text{posloupnost } \{x_n\} \text{ konverguje k } x \Leftrightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \{x_n\} = x \Leftrightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \|x_n - x\| = 0.$$

Definice 8. *Posloupnost $\{x_n\}$ nazveme cauchyovskou, jestliže*

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \quad m, n \geq n_0 \Rightarrow \|x_n - x_m\| \leq \varepsilon.$$

Definice 9. *Prostor, ve kterém je každá cauchyovská posloupnost konvergentní (existuje její limita), se nazývá úplný.*

Definice 10. *Normovaný lineární prostor, který je úplný, se nazývá Banachův prostor.*

Definice 11. *Banachův prostor se skalárním součinem (resp. unitární Banachův prostor) se nazývá Hilbertův prostor.*

V této práci budeme používat především následující Hilbertovy prostory na konečném reálném intervalu $I = \langle a, b \rangle$:

- $H^n(I)$, neboli speciální případ Sobolevova prostoru $W^{n,p}(I)$ (viz [1]), přičemž $H^n(I)$ značí $W^{n,2}(I)$, kde $n \in \mathbb{N}_0$,

- $L^2(I)$, neboli prostor lebesgueovsky integrovatelných funkcí s kvadrátem (viz [7]).

Pro tyto prostory platí

- $H^0(I) \equiv L^2(I)$,
- $f \in H^n(I) \Rightarrow f^{(n-1)}$ je funkce absolutně spojitá na I a $f^{(n)} \in L^2(I)$.

Pro zjednodušení budeme od současné chvíle vynechávat ve značení norem a skalárních součinů v Hilbertově prostoru interval I , tedy $\|f\|_{H^n(I)} \equiv \|f\|_{H^n}$ a $(f,g)_{H^n(I)} \equiv (f,g)_{H^n}$.

Definice 12. Skalární součin v Hilbertově prostoru $H^n(I)$ je definován předpisem

$$(f,g)_{H^n} = \sum_{k=0}^n \int_I f^{(k)}(x)g^{(k)}(x) dx.$$

Norma v Hilbertově prostoru $H^n(I)$ je dána formulí

$$\|f\|_{H^n}^2 = (f,f)_{H^n}, \quad f \in H^n(I).$$

1.3 Ortogonální projekce

Definice 13. Nechť V je vektorový prostor se skalárním součinem nad \mathbb{R} . Každé dva prvky $x,y \in V$ nazveme kolmé resp. ortogonální právě tehdy, když jejich skalární součin je roven nule, tedy když $(x,y) = 0$.

Definice 14. Nechť V je vektorový prostor se skalárním součinem nad \mathbb{R} a necht' $W \subset V$. Necht' dále existuje zobrazení $P : V \rightarrow W$, které každému prvku $v \in V$ přiřadí prvek $w \in W$ takový, že prvek $v - w$ je kolmý na podprostor W neboli na každý prvek $z \in W$. Potom prvek $w = Pv$ nazýváme ortogonální projekce prvku $v \in V$ na podprostor W .

Věta 1. Nechť V je vektorový prostor se skalárním součinem nad \mathbb{R} a $W \subset V$. Nechť $f \in V$. Potom $g \in W$ je nejlepší aproximace prvku f ve W , neboli platí $\|f - g\| \leq \|f - h\|$ pro všechna $h \in W$, právě když pro všechna $h \in W$ platí

$$(f - g, h) = 0.$$

Důkaz. Viz [8], str. 41-42. □

Důsledek 1. Nechť V je vektorový prostor se skalárním součinem nad \mathbb{R} a necht' $W \subset V$. Nechť $f \in V$. Potom nejlepší aproximací prvku f resp. nejbližším prvkem k prvku f je v podprostoru W takový prvek $g \in W$, který je ortogonální projekcí prvku $f \in V$ na podprostor W a platí $(f - g, w) = 0$ pro každý prvek $w \in W$.

Důkaz. Důkaz je zřejmý z předchozích definic a Věty 1. □

Kapitola 2

Teorie

2.1 Interpolační spliny

V této části se podíváme na minimalizující vlastnosti interpolačních splinů, které využijeme v teorii splinů zhlazujících.

Věta 2. *Prostor splinů stupně $m - 1$ (resp. řádu m) $S(P_{m-1}, \pi)$ je prostor s dimenzí*

$$\dim S(P_{m-1}, \pi) = m + N.$$

Prostor splinů lichého stupně $2n - 1$ (resp. řádu $2n$) $Sp_n(\pi)$ je prostor s dimenzí

$$\dim Sp_n(\pi) = 2n + N.$$

Důkaz. Z definice 2 vyplývá, že pro spline stupně $m - 1$ platí, že na každém intervalu (x_j, x_{j+1}) , $j = 0, \dots, N$ existuje nějaký polynom stupně nejvýše $m - 1$. To znamená, že na každém intervalu, kterých je dohromady $N + 1$, musíme určit m neznámých, což dohromady činí $(N + 1) \cdot m = Nm + m$ neznámých. Na druhou stranu víme, že v každém uzlu x_1, \dots, x_N je splněna podmínka rovnosti k -tých derivací pro $k = 0, \dots, m - 2$ a tyto rovnice jsou lineárně nezávislé. Celkem tedy máme $N \cdot (m - 1) = Nm - N$ požadavků. Tímto omezením dostáváme pouhých $(Nm + m) - (Nm - N) = m + N$ volně volitelných neznámých neboli dimenzi prostoru $S(P_{m-1}, \pi)$. Dimenzi prostoru $Sp_n(\pi)$ dostaneme záměnou stupně m za stupeň $2n$. \square

2.1.1 Interpolační spliny lichého stupně

Nyní se podívejme na interpolaci spliny lichého stupně. Dimenze prostoru $Sp_n(\pi)$ je tedy rovna $2n + N$ a $Sp_n(\pi)$ -interpolace zřejmě představuje N lineárně nezávislých rovnic. K jednoznačnosti interpolace je tedy potřeba přidat dalších $(2n + N) - (N) = 2n$ podmínek. Volba doplňujících podmínek se může lišit dle konkrétní aplikace splinu. U kubické interpolace, kdy $n = 2$, patří mezi nejběžnější doplňující informace a podmínky tyto:

- Jsou zadána data $f_0, f'_0, f_{N+1}, f'_{N+1}$ a je požadováno

$$s(a) = f_0, \quad s'(a) = f'_0, \quad s(b) = f_{N+1}, \quad s'(b) = f'_{N+1}.$$

Této interpolaci se říká interpolace I. typu.

- Jsou zadána data f_0 a f_{N+1} a je požadováno

$$s(a) = f_0, \quad s(b) = f_{N+1}, \quad s'(a) = s'(b), \quad s''(a) = s''(b).$$

Této interpolaci se říká interpolace III. typu.

- Interpoluje se přirozeným kubický splinem $s \in \mathcal{N}Sp_2(\pi)$, neboli je požadováno, aby

$$s''(a) = s''(x_1) = 0, \quad s''(x_N) = s''(b) = 0.$$

Následující lemma je potřebné k odvození minimalizující vlastnosti kubické interpolace. Pro zjednodušení zápisu si zavedme na Hilbertově prostoru $H^2(I)$ spojitou bilineární formu $M(\cdot, \cdot)$

$$M(f, g) = \int_I f''(x)g''(x) dx.$$

Lemma 3. *Nechť $\{x_j\}_{j=0}^{N+1}$ je rovnoměrné dělení intervalu $\langle a, b \rangle$. Nechť dále $f \in H^2(I)$ a $s \in Sp_2(\pi)$ interpoluje funkci f v bodech $x_i, i = 0, \dots, N + 1$. Pak*

$$M(f - s, f - s) = M(f, f) - M(s, s) - 2J(f, s),$$

kde

$$J(f, s) = (f'(b) - s'(b))s''(b) - (f'(a) - s'(a))s''(a).$$

Důkaz. Nejprve upravíme levou stranu rovnice:

$$\begin{aligned} M(f - s, f - s) &= \int_I ((f - s)''(x))^2 dx = \int_I (f''(x) - s''(x))^2 dx \\ &= \int_I (f''(x))^2 dx - 2 \int_I f''(x)s''(x) dx + \int_I (s''(x))^2 dx \\ &= \int_I (f''(x))^2 dx - 2 \int_I f''(x)s''(x) dx + \int_I (s''(x))^2 dx \\ &\quad - 2 \int_I (s''(x))^2 dx + 2 \int_I (s''(x))^2 dx \\ &= \int_I (f''(x))^2 dx - \int_I (s''(x))^2 dx - 2 \int_I (f''(x)s''(x)) - (s''(x))^2 dx \\ &= M(f, f) - M(s, s) - 2 \int_I (f''(x) - s''(x))s''(x) dx. \end{aligned}$$

Nyní zbývá upravit poslední člen. Jelikož funkce f je z prostoru $H^2(I)$, její derivace je na intervalu $\langle a, b \rangle$ spojitá. Taktéž funkce s má na tomto intervalu

spojité derivace do 2. řádu. K upravení výrazu tedy můžeme použít integrační metodu per partes:

$$\begin{aligned}
& \int_a^b (f''(x) - s''(x))s''(x) dx \\
&= [(f'(x) - s'(x))s''(x)]_a^b - \int_a^b (f'(x) - s'(x))s'''(x) dx \\
&= (f'(b) - s'(b))s''(b) - (f'(a) - s'(a))s''(a) - \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f'(x) - s'(x))s'''(x) dx \\
&= J(f,s) - \sum_{i=0}^N [(f(x) - s(x))s'''(x)]_{x_i}^{x_{i+1}} + \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f(x) - s(x))s^{(4)}(x) dx.
\end{aligned}$$

Jelikož funkce s interpoluje funkci f ve všech bodech x_i , $i = 0, \dots, N+1$, rozdíl funkčních hodnot funkce f a s je v těchto bodech nulový. Dále víme, že $s \in Sp_2(\pi)$, tudíž čtvrtá derivace této funkce je na intervalech $\langle x_i, x_{i+1} \rangle$, kde $i = 0, \dots, N$, taktéž rovna nule. Z toho vyplývá

$$\int_a^b (f''(x) - s''(x))s''(x) dx = J(f,s) - 0 + 0 = J(f,s).$$

□

Věta 4. *Nechť $f \in H^2(I)$ a $s \in Sp_2(\pi)$ interpoluje funkci f v uzlech $\pi = \{x_j\}_{j=0}^{N+1}$. Nechť je dále splněna jedna z následujících podmínek:*

- *Spline s je interpolací I. typu. Označme ho s_1 .*
- *Platí rovnost $f'(a) = f'(b)$ a spline s je interpolací III. typu. Označme ho s_2 .*
- *Spline s je přirozený kubický spline. Označme ho s_3 .*

Potom spliny s_1 , s_2 a s_3 splňují rovnost

$$M(f,f) = M(s,s) + M(f - s, f - s), \quad \text{kde } s = s_1, s_2, s_3,$$

a zároveň minimalizují funkcional $M(g,g)$, neboli platí

$$\inf_{g \in K_i} M(g,g) \geq M(s_i, s_i) \quad \text{pro } i = 1, 2, 3,$$

kde

$$\begin{aligned}
K_1 &\equiv \{g \in H^2(I) : g(x_i) = f(x_i) \text{ pro } i = 1, \dots, N+1, g'(a) = f'_0, g'(b) = f'_{N+1}\}, \\
K_2 &\equiv \{g \in H^2(I) : g(x_i) = f(x_i) \text{ pro } i = 1, \dots, N+1, g'(a) = g'(b), \\
&\quad g''(b) = g''(a)\}, \\
K_3 &\equiv \{g \in H^2(I) : g(x_i) = f(x_i) \text{ pro } i = 1, \dots, N+1, g''(a) = g''(b) = 0\}.
\end{aligned}$$

Spliny s_1, s_2, s_3 jsou navíc určeny jednoznačně, neboli platí

$$M(g,g) > M(s_i, s_i) \quad \text{pro } g \neq s_i, \quad g \in K_i, \quad i = 1, 2, 3.$$

Důkaz. Z lemmatu 3 víme, že platí

$$M(f - s, f - s) = M(f, f) - M(s, s) - 2J(f, s),$$

kde

$$J(f, s) = (f'(b) - s'(b))s''(b) - (f'(a) - s'(a))s''(a).$$

Pokud spline s je interpolací I. typu, potom jsou splněny rovnosti $f'(a) = s'(a)$ a $f'(b) = s'(b)$. Po dosazení do bilineární formy $J(f, s)$ dostáváme

$$\begin{aligned} J(f, s) &= (f'(b) - s'(b))s''(b) - (f'(a) - s'(a))s''(a) \\ &= (s'(b) - s'(b))s''(b) - (s'(a) - s'(a))s''(a) = 0 \cdot s''(b) - 0 \cdot s''(a) = 0. \end{aligned}$$

Pokud spline s je interpolací III. typu, potom jsou splněny rovnosti $s'(a) = s'(b)$ a $s''(a) = s''(b)$. Předpoklad věty 3 nám navíc říká, že platí $f'(a) = f'(b)$. Po dosazení do bilineární formy $J(f, s)$ dostáváme

$$\begin{aligned} J(f, s) &= (f'(b) - s'(b))s''(b) - (f'(a) - s'(a))s''(a) \\ &= (f'(b) - s'(b))s''(b) - (f'(b) - s'(b))s''(b) = 0 - 0 = 0. \end{aligned}$$

Pokud spline s je přirozený kubický spline, potom jsou splněny rovnosti $s''(a) = 0$ a $s''(b) = 0$. Po dosazení do bilineární formy $J(f, s)$ dostáváme

$$\begin{aligned} J(f, s) &= (f'(b) - s'(b))s''(b) - (f'(a) - s'(a))s''(a) \\ &= (s'(b) - s'(b)) \cdot 0 - (s'(a) - s'(a)) \cdot 0 = 0. \end{aligned}$$

Všechny uvedené typy splinů tedy splňují

$$\begin{aligned} M(f - s, f - s) &= M(f, f) - M(s, s) - 2J(f, s) = M(f, f) - M(s, s) \\ &\Rightarrow M(f, f) = M(s, s) + M(f - s, f - s). \end{aligned}$$

Nechť $g \in K_i$, potom opět $J(g, s_i) = 0$ pro $i = 1, 2, 3$. Navíc z předpisu bilineární formy $M(\cdot, \cdot)$ plyne, že hodnota $M(g - s_i, g - s_i)$ je nezáporná. Z toho vyplývá

$$M(g, g) = M(s_i, s_i) + M(g - s_i, g - s_i) \geq M(s_i, s_i).$$

Nyní zbývá dokázat jednoznačnost uvedených minimalizujících splinů. Předpokládejme, že pro nějakou funkci $u \in K_i$ platí $M(u, u) = M(s_i, s_i)$. Potom z tohoto předpokladu a z výše uvedené rovnosti vyplývá

$$\begin{aligned} 0 &= M(u, u) - M(s_i, s_i) = M(u - s_i, u - s_i) = \int_a^b ((u - s_i)''(x))^2 dx \\ &= \int_a^b (u''(x) - s_i''(x))^2 dx. \end{aligned}$$

Odtud plyne:

$$u''(x) = s_i''(x) \Rightarrow u'(x) = s_i'(x) + c \Rightarrow u(x) = s_i(x) + cx + d,$$

kde c a d jsou konstanty. Jelikož $s_i(x_j) = f(x_j) = u(x_j)$ pro $j = 0, \dots, N + 1$, konstanty c a d jsou rovny nuly. Potom tedy $u = s_i$. \square

2.1.2 Interpolační spliny sudého stupně

Nyní se podíváme na interpolaci spliny sudého stupně. Dimenze prostoru $S(P_{m-1}, \pi)$ je rovna $m + N$ a $S(P_{m-1}, \pi)$ -interpolace ve všech bodech dělení π zřejmě představuje $N + 2$ lineárně nezávislých rovnic. K jednoznačnosti interpolace je tedy potřeba přidat ještě dalších $(m + N) - (N + 2) = m - 2$ podmínek. U kvadratické interpolace, kdy $m = 3$, je tedy nutná jedna podmínka navíc. Obecně je ale vhodné volit doplňující podmínky tak, aby se vztahovaly k *oběma* krajním bodům. Například v případě vynechání posledního ukotvení by totiž mohlo dojít k nadměrné oscilaci podobné interpolaci Langrangeovým polynomem. Tento problém vyřešíme tím, že zavedeme body $t_i, i = 0, \dots, N$ tak, aby platilo

$$t_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} \text{ pro } i = 0, \dots, N,$$

a zadání původní úlohy $S(P_2, \pi)$ -interpolace přeměníme na nalezení takového splinu $s \in S(P_2, \pi)$, který

- buď interpoluje funkci f v interpolačních uzlech $t_i, i = 0, \dots, N$, tzn. bylo by splněno $f(t_i) = s(t_i)$,
- nebo splňuje rovnost

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x) dx = hf_i, \quad i = 0, \dots, N,$$

kde h je krok rovnoměrného dělení π a $f_i = f(t_i)$.

My budeme používat pouze druhou možnost neboli tak zvanou interpolaci dat středními integrálními hodnotami kvadratického splinu.

Po této úpravě původní úlohy potřebujeme k jednoznačnosti $S(P_2, \pi)$ -*interpolace* funkce f již dvě podmínky. Mezi nejběžnější doplňující podmínky patří tyto:

- přirozené okrajové podmínky: $s'(a) = 0, \quad s'(b) = 0$,
- $s(a) = f(a), \quad s(b) = f(b)$.

Následující lemma je potřebné k odvození minimalizující vlastnosti kvadratické interpolace pomocí středních integrálních hodnot. Nejdříve si však pro dané rovnoměrné dělení $\pi = \{x_j\}_{j=0}^{N+1}$, interpolační uzly $\{t_i\}_{i=0}^N$ a zadaná data $f_i, i = 0, \dots, N$ zdefinujeme množinu

$$V = \left\{ g \in H^1(I) : \int_{x_i}^{x_{i+1}} g(x) dx = hf_i, \quad i = 0, \dots, N \right\}.$$

Pro zjednodušení zápisu si ještě zavedeme na Hilbertově prostoru $H^1(I)$ spojitou bilineární formu $M(\cdot, \cdot)$

$$M(f, g) = \int_I f'(x)g'(x) dx.$$

Lemma 5. Necht' $g \in V$ a $s \in V \cap S(P_2, \pi)$. Pak

$$M(g - s, g - s) = M(g, g) - M(s, s) - 2J(g, s),$$

kde

$$J(g, s) = (g(b) - s(b))s'(b) - (g(a) - s(a))s'(a).$$

Důkaz. Nejprve upravíme levou stranu rovnice:

$$\begin{aligned} M(g - s, g - s) &= \int_I ((g - s)'(x))^2 dx = \int_I (g'(x) - s'(x))^2 dx \\ &= \int_I (g'(x))^2 dx - 2 \int_I g'(x)s'(x) dx + \int_I (s'(x))^2 dx \\ &= \int_I (g'(x))^2 dx - 2 \int_I g'(x)s'(x) dx + \int_I (s'(x))^2 dx \\ &\quad - 2 \int_I (s'(x))^2 dx + 2 \int_I (s'(x))^2 dx \\ &= \int_I (g'(x))^2 dx - \int_I (s'(x))^2 dx - 2 \int_I g'(x)s'(x) - (s'(x))^2 dx \\ &= \int_I (g'(x))^2 dx - \int_I (s'(x))^2 dx - 2 \int_I (g'(x) - s'(x))s'(x) dx \\ &= M(g, g) - M(s, s) - 2 \int_I (g'(x) - s'(x))s'(x) dx. \end{aligned}$$

Nyní zbývá upravit poslední člen. Jelikož funkce s má na intervalu $\langle a, b \rangle$ spojitě derivace do 1. řádu, můžeme k upravení výrazu použít integrační metodu per partes:

$$\begin{aligned} &\int_a^b (g'(x) - s'(x))s'(x) dx \\ &= [(g(x) - s(x))s'(x)]_a^b - \int_a^b (g(x) - s(x))s''(x) dx \\ &= (g(b) - s(b))s'(b) - (g(a) - s(a))s'(a) - \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} (g(x) - s(x))s''(x) dx \\ &= J(f, s) - \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} (g(x) - s(x))s''(x) dx. \end{aligned}$$

Jelikož funkce g i spline s splňují

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} g(x) dx = hf_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x) dx, \quad i = 0, \dots, N,$$

a taktéž protože s'' je na intervalech (x_i, x_{i+1}) pro $i = 0, \dots, N$ konstanta,

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (g(x) - s(x))s''(x) dx = 0, \quad i = 0, \dots, N.$$

Z toho vyplývá

$$\int_a^b (g'(x) - s'(x))s'(x) dx = J(g, s) - 0 = J(g, s).$$

□

Věta 6. Necht' $g \in V$, $s \in V \cap Sp_2(\pi)$, a $f(a), f(b), f_i, i = 0, \dots, N$ jsou zadaná data. Necht' je dále splněna jedna z následujících podmínek:

- Spline s splňuje přirozené okrajové podmínky $s'(a) = s'(b) = 0$. Označme ho s_1 .
- Spline s splňuje $s(a) = f(a)$ a $s(b) = f(b)$. Označme ho s_2 .

Potom spliny s_1 a s_2 minimalizují funkcionál $M(g, g)$, neboli platí

$$\inf_{g \in K_i} M(g, g) \geq M(s_i, s_i) \quad \text{pro } i = 1, 2,$$

kde

$$K_1 \equiv V \cap \{g \in H^1(I) : g'(a) = g'(b) = 0\},$$

$$K_2 \equiv V \cap \{g \in H^1(I) : g(a) = f(a), g(b) = f(b)\}.$$

Spliny s_1, s_2 jsou navíc určeny jednoznačně, neboli platí

$$M(g, g) > M(s_i, s_i) \quad \text{pro } g \neq s_i, \quad g \in K_i, \quad i = 1, 2.$$

Důkaz. Z lemmatu 3 víme, že pro $g \in V$ a $s \in V \cap S(P_2, \pi)$ platí

$$M(g - s, g - s) = M(g, g) - M(s, s) - 2J(g, s),$$

kde

$$J(g, s) = (g(b) - s(b))s'(b) - (g(a) - s(a))s'(a).$$

Pokud spline $s = s_1$, potom splňuje $s'(a) = s'(b) = 0$. Po jejich dosazení do bilineární formy $J(g, s)$ dostáváme

$$\begin{aligned} J(g, s) &= (g(b) - s(b))s'(b) - (g(a) - s(a))s'(a) \\ &= (g(b) - s(b)) \cdot 0 - (g(a) - s(a)) \cdot 0 = 0. \end{aligned}$$

Pokud spline $s = s_2$, potom splňuje $s(a) = f(a)$ a $s(b) = f(b)$. Pokud navíc $g \in K_2$, potom $g(a) = f(a)$ a $g(b) = f(b)$. Po dosazení do bilineární formy $J(g, s)$ dostáváme

$$\begin{aligned} J(g, s) &= (g(b) - s(b))s'(b) - (g(a) - s(a))s'(a) \\ &= (f(b) - f(b))s'(b) - (f(a) - f(a))s'(a) = 0 \cdot s'(b) - 0 \cdot s'(a) = 0. \end{aligned}$$

Oba uvedené typy splinů tedy splňují

$$\begin{aligned} M(g - s, g - s) &= M(g, g) - M(s, s) - 2J(g, s) = M(g, g) - M(s, s) \\ &\Rightarrow M(g, g) = M(s, s) + M(g - s, g - s). \end{aligned}$$

Dále z předpisu bilineární formy $M(g, s)$ plyne, že hodnota $M(g - s, g - s)$ je nezáporná. Z toho vyplývá

$$M(g, g) = M(s, s) + M(g - s, g - s) \geq M(s, s).$$

Nyní zbývá dokázat jednoznačnost uvedených minimalizujících splinů. Předpokládejme, že pro nějakou funkci $u \in K_i$ platí $M(u,u) = M(s_i,s_i)$. Potom z tohoto předpokladu a z výše uvedené rovnosti vyplývá

$$\begin{aligned} 0 &= M(u,u) - M(s_i,s_i) = M(u - s_i, u - s_i) = \int_a^b ((u - s_i)'(x))^2 dx \\ &= \int_a^b (u'(x) - s_i'(x))^2 dx. \end{aligned}$$

Odtud plyne:

$$u'(x) = s_i'(x) \Rightarrow u(x) = s_i(x) + c,$$

kde c je konstanta. Jelikož $\int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx = hf_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x) dx$ pro $i = 0, \dots, N$, konstanta c je rovna nule. Potom tedy $u = s_i$. □

2.2 Zhlazující spliny

Zhlazující spliny se od interpolačních splinů liší v tom, že nevyžadují striktní splnění interpolačních podmínek. V nově zavedené úloze přičteme k minimalizovanému funkcionálu rezidua v bodech interpolace s vhodně zvolenými váhami. K minimalizaci těchto reziduí využijeme metodu nejmenších čtverců.

Podobně jako v případě interpolačních splinů se budeme zabývat zvláště spliny lichého a zvláště sudého, konkrétně druhého stupně.

2.2.1 Zhlazující spliny lichého stupně

Nejdříve si zhlazující spline lichého stupně zadefinujeme a poté dokážeme jeho existenci a jednoznačnost. Důkaz provedeme pomocí ortogonální projekce ve vhodně zvoleném Hilbertově prostoru.

Definice 15. *Nechť $\{x_j\}_{j=0}^{N+1}$ je rovnoměrné dělení intervalu $I = \langle a, b \rangle$ a hodnoty $f_j = f(x_j)$, $j = 0, \dots, N+1$ jsou zadaná data. Zvolme váhy $\alpha = \{\alpha_i\}_{i=0}^{N+1}$, $\alpha_i > 0$, kde $i = 0, \dots, N+1$, a $m \in \mathbb{N}$. Na prostoru funkcí $H^m(I)$ zadefinujeme funkcionál F_α předpisem*

$$F_\alpha(u) = \int_a^b |u^m(x)|^2 dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j (u_j - f_j)^2.$$

Nechť funkce $s \in H^m(I)$ splňuje

$$F_\alpha(s) = \inf_{u \in H^m(I)} F_\alpha(u).$$

Potom se funkce s nazývá zhlazující spline.

Pozn.: První část funkcionálu $F_\alpha(u)$ je rovna bilineární formě $M(u,u)$, která je minimalizována spliny na jistých množinách funkcí splňující interpolační podmínky, viz podkapitola 2.1.1. V případě zhlazujících splinů však budeme bilineární formu $M(u,u)$ minimalizovat pomocí přidaného členu, který představuje splnění

interpolačních podmínek při daných vahách α_j . Pokud spline u data f_j interpoluje, je tento člen nulový. Funkcionál $F_\alpha(u)$ tedy při minimalizaci vyhodnocuje dohromady "energií" interpolačního splinu a míru splnění interpolačních podmínek, jejichž hodnoty jdou navzájem proti sobě.

Nyní dokážeme, že zhlazující spline lichého stupně s existuje a to právě jeden. Nejdříve ukážeme, že funkcionál $F_\alpha(u)$ má minimalizaci na prostoru $Sp_m(\pi)$, a poté i na prostoru $H^m(I)$. Zároveň odvodíme vztahy, kterými je spline s jednoznačně určen a které využijeme pro sestavení jeho konstrukce. Základním nástrojem při těchto zmíněných úkonech budou ortogonální projekce ve vhodně zvoleném Hilbertově prostoru.

Lemma 7. *Nechť $f = \{f_j\}_{j=0}^{N+1}$ jsou zadaná data a $N \geq m - 2$. Zvolme váhy $\alpha = \{\alpha_i\}_{i=0}^{N+1}$, $\alpha_i > 0$ pro $i = 0, \dots, N + 1$. Pak existuje jediný spline $s \in Sp_m(\pi)$ takový, že platí*

$$F_\alpha(s) = \inf_{u \in Sp_m(\pi)} F_\alpha(u).$$

Navíc pro každé $u \in Sp_m(\pi)$ je

$$\int_a^b u^{(m)}(x)s^{(m)}(x) dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j u_j (s_j - f_j) = 0,$$

$$F_\alpha(u) = F_\alpha(s) + \int_a^b (u^{(m)}(x) - s^{(m)}(x))^2 dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j (u_j - s_j)^2.$$

Důkaz. Sestrojíme Hilbertovy prostory X, Y, Z, H :

$$X := Sp_m(\pi), \quad (u, v)_X = \int_a^b u(x)v(x) dx + \int_a^b u^{(m)}(x)v^{(m)}(x) dx, \quad u, v \in X,$$

$$Y := L^2(I), \quad (y, z)_Y = \int_a^b y(x)z(x) dx, \quad y, z \in Y,$$

$$Z := \{z = \{z_i\}_{i=0}^{N+1}\}, \quad (z, w)_Z = \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i z_i w_i, \quad z = \{z_i\}_{i=0}^{N+1}, w = \{w_i\}_{i=0}^{N+1},$$

$$H := Y \times Z, \quad (U, V)_H = (u, v)_Y + (z, r)_Z, \quad U = \{u, z\}, V = \{v, r\}, u, v \in Y, z, r \in Z.$$

Dále sestrojíme lineární operátory $T : X \rightarrow Y$, $A : X \rightarrow Z$, $L : X \rightarrow H$:

$$Tu := u^{(m)}, \quad Au := \{u_i\}_{i=0}^{N+1}, u_i = u(x_i), \quad Lu := \{Tu, Au\} \in H, \quad u \in X.$$

Dimenze Hilbertových prostorů X a Z jsou konečné, takže operátor A je omezený. Hilbertův prostor $L^2(I)$ a tedy i prostor Y sice nemají konečnou dimenzi, ale operátor T zobrazuje pouze do malého oboru hodnot $\mathcal{R}(T)$, tudíž tento operátor je také omezený. A protože jsou operátory T a A omezené, omezený je taktéž operátor L . Operátory T, A, L jsou tudíž spojité. Tato vlastnost je důležitá pro možnost využití ortogonální projekce.

Položme $\mathcal{F} = \{\emptyset, f\} \in H$, kde \emptyset je nulový prvek v prostoru Y . Pak pro $u \in X$ je

$$\begin{aligned} \|Lu - \mathcal{F}\|_H^2 &= (Lu - \mathcal{F}, Lu - \mathcal{F})_H = (\{Tu, Au\} - \{\emptyset, f\}, \{Tu, Au\} - \{\emptyset, f\})_H \\ &= (\{Tu, Au - f\}, \{Tu, Au - f\})_H = (Tu, Tu)_Y + (Au - f, Au - f)_Z \\ &= \int_a^b Tu(x)Tu(x) dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (Au - f)_i (Au - f)_i \\ &= \int_a^b (u^{(m)}(x))^2 dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (u_i - f_i)^2 = F_\alpha(u). \end{aligned}$$

Odtud plyne

$$\inf_{u \in X} F_\alpha(u) = \inf_{u \in X} \|Lu - \mathcal{F}\|_H^2 = \rho_H^2(\mathcal{F}, \mathcal{R}(L)),$$

kde $\rho_H(\mathcal{F}, \mathcal{R}(L))$ je vzdálenost prvku \mathcal{F} od oboru hodnot $\mathcal{R}(L)$ operátoru L .

Jelikož obor hodnot $\mathcal{R}(L)$ je konečně rozměrný a tudíž i uzavřený, z teorie Hilbertových prostorů plyne, že existuje jediný prvek $S \in \mathcal{R}(L)$, který splňuje

$$\rho_H(\mathcal{F}, \mathcal{R}(L)) = \inf_{u \in X} \|Lu - \mathcal{F}\|_H = \|S - \mathcal{F}\|_H.$$

Na základě první kapitoly víme, že se jedná o ortogonální projekci prvku \mathcal{F} na obor hodnot $\mathcal{R}(L)$.

Nyní dokážeme, že existuje takový prvek s , který minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$. Protože $S \in \mathcal{R}(L)$, existuje takové $s \in X$, že $Ls = S$. Potom

$$\inf_{u \in X} F_\alpha(u) = \rho_H^2(\mathcal{F}, \mathcal{R}(L)) = \|S - \mathcal{F}\|_H^2 = \|Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(s),$$

čímž je existence dokázána.

Nyní dokážeme jednoznačnost tohoto prvku. Předpokládejme, že existuje $v \in X$ tak, že $Lv = S$. Potom

$$\{T(v - s), A(v - s)\} = L(v - s) = L(v) - L(s) = S - S = 0,$$

a proto

$$T(v - s) = 0 = A(v - s).$$

Z toho dále vyplývá

$$\begin{aligned} 0 &= A(v - s) = Av - As = \{v_i\}_{i=1}^{N+1} - \{s_i\}_{i=1}^{N+1} \\ &\Rightarrow \{v_i\}_{i=1}^{N+1} = \{s_i\}_{i=1}^{N+1} \Rightarrow v_i = s_i \quad \text{pro } i = 0, \dots, N+1 \end{aligned}$$

a

$$Tu = u^{(m)} \Rightarrow T(v - s) = (v - s)^{(m)} = 0.$$

Z poslední rovnosti plyne, že $(v - s)$ je polynomem stupně nejvýše $m - 1$. K přesnému určení polynomu $(v - s)$ je tedy třeba určit m neznámých při daných $N + 2$ podmínkách a dimenze tohoto prostoru je potom $m - (N + 2)$. Jelikož však v tomto

lemmatu předpokládáme $N \geq m - 2$, dimenze je rovna nule a dostáváme $v \equiv s$. Tím je dokázána jednoznačnost.

Zbývá dokázat platnost druhé části lemmatu. Jelikož prvek S je ortogonální projekcí prvku \mathcal{F} na obor hodnot $\mathcal{R}(L)$ operátoru L , potom pro každé $u \in X$ platí

$$(S - \mathcal{F}, Lu)_H = 0.$$

Tuto rovnost dále rozvineme

$$\begin{aligned} 0 &= (S - \mathcal{F}, Lu)_H = (Ls - \mathcal{F}, Lu)_H = (\{Ts, As\} - \{\emptyset, f\}, \{Tu, Au\})_H \\ &= (\{Ts, As - f\}, \{Tu, Au\})_H = (Ts, Tu)_Y + (As - f, Au)_Z \\ &= \int_a^b Ts(x)Tu(x) dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (As - f)_i (Au)_i \\ &= \int_a^b (s^m(x)u^m(x))^2 dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (s_i - f_i)(u_i). \end{aligned}$$

Tím jsme dokázali první rovnost.

Dále platí

$$\begin{aligned} \|Lu + (S - \mathcal{F})\|_H^2 &= (Lu + (S - \mathcal{F}), Lu + (S - \mathcal{F}))_H \\ &= (Lu, Lu + (S - \mathcal{F}))_H + (S - \mathcal{F}, Lu + (S - \mathcal{F}))_H \\ &= (Lu, Lu)_H + (Lu, S - \mathcal{F})_H + (S - \mathcal{F}, Lu)_H + (S - \mathcal{F}, S - \mathcal{F})_H \\ &= \|Lu\|_H^2 + 0 + 0 + \|S - \mathcal{F}\|_H^2, \end{aligned}$$

kde

$$\|Lu + (S - \mathcal{F})\|_H^2 = \|Lu + Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = \|L(u + s) - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(u + s),$$

$$\|S - \mathcal{F}\|_H^2 = \|Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(s),$$

$$\begin{aligned} \|Lu\|_H^2 &= (Lu, Lu)_H = (\{Tu, Au\}, \{Tu, Au\})_H = (Tu, Tu)_Y + (Au, Au)_Z \\ &= \int_a^b Tu(x)Tu(x) dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (Au)_i (Au)_i = \int_a^b (u^m(x))^2 dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (u_i)^2. \end{aligned}$$

Po dosazení dostáváme

$$F_\alpha(u + s) = \int_a^b (u^m(x))^2 dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (u_i)^2 + F_\alpha(s).$$

Následným přeznačením $u + s$ na u získáváme poslední část lemmatu. □

V následujícím lemmatu dokážeme, že prvek $s \in Sp_m(\pi)$, o kterém víme, že existuje a je jednoznačný, a který minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $Sp_m(\pi)$, minimalizuje tento funkcionál $F_\alpha(u)$ zároveň i na prostoru $H^{(m)}(I)$.

Lemma 8. *Nechť jsou splněny předpoklady Lemmatu 7 a $s \in Sp_m(\pi)$. Potom spline s minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $Sp_m(\pi)$ právě tehdy, když platí*

1. $s^{(2m-1-j)}(a) = s^{(2m-1-j)}(b) = 0$ pro $j = 1, \dots, m-1$,
2. $(-1)^m \left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right) + \alpha_i (s_i - f_i) = 0$ pro $i = 0, \dots, N+1$,

kde $s_{(N+1)+}^{(2m-1)} = s_{0-}^{(2m-1)} = 0$. Jestliže spline $s \in Sp_m(\pi)$ minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $Sp_m(\pi)$, pak jej minimalizuje i na prostoru $H^m(I)$ a pro každé $y \in H^m(I)$ platí

$$F_\alpha(y) = F_\alpha(s) + \int_a^b (y^{(m)}(x) - s^{(m)}(x))^2 dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j (y(x_j) - s_j)^2.$$

Důkaz. Nechť $s \in Sp_m(\pi)$ minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $Sp_m(\pi)$. Pak dle Lemmatu 7 platí

$$0 = \int_a^b u^{(m)}(x) s^{(m)}(x) dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j u_j (s_j - f_j),$$

přičemž

$$\begin{aligned} \int_a^b u^{(m)}(x) s^{(m)}(x) dx &= [u^{(m-1)}(x) s^{(m)}(x)]_a^b - \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} u^{(m-1)}(x) s^{(m+1)}(x) dx \\ &= [u^{(m-1)}(x) s^{(m)}(x)]_a^b - [u^{(m-2)}(x) s^{(m+1)}(x)]_a^b + \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} u^{(m-2)}(x) s^{(m+2)}(x) dx \\ &= \dots = \left[\sum_{j=1}^{m-1} (-1)^{m-j-1} u^{(j)}(x) s^{(2m-j-1)}(x) \right]_a^b + \sum_{i=0}^{N+1} (-1)^m u_i \left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right), \end{aligned}$$

kde jsou pro zjednodušení zápisu dodefinovány hodnoty derivace splinu s v koncových bodech intervalu I tímto způsobem: $s_{(N+1)+}^{2m-1} = s_{0-}^{2m-1} = 0$.

Pokud například zvolíme spline u tak, aby pro $j \in \{1, \dots, m-1\}$ bylo splněno

$$u_i = 0 \quad \text{pro } i = 0, \dots, N+1$$

a zároveň

$$u^{(k)}(b) = 0, \quad u^{(k)}(a) = \begin{cases} 1 & j = k \\ 0 & j \neq k \end{cases} \quad \text{pro } k = 1, \dots, m-1,$$

potom

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\sum_{i=1}^{m-1} (-1)^{m-i-1} u^{(i)}(x) s^{(2m-i-1)}(x) \right]_a^b + \sum_{i=0}^{N+1} (-1)^m u_i \left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right) \\ &\quad + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i u_i (s_i - f_i) \\ &= 0 - (-1)^{m-j-1} \cdot 1 \cdot s^{(2m-j-1)}(a) + 0 + 0, \end{aligned}$$

tudíž

$$s^{(2m-j-1)}(a) = 0.$$

Pokud bychom spline u zvolili tak, aby pro $j \in \{1, \dots, m-1\}$ bylo splněno

$$u_i = 0 \quad \text{pro } i = 0, \dots, N+1$$

a zároveň

$$u^{(k)}(a) = 0, \quad u^{(k)}(b) = \begin{cases} 1 & j = k \\ 0 & j \neq k \end{cases} \quad \text{pro } k = 1, \dots, m-1,$$

potom

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\sum_{i=1}^{m-1} (-1)^{m-i-1} u^{(i)}(x) s^{(2m-i-1)}(x) \right]_a^b + \sum_{i=0}^{N+1} (-1)^m u_i \left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right) \\ &\quad + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i u_i (s_i - f_i) \\ &= (-1)^{m-j-1} \cdot 1 \cdot s^{(2m-j-1)}(b) - 0 + 0 + 0, \end{aligned}$$

tudíž

$$s^{(2m-j-1)}(b) = 0.$$

Pokud bychom spline u zvolili tak, aby pro $i \in \{0, \dots, N+1\}$ bylo splněno

$$u_j = \begin{cases} 1 & j = i \\ 0 & j \neq i \end{cases} \quad \text{pro } j = 1, \dots, m-1$$

a zároveň

$$u^{(j)}(a) = 0, \quad u^{(j)}(b) = 0 \quad \text{pro } j = 1, \dots, m-1,$$

potom

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\sum_{j=1}^{m-1} (-1)^{m-j-1} u^{(j)}(x) s^{(2m-j-1)}(x) \right]_a^b + \sum_{j=0}^{N+1} (-1)^m u_j \left(s_{j+}^{(2m-1)} - s_{j-}^{(2m-1)} \right) \\ &\quad + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j u_j (s_j - f_j) \\ &= 0 - 0 + (-1)^m \cdot 1 \cdot \left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right) + \alpha_j \cdot 1 \cdot (s_i - f_i), \end{aligned}$$

tudíž

$$\left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right) + \alpha_i (s_i - f_i) = 0.$$

Při vhodně zvolených splinech lze tedy zřejmě dosáhnout jednotlivých formulí.

Nyní ověříme opačnou implikaci. Nechť spline $s \in Sp_m(\pi)$ splňuje uvedené formule. Potom

$$\begin{aligned}
& \int_a^b u^{(m)}(x)s^{(m)}(x) dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j u_j(s_j - f_j) \\
&= \left[\sum_{j=1}^{m-1} (-1)^{m-j-1} u^{(j)}(x) s^{(2m-j-1)}(x) \right]_a^b + \sum_{i=0}^{N+1} (-1)^m u_i \left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right) \\
&\quad + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j u_j(s_j - f_j) \\
&= 0 + 0 + 0 = 0,
\end{aligned}$$

kde

$$\int_a^b u^{(m)}(x)s^{(m)}(x) dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j u_j(s_j - f_j) = (S - \mathcal{F}, Lu)_H = (Ls - \mathcal{F}, Lu)_H.$$

Tudíž se jedná o ortogonální projekci prvku F na obor hodnot $\mathcal{R}(L)$ operátoru L a spline s tedy minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $Sp_m(\pi)$.

Zbývá dokázat platnost i pro minimalizaci funkcionálu $F_\alpha(y)$ na prostoru $H^m(I)$. Nechť $y \in H^m(I)$ a předpokládejme, že spline $s \in Sp_m(\pi)$ minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $Sp_m(\pi)$. Pak již víme, že splňuje uvedené formule. Potom

$$\begin{aligned}
& \int_a^b y^{(m)}(x)s^{(m)}(x) dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j y_j(s_j - f_j) \\
&= \left[\sum_{j=1}^{m-1} (-1)^{m-j-1} y^{(j)}(x) s^{(2m-j-1)}(x) \right]_a^b + \sum_{i=0}^{N+1} (-1)^m y_i \left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right) \\
&\quad + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j y_j(s_j - f_j) \\
&= 0 + 0 + 0 = 0,
\end{aligned}$$

kde

$$\int_a^b y^{(m)}(x)s^{(m)}(x) dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j y_j(s_j - f_j) = (S - \mathcal{F}, Ly)_H = (Ls - \mathcal{F}, Ly)_H.$$

Tudíž se jedná o ortogonální projekci prvku F na obor hodnot $\mathcal{R}(L)$ operátoru L a spline s tedy minimalizuje funkcionál $F_\alpha(y)$ na prostoru $H^m(I)$.

Dále platí

$$\begin{aligned}
\|Ly + (S - \mathcal{F})\|_H^2 &= (Ly + (S - \mathcal{F}), Ly + (S - \mathcal{F}))_H \\
&= (Ly, Ly + (S - \mathcal{F}))_H + (S - \mathcal{F}, Ly + (S - \mathcal{F}))_H \\
&= (Ly, Ly)_H + (Ly, S - \mathcal{F})_H + (S - \mathcal{F}, Ly)_H + (S - \mathcal{F}, S - \mathcal{F})_H \\
&= \|Ly\|_H^2 + 0 + 0 + \|S - \mathcal{F}\|_H^2,
\end{aligned}$$

kde

$$\|Ly + (S - \mathcal{F})\|_H^2 = \|Ly + Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = \|L(y + s) - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(y + s),$$

$$\|S - \mathcal{F}\|_H^2 = \|Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(s),$$

$$\begin{aligned} \|Ly\|_H^2 &= (Ly, Ly)_H = (\{Ty, Ay\}, \{Ty, Ay\})_H = (Ty, Ty)_Y + (Ay, Ay)_Z \\ &= \int_a^b Ty(x)Tu(x) dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (Ay)_i (Ay)_i = \int_a^b (y^m(x))^2 dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (y_i)^2. \end{aligned}$$

Po dosazení dostáváme

$$F_\alpha(y + s) = \int_a^b (y^m(x))^2 dx + \sum_{i=0}^{N+1} \alpha_i (y_i)^2 + F_\alpha(s).$$

Následným přeznačením $y + s$ na y získáváme poslední část lemmatu. □

Nyní pro přehlednost shrneme předchozí dvě lemmata do jedné věty.

Věta 9. *Nechť π je rovnoměrné dělení na intervalu $I = \langle a, b \rangle$, $f = \{f_j\}_{j=0}^{N+1}$ jsou zadaná data a $N \geq m - 2$, kde $m \in \mathbb{N}$. Zvolme váhy $\alpha = \{\alpha_i\}_{i=0}^{N+1}$, $\alpha_i > 0$ pro $i = 0, \dots, N + 1$. Definujme funkcionál F_α předpisem*

$$F_\alpha(u) = \int_a^b |u^m(x)|^2 dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j (u(x_j) - f_j)^2, \quad u \in H^m(I).$$

Pak existuje jediný zhlazující spline $s \in H^m(I)$, neboli platí

$$F_\alpha(s) = \inf_{u \in H^m(I)} F_\alpha(u).$$

Tato funkce s je splinem stupně $2m - 1$ a je jednoznačně určena podmínkami

1. $s^{(2m-1-j)}(a) = s^{(2m-1-j)}(b) = 0$ pro $j = 1, \dots, m - 1$,
 2. $(-1)^m \left(s_{i+}^{(2m-1)} - s_{i-}^{(2m-1)} \right) + \alpha_i (s_i - f_i) = 0$ pro $i = 0, \dots, N + 1$,
- kde $s_{(N+1)+}^{(2m-1)} = s_{0-}^{(2m-1)} = 0$.

Navíc pro každé $u \in H^m(I)$ je

$$F_\alpha(u) = F_\alpha(s) + \int_a^b |u^{(m)}(x) - s^{(m)}(x)|^2 dx + \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_j (u(x_j) - s_j)^2.$$

Důkaz. Důkaz vyplývá z Lemmat 7 a 8. □

2.2.2 Zhlazující kvadratické spliny

V případě kvadratických splinů budeme zhlazovat data pomocí středních integrálních hodnot. Tomu uzpůsobíme definici zhlazujícího splinu.

Definice 16. *Nechť π je rovnoměrné dělení intervalu $I = \langle a, b \rangle$ s krokem h a hodnoty $f_j = f(t_j)$, $j = 0, \dots, N$, kde $t_j = \frac{x_j + x_{j+1}}{2}$, jsou zadaná data. Zvolme váhy $\alpha = \{\alpha_i\}_{i=0}^N$, $\alpha_i > 0$, kde $i = 0, \dots, N$, a $m \in \mathbb{N}$. Na prostoru funkcí $H^1(I)$ zadefinujeme funkcionál F_α předpisem*

$$F_\alpha(u) = \int_a^b |u'(x)|^2 dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j (\tilde{u}_j - f_j)^2$$

kde

$$\tilde{u}_j = \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx, \quad i = 0, \dots, N.$$

Nechť funkce $s \in H^1(I)$ splňuje

$$F_\alpha(s) = \inf_{u \in H^1(I)} F_\alpha(u).$$

Potom se funkce s nazývá spline zhlazující střední integrální hodnoty.

Pro jednoduchost však budeme užívat kratší pojem *zhlazující spline*.

Pozn.: Podobně jako u zhlazujících splinů lichého stupně je i u zhlazujících kvadratických splinů funkcionál $F_\alpha(u)$ tvořen bilineární formou $M(u, u)$, tentokrát je však míněna ta z podkapitoly 2.1.2, a přidaným členem představujícím splnění interpolačních podmínek při daných vahách α_j a navíc i při daném h . Opět jsou vyhodnocovány dohromady oba členy, jejichž hodnoty jdou navzájem proti sobě.

Nyní dokážeme, že zhlazující kvadratický spline s existuje a to právě jeden. Nejdříve ukážeme, že funkcionál $F_\alpha(u)$ má minimalizaci na prostoru $S(P_2, \pi)$, a poté i na prostoru $H^1(I)$. Zároveň odvodíme vztahy, kterými je spline s jednoznačně určen a které využijeme pro sestavení jeho konstrukce. Základním nástrojem při těchto zmíněných úkonech budou ortogonální projekce ve vhodně zvoleném Hilbertově prostoru.

Lemma 10. *Nechť π je rovnoměrné dělení intervalu $I = \langle a, b \rangle$ s krokem h a hodnoty $f_j = f(t_j)$, $j = 0, \dots, N$, kde $t_j = \frac{x_j + x_{j+1}}{2}$, jsou zadaná data. Zvolme váhy $\alpha = \{\alpha_i\}_{i=0}^N$, $\alpha_i > 0$ pro $i = 0, \dots, N$. Pak existuje jediný spline $s \in S(P_2, \pi)$ takový, že platí*

$$F_\alpha(s) = \inf_{u \in S(P_2, \pi)} F_\alpha(u).$$

Navíc pro každé $u \in S(P_2, \pi)$ je

$$\int_a^b u'(x)s'(x) dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{u}_j (\tilde{s}_j - f_j) = 0,$$

$$F_\alpha(u) = F_\alpha(s) + \int_a^b (u'(x) - s'(x))^2 dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j (\tilde{u}_j - \tilde{s}_j)^2.$$

Důkaz. Sestrojíme Hilbertovy prostory X, Y, Z, H :

$$X := S(P_2, \pi), \quad (u, v)_X = \int_a^b u(x)v(x) dx + \int_a^b u'(x)v'(x) dx, \quad u, v \in X,$$

$$Y := L^2(I), \quad (y, z)_Y = \int_a^b y(x)z(x) dx, \quad y, z \in Y,$$

$$Z := \{z = \{z_i\}_{i=0}^N\}, \quad (z, w)_Z = \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i z_i w_i, \quad z = \{z_i\}_{i=0}^N, w = \{w_i\}_{i=0}^N,$$

$$H := Y \times Z, \quad (U, V)_H = (u, v)_Y + (z, r)_Z, \quad U = \{u, z\}, V = \{v, r\}, u, v \in Y, z, r \in Z.$$

Dále sestrojíme lineární operátory $T : X \rightarrow Y$, $A : X \rightarrow Z$, $L : X \rightarrow H$:

$$Tu := u', \quad Au := \{\tilde{u}_i\}_{i=0}^N, \quad Lu := \{Tu, Au\} \in H, \quad u \in X.$$

Dimenze Hilbertových prostorů X a Z jsou konečné, takže operátor A je omezený. Hilbertův prostor $L^2(I)$ a tedy i prostor Y sice nemají konečnou dimenzi, ale operátor T zobrazuje pouze do malého oboru hodnot $\mathcal{R}(T)$, tudíž tento operátor je také omezený. A protože jsou operátory T a A omezené, omezený je taktéž operátor L . Operátory T, A, L jsou tudíž spojité. Tato vlastnost je důležitá pro možnost využití ortogonální projekce.

Položme $\mathcal{F} = \{\emptyset, f\} \in H$, kde \emptyset je nulový prvek v prostoru Y . Pak pro $u \in X$ je

$$\begin{aligned} \|Lu - \mathcal{F}\|_H^2 &= (Lu - \mathcal{F}, Lu - \mathcal{F})_H = (\{Tu, Au\} - \{\emptyset, f\}, \{Tu, Au\} - \{\emptyset, f\})_H \\ &= (\{Tu, Au - f\}, \{Tu, Au - f\})_H = (Tu, Tu)_Y + (Au - f, Au - f)_Z \\ &= \int_a^b Tu(x)Tu(x) dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (Au - f)_i (Au - f)_i \\ &= \int_a^b (u'(x))^2 dx + \sum_{i=0}^{N+} h^2 \alpha_i (\tilde{u}_i - f_i)^2 = F_\alpha(u). \end{aligned}$$

Odtud plyne

$$\inf_{u \in X} F_\alpha(u) = \inf_{u \in X} \|Lu - \mathcal{F}\|_H^2 = \rho_H^2(\mathcal{F}, \mathcal{R}(L)),$$

kde $\rho_H(\mathcal{F}, \mathcal{R}(L))$ je vzdálenost prvku \mathcal{F} od oboru hodnot $\mathcal{R}(L)$ operátoru L .

Jelikož obor hodnot $\mathcal{R}(L)$ je konečně rozměrný a tudíž i uzavřený, z teorie Hilbertových prostorů plyne, že existuje jediný prvek $S \in \mathcal{R}(L)$, který splňuje

$$\rho_H(\mathcal{F}, \mathcal{R}(L)) = \inf_{u \in X} \|Lu - \mathcal{F}\|_H = \|S - \mathcal{F}\|_H.$$

Na základě první kapitoly víme, že se jedná o ortogonální projekci prvku \mathcal{F} na obor hodnot $\mathcal{R}(L)$.

Nyní dokážeme, že existuje takový prvek s , který minimalizuje funkcional $F_\alpha(u)$. Protože $S \in \mathcal{R}(L)$, existuje takové $s \in X$, že $Ls = S$. Potom

$$\inf_{u \in X} F_\alpha(u) = \rho_H^2(\mathcal{F}, \mathcal{R}(L)) = \|S - \mathcal{F}\|_H^2 = \|Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(s),$$

čímž je existence dokázána.

Nyní dokážeme jednoznačnost tohoto prvku. Předpokládejme, že existuje $v \in X$ tak, že $Lv = S$. Potom

$$\{T(v-s), A(v-s)\} = L(v-s) = L(v) - L(s) = S - S = 0,$$

a proto

$$T(v-s) = 0 = A(v-s).$$

Z toho dále vyplývá

$$\begin{aligned} 0 &= A(v-s) = Av - As = \{\tilde{v}_i\}_{i=1}^N - \{\tilde{s}_i\}_{i=1}^N \\ &\Rightarrow \{\tilde{v}_i\}_{i=1}^N = \{\tilde{s}_i\}_{i=1}^N \quad \Rightarrow \quad \tilde{v}_i = \tilde{s}_i \quad \text{pro } i = 0, \dots, N \end{aligned}$$

a

$$Tu = u' \Rightarrow T(v-s) = (v-s)' = 0.$$

Z poslední rovnosti plyne, že $(v-s)$ je konstanta. K přesnému určení polynomu $(v-s)$ je tedy třeba určit jednu neznámou při daných $N+1$ podmínkách, dimenze tohoto prostoru je tedy rovna nule a dostáváme $v \equiv s$. Tím je dokázána jednoznačnost.

Zbývá dokázat platnost druhé části lemmatu. Jelikož prvek S je ortogonální projekcí prvku \mathcal{F} na obor hodnot $\mathcal{R}(L)$ operátoru L , potom pro každé $u \in X$ platí

$$(S - \mathcal{F}, Lu)_H = 0.$$

Tuto rovnost dále rozvineme

$$\begin{aligned} 0 &= (S - \mathcal{F}, Lu)_H = (Ls - \mathcal{F}, Lu)_H = (\{Ts, As\} - \{\emptyset, f\}, \{Tu, Au\})_H \\ &= (\{Ts, As - f\}, \{Tu, Au\})_H = (Ts, Tu)_Y + (As - f, Au)_Z \\ &= \int_a^b Ts(x)Tu(x) dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (As - f)_i (Au)_i \\ &= \int_a^b (s'(x)u'(x))^2 dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (\tilde{s}_i - f_i)(\tilde{u}_i). \end{aligned}$$

Tím jsme dokázali první rovnost.

Dále platí

$$\begin{aligned} \|Lu + (S - \mathcal{F})\|_H^2 &= (Lu + (S - \mathcal{F}), Lu + (S - \mathcal{F}))_H \\ &= (Lu, Lu + (S - \mathcal{F}))_H + (S - \mathcal{F}, Lu + (S - \mathcal{F}))_H \\ &= (Lu, Lu)_H + (Lu, S - \mathcal{F})_H + (S - \mathcal{F}, Lu)_H + (S - \mathcal{F}, S - \mathcal{F})_H \\ &= \|Lu\|_H^2 + 0 + 0 + \|S - \mathcal{F}\|_H^2, \end{aligned}$$

kde

$$\|Lu + (S - \mathcal{F})\|_H^2 = \|Lu + Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = \|L(u+s) - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(u+s),$$

$$\|S - \mathcal{F}\|_H^2 = \|Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(s),$$

$$\begin{aligned} \|Lu\|_H^2 &= (Lu, Lu)_H = (\{Tu, Au\}, \{Tu, Au\})_H = (Tu, Tu)_Y + (Au, Au)_Z \\ &= \int_a^b Tu(x)Tu(x) dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (Au)_i (Au)_i = \int_a^b (u'(x))^2 dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (\tilde{u}_i)^2. \end{aligned}$$

Po dosazení dostáváme

$$F_\alpha(u + s) = \int_a^b (u'(x))^2 dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (\tilde{u}_i)^2 + F_\alpha(s).$$

Následným přeznačením $u + s$ na u získáváme poslední část lemmatu. \square

V následujícím lemmatu dokážeme, že prvek $s \in S(P_2, \pi)$, o kterém víme, že existuje a je jednoznačný, a který minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $S(P_2, \pi)$, minimalizuje tento funkcionál $F_\alpha(u)$ zároveň i na prostoru $H^1(I)$.

Lemma 11. *Nechť jsou splněny předpoklady Lemmatu 10 a $s \in S(P_2, \pi)$. Potom spline s minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $S(P_2, \pi)$ právě tehdy, když platí*

1. $s'(a) = s'(b) = 0$,
2. $\alpha_i h (\tilde{s}_i - f_i) - s''_{i+} = 0$ pro $i = 0, \dots, N$.

Jestliže spline $s \in S(P_2, \pi)$ minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $S(P_2, \pi)$, pak jej minimalizuje i na prostoru $H^1(I)$ a pro každé $y \in H^1(I)$ platí

$$F_\alpha(y) = F_\alpha(s) + \int_a^b (y'(x) - s'(x))^2 dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j (\tilde{y}(x_j) - \tilde{s}_j)^2.$$

Důkaz. Nechť $s \in S(P_2, \pi)$ minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $S(P_2, \pi)$. Pak dle Lemmatu 10 platí

$$0 = \int_a^b u'(x)s'(x) dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{u}_j (\tilde{s}_j - f_j),$$

přičemž

$$\int_a^b u'(x)s'(x) dx = [u(x)s'(x)]_a^b - \sum_{i=0}^N h \tilde{u}_i \tilde{s}''_{i+} dx.$$

Pokud například zvolíme spline u tak, aby pro $i \in \{0, \dots, N\}$ bylo splněno

$$u(a) = 0, \quad u(b) = 0, \quad \text{a} \quad \tilde{u}_j = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad \text{pro} \quad j = 0, \dots, N,$$

potom

$$\begin{aligned} 0 &= [u(x)s'(x)]_a^b - \sum_{j=0}^N h \tilde{u}_j \tilde{s}''_{j+} + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{u}_j (\tilde{s}_j - f_j) \\ &= 0 - 0 - h \cdot 1 \cdot s''_{i+} + h^2 \alpha_i \cdot 1 \cdot (\tilde{s}_i - f_i) = h (-s''_{i+} + h \alpha_i (\tilde{s}_i - f_i)), \end{aligned}$$

tudíž

$$\alpha_i h(\tilde{s}_i - f_i) - s''_{i+} = 0.$$

Pokud bychom spline u zvolili tak, aby pro $j \in \{0, \dots, N\}$ bylo splněno

$$u(a) = 0, \quad u(b) = 1, \quad \tilde{u}_i = 0 \quad \text{pro } i = 0, \dots, N,$$

potom

$$0 = [u(x)s'(x)]_a^b - \sum_{i=0}^N h\tilde{u}_i s''_{i+} + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i \tilde{u}_i (\tilde{s}_i - f_i) = 1 \cdot s'(b) - 0 + 0 + 0,$$

tudíž

$$s'(b) = 0.$$

Pokud bychom spline u zvolili tak, aby pro $j \in \{0, \dots, N\}$ bylo splněno

$$u(a) = 1, \quad u(b) = 0, \quad \tilde{u}_i = 0 \quad \text{pro } i = 0, \dots, N,$$

potom

$$0 = [u(x)s'(x)]_a^b - \sum_{i=0}^N h\tilde{u}_i s''_{i+} + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i \tilde{u}_i (\tilde{s}_i - f_i) = 0 - 1 \cdot s'(a) + 0 + 0,$$

tudíž

$$s'(a) = 0.$$

Při vhodně zvolených splinech lze tedy zřejmě dosáhnout jednotlivých formulí.

Nyní ověříme opačnou implikaci. Nechť spline $s \in S(P_2, \pi)$ splňuje uvedené formule. Potom

$$\begin{aligned} & \int_a^b u'(x)s'(x) \, dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{u}_j (\tilde{s}_j - f_j) \\ &= [u(x)s'(x)]_a^b - \sum_{i=0}^N h\tilde{u}_i s''_{i+} \, dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{u}_j (\tilde{s}_j - f_j) \\ &= 0 - 0 - 0 + 0 = 0, \end{aligned}$$

kde

$$\int_a^b u'(x)s'(x) \, dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{u}_j (\tilde{s}_j - f_j) = (S - \mathcal{F}, Lu)_H = (Ls - \mathcal{F}, Lu)_H.$$

Tudíž se jedná o ortogonální projekci prvku F na obor hodnot $\mathcal{R}(L)$ operátoru L a spline s tedy minimalizuje funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $S(P_2, \pi)$.

Zbývá dokázat platnost i pro minimalizaci funkcionálu $F_\alpha(y)$ na prostoru $H^1(I)$. Nechť $y \in H^1(I)$ a předpokládejme, že spline $s \in S(P_2, \pi)$ minimalizuje

funkcionál $F_\alpha(u)$ na prostoru $S(P_2, \pi)$. Pak již víme, že splňuje uvedené formule. Potom

$$\begin{aligned} & \int_a^b y'(x)s'(x) dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{y}_j (\tilde{s}_j - f_j) \\ &= [y(x)s'(x)]_a^b - \sum_{i=0}^N h \tilde{y}_i \tilde{s}''_{i+} dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{y}_j (\tilde{s}_j - f_j) \\ &= 0 - 0 - 0 + 0 = 0, \end{aligned}$$

kde

$$\int_a^b y'(x)s'(x) dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j \tilde{y}_j (\tilde{s}_j - f_j) = (S - \mathcal{F}, Ly)_H = (Ls - \mathcal{F}, Ly)_H.$$

Tudíž se jedná o ortogonální projekci prvku F na obor hodnot $\mathcal{R}(L)$ operátoru L a spline s tedy minimalizuje funkcional $F_\alpha(y)$ na prostoru $H^1(I)$.

Dále platí

$$\begin{aligned} \|Ly + (S - \mathcal{F})\|_H^2 &= (Ly + (S - \mathcal{F}), Ly + (S - \mathcal{F}))_H \\ &= (Ly, Ly + (S - \mathcal{F}))_H + (S - \mathcal{F}, Ly + (S - \mathcal{F}))_H \\ &= (Ly, Ly)_H + (Ly, S - \mathcal{F})_H + (S - \mathcal{F}, Ly)_H + (S - \mathcal{F}, S - \mathcal{F})_H \\ &= \|Ly\|_H^2 + 0 + 0 + \|S - \mathcal{F}\|_H^2, \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} \|Ly + (S - \mathcal{F})\|_H^2 &= \|Ly + Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = \|L(y + s) - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(y + s), \\ \|S - \mathcal{F}\|_H^2 &= \|Ls - \mathcal{F}\|_H^2 = F_\alpha(s), \\ \|Ly\|_H^2 &= (Ly, Ly)_H = (\{Ty, Ay\}, \{Ty, Ay\})_H = (Ty, Ty)_Y + (Ay, Ay)_Z \\ &= \int_a^b Ty(x)Tu(x) dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (Ay)_i (Ay)_i = \int_a^b (y'(x))^2 dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (\tilde{y}_i)^2. \end{aligned}$$

Po dosazení dostáváme

$$F_\alpha(y + s) = \int_a^b (y'(x))^2 dx + \sum_{i=0}^N h^2 \alpha_i (\tilde{y}_i)^2 + F_\alpha(s).$$

Následným přeznačením $y + s$ na y získáváme poslední část lemmatu. □

Nyní pro přehlednost shrneme předchozí dvě lemmata do jedné věty.

Věta 12. *Nechť π je rovnoměrné dělení intervalu $I = \langle a, b \rangle$ s krokem h a hodnoty $f_j = f(t_j)$, $j = 0, \dots, N$, kde $t_j = \frac{x_j + x_{j+1}}{2}$, jsou zadaná data. Zvolme váhy $\alpha = \{\alpha_i\}_{i=0}^N$, $\alpha_i > 0$, kde $i = 0, \dots, N$, a $m \in \mathbb{N}$. Na prostoru funkcí $H^1(I)$ zdefinujeme funkcionál F_α předpisem*

$$F_\alpha(u) = \int_a^b |u'(x)|^2 dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j (\tilde{u}_j - f_j)^2$$

kde

$$\tilde{u}_j = \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx, \quad i = 0, \dots, N.$$

Pak existuje jediný zhlazující spline $s \in H^1(I)$, neboli platí

$$F_\alpha(s) = \inf_{u \in H^1(I)} F_\alpha(u).$$

Tato funkce s je kvadratickým splinem a je jednoznačně určena podmínkami

1. $s'(a) = s'(b) = 0$,
2. $\alpha_i h (\tilde{s}_i - f_i) - s''_{i+} = 0$ pro $i = 0, \dots, N$.

Navíc pro každé $u \in H^1(I)$ je

$$F_\alpha(u) = F_\alpha(s) + \int_a^b (u'(x) - s'(x))^2 dx + \sum_{j=0}^N h^2 \alpha_j (\tilde{u}(x_j) - \tilde{s}_j)^2.$$

Důkaz. Důkaz vyplývá z lemmat 10 a 11. □

2.3 Konstrukce zhlazujících splinů

2.3.1 Konstrukce zhlazujícího kubického splinu

Mějme dáno rovnoměrné dělení $\pi = \{x_i\}_{i=0}^{N+1}$ s krokem h , dále mějme data f_i pro $i = 0, \dots, N+1$ a parametry $\alpha_j > 0$ pro $j = 0, \dots, N+1$. Z Věty 9 vyplývá, že zhlazující kubický spline $s \in Sp_2(\pi)$ musí splňovat

1. $s''(0) = s''(N+1) = 0$,
2. $s''_{i+} - s''_{i-} + \alpha_i(s_i - f_i) = 0$ pro $i = 0, \dots, N+1$,

kde $s''_{(N+1)+} = s''_{0-} = 0$.

Pro konstrukci zmíněného splinu budeme potřebovat najít hodnoty s_i , $i = 0, \dots, N+1$. Nejprve si s_i vyjádříme z druhé podmínky zhlazujícího kubického splinu:

$$s''_{i+} - s''_{i-} + \alpha_i(s_i - f_i) = 0 \quad \Rightarrow \quad s_i = f_i - \frac{1}{\alpha_i}(s''_{i+} - s''_{i-}). \quad (2.1)$$

Nyní se budeme snažit nahradit třetí derivace výhodnějšími výrazy. Za tímto účelem si rozvineme druhou derivaci funkce $s(x)$ v okolí bodu x_i , $i \in \{1, \dots, N\}$ do Taylorova polynomu:

$$s''(x) = \frac{s''(x-x_i)^0}{0!} + \frac{s'''(x-x_i)^1}{1!} = s''_i + s''_i'(x-x_i).$$

Za proměnou x dosadíme x_{i+1} a x_{i-1} :

$$s''_{i+1} = s''_i + s''_i'(x_{i+1} - x_i) = s''_i + h s''_{i+}, \quad (2.2)$$

$$s''_{i-1} = s''_i + s''_i'(x_{i-1} - x_i) = s''_i - h s''_{i-}.$$

Po sečtení těchto dvou výrazů obdržíme

$$s''_{i+1} + s''_{i-1} = 2s''_i + h s''_{i+} - h s''_{i-} \quad \Rightarrow \quad s''_{i+} - s''_{i-} = \frac{1}{h}(s''_{i-1} - 2s''_i + s''_{i+1}).$$

Nyní již můžeme výraz (2.1) upravit. Pro $i = 1, \dots, N$ budou tyto hodnoty vypadat následovně

$$s_i = f_i - \frac{1}{\alpha_i}(s''_{i+} - s''_{i-}) = f_i - \frac{1}{\alpha_i h}(s''_{i-1} - 2s''_i + s''_{i+1}) \quad (2.3)$$

a hodnoty s_0 a s_{N+1} pak takto

$$s_0 = f_0 - \frac{1}{\alpha_0}(s''_{0+} - 0) = f_0 - \frac{1}{\alpha_0} \cdot \frac{1}{h}(s''_1 - 2s''_0) = f_0 - \frac{1}{\alpha_0 h} s''_1, \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} s_{N+1} &= f_{N+1} - \frac{1}{\alpha_{N+1}}(0 - s''_{(N+1)-}) = f_{N+1} + \frac{1}{\alpha_{N+1}} s''_{(N+1)-} \\ &= f_{N+1} - \frac{1}{\alpha_{N+1}} \cdot \frac{1}{h}(-2s''_{N+1} + s''_N) = f_{N+1} - \frac{1}{\alpha_{N+1} h} s''_N. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Dále se zaměříme na nalezení hodnot s_i'' . Rozvineme si funkci $s(x)$ v okolí bodu $x_i, i \in \{1, \dots, N\}$, do Taylorova polynomu:

$$\begin{aligned} s(x) &= \frac{s_i(x-x_i)^0}{0!} + \frac{s_i'(x-x_i)^1}{1!} + \frac{s_i''(x-x_i)^2}{2!} + \frac{s_i'''(x-x_i)^3}{3!} \\ &= s_i + s_i'(x-x_i) + \frac{s_i''}{2}(x-x_i)^2 + \frac{s_i'''}{6}(x-x_i)^3. \end{aligned}$$

Za proměnou x dosadíme x_{i+1} a x_{i-1} :

$$\begin{aligned} s_{i+1} &= s_i + s_i'(x_{i+1}-x_i) + \frac{s_i''(x_{i+1}-x_i)^2}{2} + \frac{s_{i+}'''}{6}(x_{i+1}-x_i)^3 \\ &= s_i + hs_i' + \frac{h^2}{2}s_i'' + \frac{h^3}{6}s_{i+}''', \\ s_{i-1} &= s_i + s_i'(x_{i-1}-x_i) + \frac{s_i''(x_{i-1}-x_i)^2}{2} + \frac{s_{i-}'''}{6}(x_{i-1}-x_i)^3 \\ &= s_i - s_i'(x_i-x_{i-1}) + \frac{s_i''(x_i-x_{i-1})^2}{2} - \frac{s_{i-}'''}{6}(x_i-x_{i-1})^3 \\ &= s_i - hs_i' + \frac{h^2}{2}s_i'' - \frac{h^3}{6}s_{i-}'''. \end{aligned} \tag{2.6}$$

Po sečtení těchto dvou výrazů obdržíme

$$s_{i+1} + s_{i-1} = 2s_i + 0 + 2\frac{h^2}{2}s_i'' + \frac{h^3}{6}s_{i+}''' - \frac{h^3}{6}s_{i-}''' = 2s_i + h^2s_i'' + \frac{h^3}{6}(s_{i+}''' - s_{i-}''').$$

Tento výraz lze dále upravit

$$\begin{aligned} s_{i+1} + s_{i-1} &= 2s_i + h^2s_i'' + \frac{h^3}{6}(s_{i+}''' - s_{i-}''') \\ &= 2s_i + h^2s_i'' + \frac{h^3}{6}\left(\frac{1}{h}(s_{i+1}'' - 2s_i'' + s_{i-1}'')\right) \\ &= 2s_i + h^2\left(s_i'' + \frac{1}{6}(s_{i+1}'' - 2s_i'' + s_{i-1}'')\right). \end{aligned}$$

Z této rovnosti a z první podmínky zhlazujícího kubického splinu potom vyplývá

$$s''(0) = s''(N+1) = 0,$$

$$s_{i-1}'' + 4s_i'' + s_{i+1}'' = \frac{6}{h^2}(s_{i-1} - 2s_i + s_{i+1}) \quad \text{pro } i = 1, \dots, N.$$

Nyní do této identity dosadíme vyjádřené hodnoty s_i :

$$\begin{aligned} s_{i-1}'' + 4s_i'' + s_{i+1}'' &= \frac{6}{h^2}(s_{i-1} - 2s_i + s_{i+1}) = \frac{6}{h^2}\left[f_{i-1} - \frac{1}{\alpha_{i-1}h}(s_{i-2}'' - 2s_{i-1}'' + s_i'')\right. \\ &\quad \left. - 2\left(f_i - \frac{1}{\alpha_i h}(s_{i-1}'' - 2s_i'' + s_{i+1}'')\right) + f_{i+1} - \frac{1}{\alpha_{i+1}h}(s_i'' - 2s_{i+1}'' + s_{i+2}'')\right]. \end{aligned}$$

Po úpravě dostáváme

$$\begin{aligned}
\frac{6}{h^2}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) &= s''_{i-1} + 4s''_i + s''_{i+1} + \frac{6}{\alpha_{i-1}h^3}(s''_{i-2} - 2s''_{i-1} + s''_i) \\
&\quad - \frac{12}{\alpha_i h^3}(s''_{i-1} - 2s''_i + s''_{i+1}) + \frac{6}{\alpha_{i+1}h^3}(s''_i - 2s''_{i+1} + s''_{i+2}) \\
&= \left(\frac{6}{\alpha_{i-1}h^3}\right) s''_{i-2} + \left(1 + \frac{6}{\alpha_{i-1}h^3} \cdot (-2) - \frac{12}{\alpha_i h^3}\right) s''_{i-1} \\
&\quad + \left(4 + \frac{6}{\alpha_{i-1}h^3} - \frac{12}{\alpha_i h^3} \cdot (-2) + \frac{6}{\alpha_{i+1}h^3}\right) s''_i \\
&\quad + \left(1 - \frac{12}{\alpha_i h^3} + \frac{6}{\alpha_{i+1}h^3} \cdot (-2)\right) s''_{i+1} + \left(\frac{6}{\alpha_{i+1}h^3}\right) s''_{i+2} \\
&= \left[\frac{6}{h^3} \cdot \frac{1}{\alpha_{i-1}}\right] s''_{i-2} + \left[1 - \frac{12}{h^3} \left(\frac{1}{\alpha_{i-1}} + \frac{1}{\alpha_i}\right)\right] s''_{i-1} \\
&\quad + \left[4 + \frac{6}{h^3} \left(\frac{1}{\alpha_{i-1}} + \frac{4}{\alpha_i} + \frac{1}{\alpha_{i+1}}\right)\right] s''_i \\
&\quad + \left[1 - \frac{12}{h^3} \left(\frac{1}{\alpha_i} + \frac{1}{\alpha_{i+1}}\right)\right] s''_{i+1} + \left[\frac{6}{h^3} \cdot \frac{1}{\alpha_{i+1}}\right] s''_{i+2}.
\end{aligned}$$

Tím jsme obdrželi soustavu rovnic pro hodnoty $\{s''_i\}_{i=1}^N$, kterou lze zapsat maticově jako

$$\mathbb{A}\mathbf{y} = \mathbf{b},$$

kde

$$\mathbb{A} = \{a_{i,j}\}_{i,j=1}^N, \quad \mathbf{b} = \{b_i\}_{i=1}^N, \quad \mathbf{y} = \{s''_i\}_{i=1}^N, \quad (2.7)$$

$$a_{i,i} = 4 + \frac{6}{h^3} \left(\frac{1}{\alpha_{i-1}} + \frac{4}{\alpha_i} + \frac{1}{\alpha_{i+1}}\right) \quad \text{pro } i = 1, \dots, N, \quad (2.8)$$

$$a_{i,i+1} = 1 - \frac{12}{h^3} \left(\frac{1}{\alpha_i} + \frac{1}{\alpha_{i+1}}\right) \quad \text{pro } i = 1, \dots, N-1, \quad (2.9)$$

$$a_{i-1,i} = 1 - \frac{12}{h^3} \left(\frac{1}{\alpha_{i-1}} + \frac{1}{\alpha_i}\right) \quad \text{pro } i = 2, \dots, N, \quad (2.10)$$

$$a_{i,i+2} = \frac{6}{h^3} \cdot \frac{1}{\alpha_{i+1}} \quad \text{pro } i = 1, \dots, N-2, \quad (2.11)$$

$$a_{i-2,i} = \frac{6}{h^3} \cdot \frac{1}{\alpha_{i-1}} \quad \text{pro } i = 3, \dots, N, \quad (2.12)$$

$$a_{i,j} = 0 \quad \text{pro } |i-j| > 2, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (2.13)$$

$$b_i = \frac{6}{h^2}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) \quad \text{pro } i = 1, \dots, N. \quad (2.14)$$

Matrice \mathbb{A} je symetrická, pětdiagonální, a navíc, jak vyplývá z Věty 9, i regulární.

Pozn.: Všimněme si, že pokud by pro každou váhu $\alpha_i, i = 1, \dots, N$ platilo $\alpha_i \rightarrow \infty$, matice \mathbb{A} by konvergovala k třídiagonální matici s hodnotou 4 na hlavní

diagonále a hodnotou 1 na diagonálách vedlejších, což odpovídá soustavě rovnic v algoritmu konstrukce standardního interpolačního kubického splinu (viz [6]).

Dosazením nalezených hodnot s_i'' do vyjádření s_i (2.3) až (2.5) získáme hodnoty splinu s v bodech $\{x_i\}_{i=0}^{N+1}$. Pro úplnost splinu s zbývá najít hodnoty $s(x)$ na intervalech $x \in \langle x_i, x_{i+1} \rangle, i = 0, \dots, N$. K tomu využijeme následující lemma.

Lemma 13. *Nechť $\pi = \{x_i\}_{i=0}^{N+1}$ je rovnoměrné dělení s krokem h a funkce $s \in Sp_2(\pi)$. Potom pro každé $x \in \langle x_i, x_{i+1} \rangle, i = 0, \dots, N$ platí*

$$s(x) = s_i + t(s_{i+1} - s_i) - \frac{t(1-t)}{6}h^2 [(2-t)s_i'' + (1+t)s_{i+1}''], \quad (2.15)$$

$$\text{kde } t = \frac{x - x_i}{h}.$$

Důkaz. Pokud pro výraz (2.15) platí, že je z prostoru $Sp_2(\pi)$, musí se na každém intervalu $\langle x_i, x_{i+1} \rangle, i = 0, \dots, N$ jednat o kubickou funkci a zároveň musí být splněny podmínky

$$s(x_i) = s_i, \quad s(x_{i+1}) = s_{i+1}, \quad s''(x_i) = s_i'', \quad s''(x_{i+1}) = s_{i+1}''.$$

Jelikož je kubická funkce tvořena čtyřmi neznámými, čtyři podmínky tuto funkci určují jednoznačně.

Výraz (2.15) je zřejmě kubickou funkcí proměnné t a tedy na základě rovnosti $t = \frac{x-x_i}{h}$ i proměnné x . Nyní stačí ověřit, zda funkce splňuje uvedené podmínky. Pokud bychom za x dosadili hodnotu x_i , výraz t by byl roven nule, tudíž pro (2.15) by platilo $s(x_i) = s_i$.

Pokud bychom za x dosadili hodnotu x_{i+1} , výraz t by byl roven $\frac{x_{i+1}-x_i}{h} = \frac{h}{h} = 1$, tudíž pro (2.15) by platilo $s(x_{i+1}) = s_i + 1 \cdot (s_{i+1} - s_i) = s_{i+1}$.

Když celou rovnost (2.15) dvakrát zderivujeme a za x dosadíme hodnotu x_i , dostaneme opět $t = 0$, a tedy $s''(x_i) = s_i''$.

Když po dvojím zderivování (2.15) dosadíme za x hodnotu x_{i+1} , dostaneme $t = 1$, a tedy $s''(x_{i+1}) = s_{i+1}''$.

Tím je Lemma 12 dokázáno. □

Algoritmus konstrukce

Mějme dáno rovnoměrné dělení $\pi = \{x_i\}_{i=0}^{N+1}$ s krokem h , dále data f_i pro $i = 0, \dots, N + 1$ a parametry $\alpha_j > 0$ pro $j = 0, \dots, N + 1$.

1. krok

Vyřešením soustavy rovnic $\mathbb{A}\mathbf{y} = \mathbf{b}$ definovanou rovnostmi (2.7) až (2.14) nalezneme hodnoty $\{s_i''\}_{i=1}^N$. Dodefinujeme $s_0'' = s_{N+1}'' = 0$.

2. krok

Pomocí (2.3) až (2.5) vypočteme hodnoty $\{s_i\}_{i=0}^{N+1}$.

3. krok

Získáme spline s z předpisu (2.15).

2.3.2 Konstrukce zhlazujícího kvadratického splinu

Mějme dáno rovnoměrné dělení $\pi = \{x_i\}_{i=0}^{N+1}$ s krokem h , dále data $f_i = f(t_i)$, $i = 0, \dots, N$, kde $t_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$, a parametry $\alpha_j > 0$ pro $j = 0, \dots, N$. Potom z Věty 12 víme, že zhlazující kvadratický spline $s \in S(P_2, \pi)$ musí splňovat

1. $s'(a) = s'(b) = 0$,
2. $\alpha_i h(\tilde{s}_i - f_i) - s''_{i+} = 0$ pro $i = 0, \dots, N$.

Pro konstrukci zmíněného splinu budeme potřebovat najít hodnoty \tilde{s}_i , kde $i = 0, \dots, N$. Nejprve si \tilde{s}_i vyjádříme z druhé podmínky zhlazujícího kvadratického splinu:

$$\alpha_i h(\tilde{s}_i - f_i) - s''_{i+} = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{s}_i = f_i + \frac{s''_{i+}}{\alpha_i h}. \quad (2.16)$$

Nyní se budeme snažit nahradit druhou derivaci výhodnějším výrazem. Za tímto účelem si rozvineme první derivaci funkce $s(x)$ v okolí bodu x_i , $i \in \{1, \dots, N\}$, do Taylorova polynomu:

$$s'(x) = \frac{s'_i(x - x_i)^0}{0!} + \frac{s''_i(x - x_i)^1}{1!} = s'_i + s''_i(x - x_i).$$

Za proměnou x dosadíme x_{i+1} :

$$s'_{i+1} = s'_i + s''_{i+}(x_{i+1} - x_i) = s'_i + h s''_{i+} \quad \Rightarrow \quad s''_{i+} = \frac{1}{h}(s'_{i+1} - s'_i). \quad (2.17)$$

Nyní můžeme výraz (2.16) pro hodnoty $i = 0, \dots, N$ upravit následovným způsobem:

$$\tilde{s}_i = f_i + \frac{s''_{i+}}{\alpha_i h} = f_i + \frac{1}{\alpha_i h^2}(s'_{i+1} - s'_i). \quad (2.18)$$

Dále se zaměříme na nalezení hodnot s'_i . Za proměnou x v Taylorově rozvoji první derivace funkce dosadíme x_{i-1} :

$$s'_{i-1} = s'_i + s''_{i-}(x_{i-1} - x_i) = s'_i - h s''_{i-} \quad \Rightarrow \quad s''_{i-} = \frac{1}{h}(s'_i - s'_{i-1}).$$

Jelikož se jedná o Taylorův rozvoj v okolí bodu x_i pro každé $i \in \{1, \dots, N\}$, musí platit taktéž

$$s''_{(i+1)-} = \frac{1}{h}(s'_{i+1} - s'_i). \quad (2.19)$$

Funkci $s(x)$ si na intervalu $\langle x_i, x_{i+1} \rangle$ vyjádříme pomocí rozvoje do Taylorova polynomu v okolí krajních bodů a následně využijeme rovnosti (2.17) a (2.19):

$$\begin{aligned} s(x) &= s_i + s'_i(x - x_i) + \frac{s''_{i+}}{2}(x - x_i)^2 \\ &= s_i + s'_i(x - x_i) + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i)(x - x_i)^2, \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} s(x) &= s_{i+1} + s'_{i+1}(x - x_{i+1}) + \frac{s''_{(i+1)-}}{2}(x - x_{i+1})^2 \\ &= s_{i+1} + s'_{i+1}(x - x_{i+1}) + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i)(x - x_{i+1})^2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Z definice kvadratického splinu zhlazujícího střední integrální hodnoty víme, že pro \tilde{s}_i platí

$$\tilde{s}_i = \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x) dx, \quad i = 0, \dots, N$$

neboli

$$h\tilde{s}_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x) dx, \quad i = 0, \dots, N.$$

Při dosazení (2.20) do této rovnosti dostáváme:

$$\begin{aligned} h\tilde{s}_i &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} s_i + s'_i(x - x_i) + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i)(x - x_i)^2 dx \\ &= \left[s_i x + s'_i \frac{x^2}{2} - s'_i x_i x + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i) \frac{(x - x_i)^3}{3} \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \\ &= \left[s_i x_{i+1} + s'_i \frac{x_{i+1}^2}{2} - s'_i x_i x_{i+1} + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i) \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{3} \right] \\ &\quad - \left[s_i x_i + s'_i \frac{x_i^2}{2} - s'_i x_i^2 + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i) \frac{(x_i - x_i)^3}{3} \right] \\ &= (x_{i+1} - x_i)s_i + \left(\frac{x_{i+1}^2}{2} - x_i x_{i+1} - \frac{1}{2h} \cdot \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{3} - \frac{x_i^2}{2} + x_i^2 \right) s'_i \\ &\quad + \frac{1}{2h} \cdot \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{3} s'_{i+1} \\ &= (x_{i+1} - x_i)s_i + \left(\frac{x_{i+1}^2 - 2x_i x_{i+1} + x_i^2}{2} - \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{6h} \right) s'_i + \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{6h} s'_{i+1} \\ &= (x_{i+1} - x_i)s_i + \left(\frac{3(x_{i+1} - x_i)^2}{6} - \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{6h} \right) s'_i + \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{6h} s'_{i+1} \\ &= hs_i + \left(\frac{3h^2}{6} - \frac{h^3}{6h} \right) s'_i + \frac{h^3}{6h} s'_{i+1} = hs_i + \frac{h^2}{6}(2s'_i + s'_{i+1}), \end{aligned}$$

z čehož vyplývá

$$\tilde{s}_i = s_i + \frac{h}{6}(2s'_i + s'_{i+1}), \quad i = 0, \dots, N. \quad (2.22)$$

Při dosazení (2.21) dostáváme:

$$\begin{aligned}
h\tilde{s}_i &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} s_{i+1} + s'_{i+1}(x - x_{i+1}) + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i)(x - x_{i+1})^2 dx \\
&= \left[s_{i+1}x + s'_{i+1}\frac{x^2}{2} - s'_{i+1}x_{i+1}x + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i)\frac{(x - x_{i+1})^3}{3} \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \\
&= \left[s_{i+1}x_{i+1} + s'_{i+1}\frac{x_{i+1}^2}{2} - s'_{i+1}x_{i+1}^2 + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i)\frac{(x_{i+1} - x_{i+1})^3}{3} \right] \\
&\quad - \left[s_{i+1}x_i + s'_{i+1}\frac{x_i^2}{2} - s'_{i+1}x_{i+1}x_i + \frac{1}{2h}(s'_{i+1} - s'_i)\frac{(x_i - x_{i+1})^3}{3} \right] \\
&= (x_{i+1} - x_i)s_{i+1} + \left(\frac{x_{i+1}^2}{2} - x_{i+1}^2 - \frac{x_i^2}{2} + x_{i+1}x_i - \frac{1}{2h} \cdot \frac{(x_i - x_{i+1})^3}{3} \right) s'_{i+1} \\
&\quad + \frac{1}{2h} \cdot \frac{(x_i - x_{i+1})^3}{3} s'_i \\
&= (x_{i+1} - x_i)s_{i+1} - \left(\frac{x_i^2 - 2x_{i+1}x_i + x_{i+1}^2}{2} + \frac{(x_i - x_{i+1})^3}{6h} \right) s'_{i+1} + \frac{(x_i - x_{i+1})^3}{6h} s'_i \\
&= (x_{i+1} - x_i)s_{i+1} - \left(\frac{3(x_i - x_{i+1})^2}{6} + \frac{(x_i - x_{i+1})^3}{6h} \right) s'_{i+1} + \frac{(x_i - x_{i+1})^3}{6h} s'_i \\
&= hs_{i+1} - \left(\frac{3(-h)^2}{6} + \frac{(-h)^3}{6h} \right) s'_i + \frac{(-h)^3}{6h} s'_{i+1} = hs_{i+1} - \frac{h^2}{6}(2s'_{i+1} + s'_i),
\end{aligned}$$

z čehož vyplývá

$$\tilde{s}_i = s_{i+1} - \frac{h}{6}(2s'_{i+1} + s'_i), \quad i = 0, \dots, N. \quad (2.23)$$

Zhlazující kvadratický spline tedy musí splňovat tyto interpolační podmínky:

$$\begin{aligned}
\tilde{s}_i &= s_i + \frac{h}{6}(2s'_i + s'_{i+1}) \quad \text{pro } i = 0, \dots, N-1, \\
\tilde{s}_N &= s_{N+1} - \frac{h}{6}(2s'_{N+1} + s'_N).
\end{aligned} \quad (2.24)$$

Z (2.22) a (2.23) a ze spojitosti splinu v bodech $\{x_i\}_{i=1}^N$ dále vyplývá

$$\begin{aligned}
s_i + \frac{h}{6}(2s'_i + s'_{i+1}) &= \tilde{s}_i = s_{i+1} - \frac{h}{6}(2s'_{i+1} + s'_i), \quad i = 0, \dots, N \\
\Rightarrow \frac{h}{6}(2s'_i + s'_{i+1}) + \frac{h}{6}(2s'_{i+1} + s'_i) &= s_{i+1} - s_i, \quad i = 0, \dots, N \\
\Rightarrow \frac{h}{6}(3s'_i + 3s'_{i+1}) &= s_{i+1} - s_i, \quad i = 0, \dots, N \\
\Rightarrow \frac{h}{2}(s'_i + s'_{i+1}) &= s_{i+1} - s_i, \quad i = 0, \dots, N
\end{aligned}$$

neboli

$$\frac{h}{2}(s'_{i-1} + s'_i) = s_i - s_{i-1}, \quad i = 1, \dots, N+1. \quad (2.25)$$

Tuto rovnost využijeme pro odvození vztahu mezi \tilde{s}_i a \tilde{s}_{i-1} :

$$\tilde{s}_i = s_i + \frac{h}{6}(2s'_i + s'_{i+1}), \quad i = 0, \dots, N$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \tilde{s}_i - \tilde{s}_{i-1} &= \left(s_i + \frac{h}{6}(2s'_i + s'_{i+1}) \right) - \left(s_{i-1} + \frac{h}{6}(2s'_{i-1} + s'_i) \right), \quad i = 1, \dots, N \\
&= \frac{1}{6} [6(s_i - s_{i-1}) + h(-2s'_{i-1} + s'_i + s'_{i+1})], \quad i = 1, \dots, N \\
&= \frac{1}{6} \left[6 \cdot \frac{h}{2}(s'_{i-1} + s'_i) + h(-2s'_{i-1} + s'_i + s'_{i+1}) \right], \quad i = 1, \dots, N \\
&= \frac{1}{6}(hs'_{i-1} + 4hs'_i + hs'_{i+1}), \quad i = 1, \dots, N,
\end{aligned}$$

z čehož získáváme vztah

$$hs'_{i-1} + 4hs'_i + hs'_{i+1} = 6(\tilde{s}_i - \tilde{s}_{i-1}), \quad i = 1, \dots, N.$$

Jelikož spline s má v bodech x_0 a x_{N+1} nulové první derivace, získaný vztah lze přepsat do následující soustavy rovnic:

$$\begin{aligned}
4hs'_1 + hs'_2 &= 6(\tilde{s}_1 - \tilde{s}_0), \\
hs'_{i-1} + 4hs'_i + hs'_{i+1} &= 6(\tilde{s}_i - \tilde{s}_{i-1}), \quad i = 2, \dots, N-1, \\
hs'_{N-1} + 4hs'_N &= 6(\tilde{s}_N - \tilde{s}_{N-1}).
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Nyní do identity (2.26) dosadíme vyjádřené hodnoty \tilde{s}_i dle (2.18):

$$\begin{aligned}
hs'_{i-1} + 4hs'_i + hs'_{i+1} &= 6(\tilde{s}_i - \tilde{s}_{i-1}) \\
&= 6 \left[\left(f_i + \frac{1}{\alpha_i h^2}(s'_{i+1} - s'_i) \right) - \left(f_{i-1} - \frac{1}{\alpha_{i-1} h^2}(s'_i - s'_{i-1}) \right) \right].
\end{aligned}$$

Po úpravě dostáváme

$$\begin{aligned}
6(f_i - f_{i-1}) &= hs'_{i-1} + 4hs'_i + hs'_{i+1} - \frac{6}{\alpha_i h^2}(s'_{i+1} - s'_i) + \frac{6}{\alpha_{i-1} h^2}(s'_i - s'_{i-1}) \\
&= \left(h - \frac{6}{\alpha_{i-1} h^2} \right) s'_{i-1} + \left(4h + \frac{6}{\alpha_{i-1} h^2} + \frac{6}{\alpha_i h^2} \right) s'_i + \left(h - \frac{6}{\alpha_i h^2} \right) s'_{i+1}.
\end{aligned}$$

Tím jsme obdrželi soustavu rovnic pro hodnoty $\{s'_i\}_{i=1}^N$, kterou lze zapsat matricově jako

$$\mathbb{A} \mathbf{y} = \mathbf{b},$$

kde

$$\mathbb{A} = \{a_{i,j}\}_{i,j=1}^N, \quad \mathbf{b} = \{b_i\}_{i=1}^N, \quad \mathbf{y} = \{s'_i\}_{i=1}^N, \tag{2.27}$$

$$a_{i,i} = 4h + \frac{6}{\alpha_{i-1} h^2} + \frac{6}{\alpha_i h^2} \quad \text{pro } i = 1, \dots, N, \tag{2.28}$$

$$a_{i,i+1} = h - \frac{6}{\alpha_i h^2} \quad \text{pro } i = 1, \dots, N-1, \tag{2.29}$$

$$a_{i-1,i} = h - \frac{6}{\alpha_{i-1} h^2} \quad \text{pro } i = 2, \dots, N, \tag{2.30}$$

$$a_{i,j} = 0 \quad \text{pro } |i-j| > 1, \quad i, j = 1, \dots, N, \tag{2.31}$$

$$b_i = 6(f_i - f_{i-1}) \quad \text{pro } i = 1, \dots, N. \tag{2.32}$$

Matice \mathbb{A} je zřejmě symetrická, třídiagonální, a navíc i ostře diagonálně dominantní. Z poslední vlastnosti vyplývá, že musí být taktéž regulární a k řešení

soustavy $\mathbb{A}\mathbf{y} = \mathbf{b}$, které je tedy jednoznačné, dospějeme metodou Gaussovy eliminace bez nutnosti pivotace (viz [3]).

Pozn.: Všimněme si, že pokud by pro každou váhu $\alpha_i, i = 1, \dots, N$ platilo $\alpha_i \rightarrow \infty$, matice \mathbb{A} by konvergovala k třídiagonální matici s hodnotou $4h$ na hlavní diagonále a hodnotou h na diagonálách vedlejších, což odpovídá soustavě rovnic v algoritmu konstrukce standardního interpolačního kvadratického splinu (viz [6]).

Hodnoty splinu s v bodech $\{x_i\}_{i=0}^{N+1}$ získáme dosazením hodnot s'_i do výrazů s_i , které vyjádříme z interpolačních podmínek (2.24) a ze vztahu (2.25):

$$\begin{aligned}\tilde{s}_i &= s_i + \frac{h}{6}(2s'_i + s'_{i+1}) \quad \Rightarrow \quad s_i = \tilde{s}_i - \frac{h}{6}(2s'_i + s'_{i+1}), \quad i = 0, \dots, N-1, \\ &\Rightarrow s_0 = \tilde{s}_0 - \frac{h}{6}(2s'_0 + s'_1) = \tilde{s}_0 - \frac{h}{6}s'_1,\end{aligned}\tag{2.33}$$

$$\begin{aligned}\frac{h}{2}(s'_{i-1} + s'_i) &= s_i - s_{i-1}, \quad i = 1, \dots, N \\ &\Rightarrow s_i = s_{i-1} + \frac{h}{2}(s'_{i-1} + s'_i), \quad i = 1, \dots, N,\end{aligned}\tag{2.34}$$

$$\begin{aligned}\tilde{s}_N &= s_{N+1} - \frac{h}{6}(2s'_{N+1} + s'_N) \\ &\Rightarrow s_{N+1} = \tilde{s}_N - \frac{h}{6}(2s'_{N+1} + s'_N).\end{aligned}\tag{2.35}$$

Pro úplnost splinu s zbývá nalézt hodnoty $s(x)$ na intervalech $x \in \langle x_i, x_{i+1} \rangle$, $i = 0, \dots, N$. Tyto hodnoty získáme z vyjádření (2.20).

Algoritmus konstrukce

Mějme dáno rovnoměrné dělení $\pi = \{x_i\}_{i=0}^{N+1}$ s krokem h , dále data $f_i = f(t_i)$, $i = 0, \dots, N$, kde $t_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$, a parametry $\alpha_j > 0$ pro $j = 0, \dots, N+1$.

1. krok

Vyřešením soustavy rovnic $\mathbb{A}\mathbf{y} = \mathbf{b}$ definovanou rovnostmi (2.27) až (2.32) nalezneme hodnoty $\{s'_i\}_{i=1}^N$. Dodefinujeme $s'_0 = s'_{N+1} = 0$.

2. krok

Pomocí (2.18) spočteme hodnoty \tilde{s}_0 a \tilde{s}_N a následně pomocí (2.33) až (2.35) vypočteme hodnoty $\{s_i\}_{i=0}^{N+1}$.

3. krok

Získáme spline s z předpisu (2.20).

Kapitola 3

Implementace

V této kapitole popíšeme, jakým způsobem byly implementovány teoreticky stanovené algoritmy konstrukce zhlazujícího kubického a kvadratického splinu, a prozkoumáme, nakolik zvolené váhy u reziduí přičítaných k minimalizovanému funkcionálu ovlivňují numerické výsledky.

3.1 Sestrojení algoritmů

K implementaci algoritmů byl použit software Matlab, konkrétně verze R2010a, a to především kvůli jednoduchosti programovacího jazyka a taktéž kvůli výstižnému zobrazení výstupů. Jako hlavní přehled příkazů posloužila kniha [9]. Celý kód i jednotlivé výstupy jsou k nalezení na přiloženém CD.

Pro základní strukturu algoritmu byla vytvořena samostatná funkce *kub_spline* (respektive *kvad_spline*). Vstupními parametry této funkce jsou uzly X , funkční hodnoty v těchto uzlech (resp. v pomocných uzlech uprostřed uzlů zadaných) f , váhy $alfa$, krok mezi uzly h a počet vnitřních uzlů (resp. pomocných uzlů uprostřed uzlů zadaných) N .

V této struktuře jsou nejdříve postupně volány funkce *matice* (resp. *matice2*), *PravaStrana* (resp. *PravaStrana2*) a *ResicRovnic* k vyjádření (2.7) (resp. (2.27)). Následně jsou *for* cyklem dodefinovány hodnoty $s''_0 = s''_{N+1} = 0$ (resp. $s'_0 = s'_{N+1} = 0$), v případě kvadratického splinu vypočteny dle (2.18) taktéž hodnoty \tilde{s}_0 a \tilde{s}_N , a dále pomocí funkce *CalcSi* (resp. *CalcSi2*) vyjádřeny hodnoty $s_i, i = 0, \dots, N + 1$. Poté jsou zavedena pomocná data rozdělující intervaly mezi jednotlivými uzly na menší úseky potřebné k přesnějšímu vykreslení grafu. Funkční hodnoty v těchto bodech jsou vypočteny přivolanou funkcí *CalcSx* (resp. *CalcSx2*). Na závěr je vykreslen graf. V případě kvadratického splinu jsou kvůli přehlednosti při počtu 50 uzlů a méně zakresleny i původně zadané uzly.

Kód funkce *kvad_spline*, který je oproti funkci *kub_spline* nepatrně rozsáhlejší, vypadá následovně:

```
function [ ] = kvad_spline( f, alfa, X, h, N)

A = matice2(N, alfa, h);
b = PravaStrana2(N, f);
```

```

pomocne = ResicRovnic( A, b);

s_dev = zeros(N+2,1);
for i = 1:(N+2)
    if i == 1
        s_dev(i) = 0;
    elseif i == (N+2)
        s_dev(i) = 0;
    else s_dev(i) = pomocne(i-1);
    end
end

s_vln0 = f(1) + (s_dev(2) - s_dev(1))/(h^2*alfa(1));
s_vlnN = f(N+1) + (s_dev(N+2) - s_dev(N+1))/(h^2*alfa(N+1));

si = CalcSi2(N, h, s_dev, s_vln0, s_vlnN);

deleni = 100;
dataX = 0:(h/deleni):(N+1)*h;

sx = CalcSx2(h, N, deleni, X, dataX, s_dev, si);
X_central = X([1:(N+1)]) + h/2;
vect = zeros(1,N+2);

figure
if length(X)>50
    plot(X_central,f,'ro',dataX,sx);
else
    plot(X,vect,'k.',X_central,f,'ro',dataX,sx);
end
end

```

Funkce *matice* (resp. *matice2*) dosazuje své vstupní parametry do vyjádření (2.8) až (2.13) (resp. (2.28) až (2.31)), funkce *PravaStrana* (resp. *PravaStrana2*) do (2.14) (resp. do (2.32)), funkce *CalcSi* (resp. *CalcSi2*) do (2.3) až (2.5) (resp. do (2.33) až (2.35)) a funkce *CalcSx* (resp. *CalcSx2*) do (2.15) (resp. do (2.20)). Funkce *ResicRovnic* vyčíslí vektor \mathbf{y} jako řešení soustavy rovnic zapsané maticově $\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{b}$. To v jazyce Matlabu zajistí operátor dělení $/$. Další možností by bylo vytvořit speciální funkci Gaussova eliminace bez nutnosti pivotace.

Kód funkce *matice* vypadá následovně:

```

function [ A ] = matice( N, alfa, h)

A = zeros(N);
for i = 1:N
    for j = 1:N
        if i == j
            A(i,j) = 4 + 6/h^3*(1/alfa(i) + 4/alfa(i+1) + 1/alfa(i+2));
        elseif i == j-1
            A(i,j) = 1 - 12/h^3*(1/alfa(i+1) + 1/alfa(j+1));
        end
    end
end

```

```

elseif i == j+1
    A(i,j) = 1 - 12/h^3*(1/alfa(i+1) + 1/alfa(j+1));
elseif i == j-2
    A(i,j) = 6/h^3*(1/alfa(i+2));
elseif i == j+2
    A(i,j) = 6/h^3*(1/alfa(j+2));
end
end
end
end
end

```

Kód funkce *PravaStrana* vypadá následovně:

```

function [ b ] = PravaStrana( N, h, f )

b = zeros(N, 1);
for i = 1:N
    b(i) = 6/h^2*( f(i) - 2*f(i+1) + f(i+2));
end

```

Kód funkce *CalcSi* vypadá následovně:

```

function [ s ] = CalcSi( N, h, alfa, f, s_dev2 )

s = zeros(N+2,1);
for i = 1:(N+2)
    if i == 1
        s(i) = f(i) - s_dev2(i+1) / ( alfa(i)*h );
    elseif i == (N+2)
        s(i) = f(i) - s_dev2(i-1) / ( alfa(i)*h );
    else
        s(i) = f(i) -
            ( s_dev2(i+1) - 2*s_dev2(i) + s_dev2(i-1)) / ( alfa(i)*h );
    end
end
end
end

```

Kód funkce *CalcSx* vypadá následovně:

```

function [ sx ] = CalcSx( h, N, del, X, dataX, y, s)

sx = zeros((N+1)*del+1,1);
for i = 1:N+1
    for j = 1:del
        sx((i-1)*del+j) = s(i) + ( dataX((i-1)*del+j) -
            X(i))/ h * (s(i+1) - s(i)) - ( dataX((i-1)*del+j) -
            X(i))/ h * ( 1 - ( dataX((i-1)*del+j) - X(i))/ h )
            / 6 * h^2 * (( 2 - ( dataX((i-1)*del+j) - X(i))/ h ) * y(i)
            + ( 1 + ( dataX((i-1)*del+j) - X(i))/ h ) * y(i+1));
    end
end
end

```

```
sx((N+1)*del+1) = s(N+2);  
  
end
```

Kód funkce *ResicRovnic* vypadá následovně:

```
function [ X ] = ResicRovnic( A, b )  
  
X = A \ b;  
end
```

Skript vyvolávající funkci se základní strukturou algoritmu *kub_spline* (resp. *kvad_spline*) nazvaný *spousteci_skript* (resp. *spousteci_skript2*) obsahuje různé sady vstupních testovacích dat (více viz 3.2).

Zde je ukázka kódu vstupních dat:

```
clear all  
  
f = [1, 3, 1, 3, 1, 3, 1, 3, 1, 3, 1];  
alfa = [10, 1000000, 100, 50, 10, 5, 3, 1, 0.8, 0.5, 10];  
X = 0:2:20;  
h = 2;  
N = 9;  
kub_spline(f, alfa, X, h, N);
```

```
clear all  
  
alfa = 10*ones(1,1000);  
X = 0:0.02:20;  
X_pom = X([1:1000]);  
f = sin(X_pom)+X_pom.*(rand(1,1000)-0.5)/4;  
h = 0.02;  
N = 999;  
kvad_spline(f, alfa, X, h, N);
```

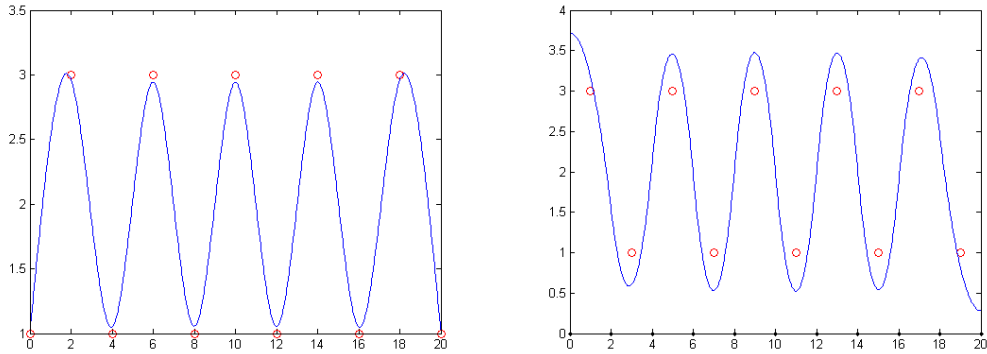
3.2 Numerické výsledky

Testovací data volíme tak, aby se co nejlépe projevila míra vlivu vah α na výsledném splinu. Na jednotlivých sadách uzlů a funkčních hodnot nízkého i poměrně vysokého rozsahu prozkoumáme, jakým způsobem se spline mění při různě zadaných váhách. Jak plyne z Poznámek uvedených pod soustavami rovnic (2.7) až (2.14) a (2.27) až (2.32), čím bude váha α_j větší, tím by hodnota $s(x_j)$ měla být přesnější aproximací hodnoty $f(x_j)$ resp. \tilde{u}_j .

Následující obrázky budou vždy v páru zobrazovat výsledný kubický a kvadratický spline na podobných sadách dat.

1. příklad

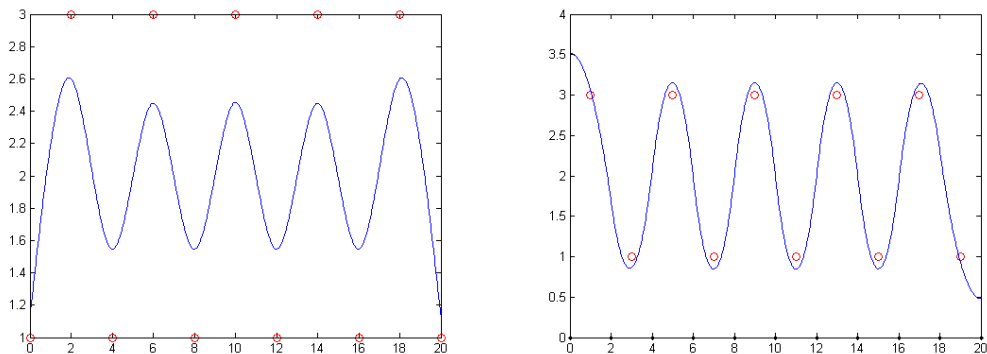
První tři příklady zobrazují zhlazující spliny na intervalu $(0, 20)$ o 11 rovnoměrně rozdělených uzlech (resp. 10 pomocných uzlech) o kroku $h = 2$ se střídavými funkčními hodnotami f_j resp. \tilde{u}_j 1 a 3. Váhy α_j jsou nejprve zvoleny všechny stejné o hodnotě 100.



Na této dvojici grafů vidíme, že váhy o hodnotě 100 v obou případech již zajistí poměrně velmi vysokou přesnost.

2. příklad

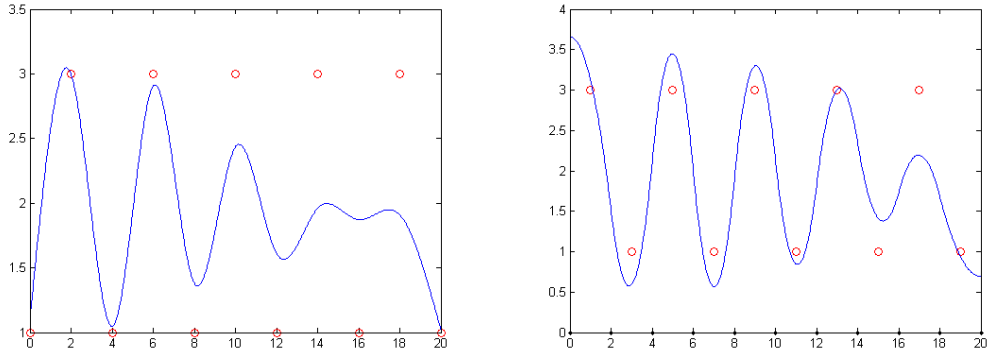
V druhém příkladu dochází pro srovnání s příkladem prvním ke změně všech vah α_j z hodnoty 100 na hodnotu 5.



Při váhách o hodnotě 5 je jejich vliv již zřetelně viditelný. Při požadavku pouze mírného oddálení od interpolačního splinu v daných bodech je v takto stavěné situaci testovaná hodnota nedostatečně vysoká. V kvadratickém případě sice došlo k přiblížení k daným bodům, nesmíme však opomenout, že aproximujeme středními integrálními hodnotami, tudíž interpolační spline těmito daty ve standardních situacích neprochází.

3. příklad

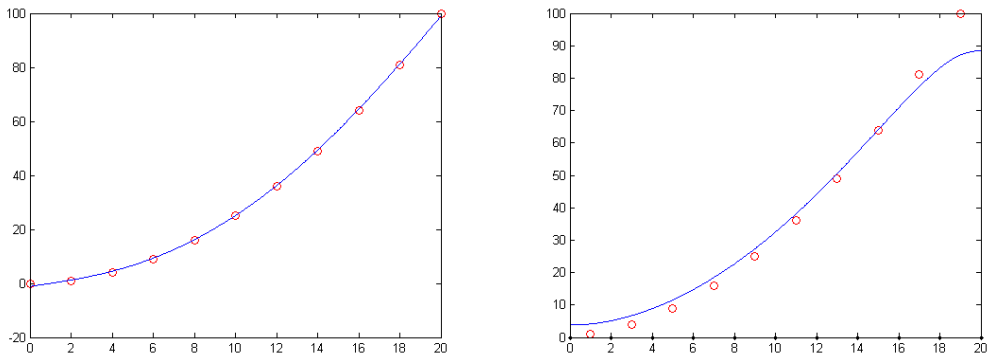
Nyní prozkoumáme míru vlivu velmi rozdílných vah α_j o hodnotách 10, 1000000, 100, 50, 10, 5, 3, 1, 0.8, 0.5 a 10 v tomto pořadí (v případě kvadratického splinu pouze bez hodnoty 0.8).



Tento příklad zřejmě potvrzuje, že čím je hodnota vah α_j vyšší, tím je aproximace funkce $f(x)$ zhlazujícím splinem $s(x)$ v uzlových resp. pomocných bodech x_j přesnější, a naopak u nízkých hodnot vah α_j mají hodnoty $f(x_j)$ resp. \tilde{u}_j jen malý vliv na tvar výsledné křivky. Na základě této dvojice si lze utvořit představu, jak se zhlazující spline chová pro různé hodnoty vah.

4. příklad

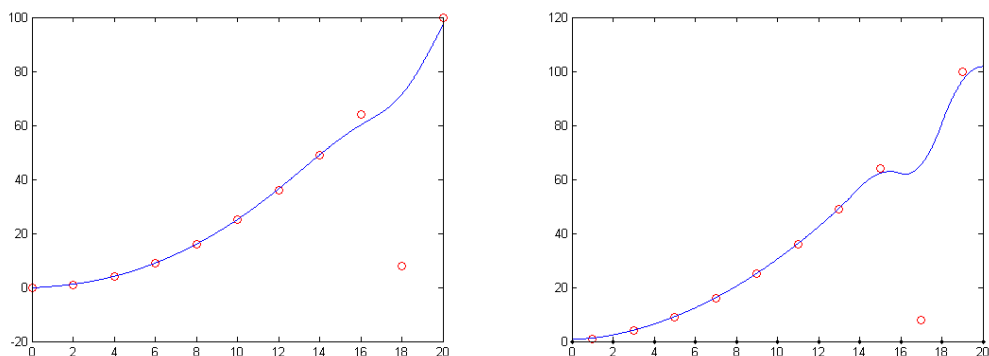
V následujících pěti příkladech se budeme zabývat aproximací funkce $f(x)$ o funkčních hodnotách $(\frac{x}{2})^2$ resp. $(\frac{x+1}{2})^2$. Interval i rozsah uzlů zůstávají zachováni. Váhy α_j jsou pro začátek zvoleny nízké o hodnotách 0.1.



Z těchto grafů lze odvodit, že pokud aproximovaná funkce $f(x)$ odpovídá mocinné funkci, u které by aproximace neměla činit žádný problém, potom i pro nízké váhy α_j dostáváme poměrně slušnou aproximaci, v kubickém případě však o něco lepší. V kvadratickém případě dochází u pravého okraje ke zvláštnímu zakřivení, což je způsobeno okrajovou podmínkou $s'_{N+1} = 0$. Vidíme, že v této situaci je u kubického splinu analogická podmínka $s''_{N+1} = 0$ přirozenější.

5. příklad

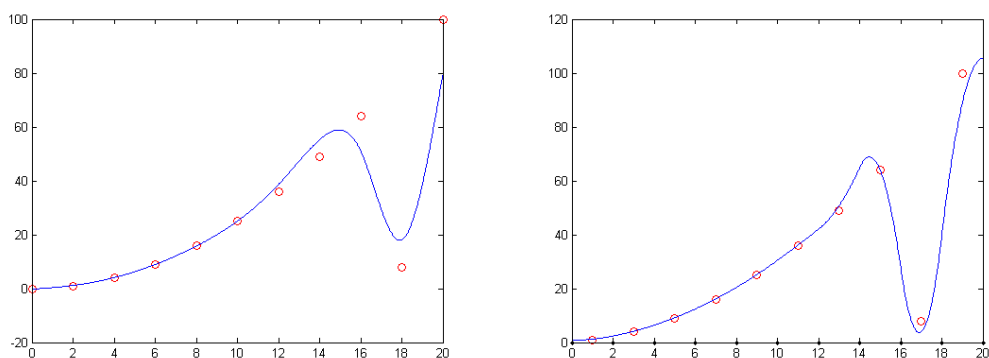
Oproti předešlému příkladu nyní otestujeme zhlazující vlastnost, kdy předposlední hodnotu porušíme výraznou chybou. Váha příslušná této hodnotě zůstane zachována na 0.1, ostatní váhy α_j však kvůli zpřesnění aproximace navýšíme na hodnotu 1.



Zde je viditelný rozdíl mezi kubickým a kvadratickým případem, kdy se stejná hodnota vah zdánlivě projevuje u kvadratického splinu intenzivněji. Opět však musíme vzít v potaz, že se jedná o aproximaci středními integrálními hodnotami, tudíž skutečná hodnota aproximované funkce se bude v této situaci nacházet o něco níže.

6. příklad

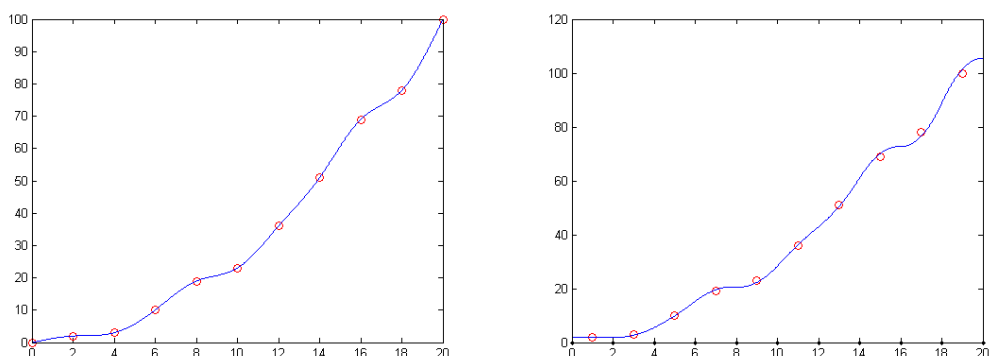
Stejně jako v předchozím případě je i zde daná hodnota vychýlena. Tentokrát však zkusíme příslušnou váhu posílit na hodnotu 5 a zároveň otestujeme, nakolik se projeví zhlazující vlastnost, pokud navýšíme váhu i u vedlejšího uzlu například na hodnotu 3.



Při porovnání kubického a kvadratického splinu je patrné, že stejný parametr α_j vede k tomu, že v kvadratickém případě je lokální maximum blízké bodu $x = 14$ oproti kubickému případu "ostřejší", neboli absolutní hodnota druhé derivace je zde větší. Na pravém okraji je opět zřetelný vliv okrajové podmínky $s'_{N+1} = 0$.

7. příklad

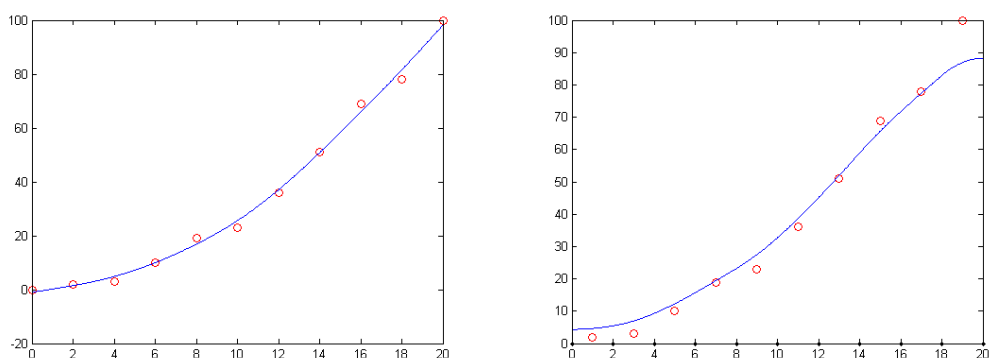
Nyní již porušíme většinu hodnot přidáním šumu a srovnáme, jak se výsledný spline chová pro odlišné váhy. Novými funkčními hodnotami f_j resp. \tilde{u}_j jsou 2, 3, 10, 19, 23, 36, 51, 69, 78 a 100 (v kubickém případě taktéž 0). Hodnota vah je nejprve zvolena 1000.



Při váhách o hodnotě 1000 je aproximace u obou typů splinů vysoce přesná a zároveň jsou obě křivky i přes šum dostatečně hladké.

8. příklad

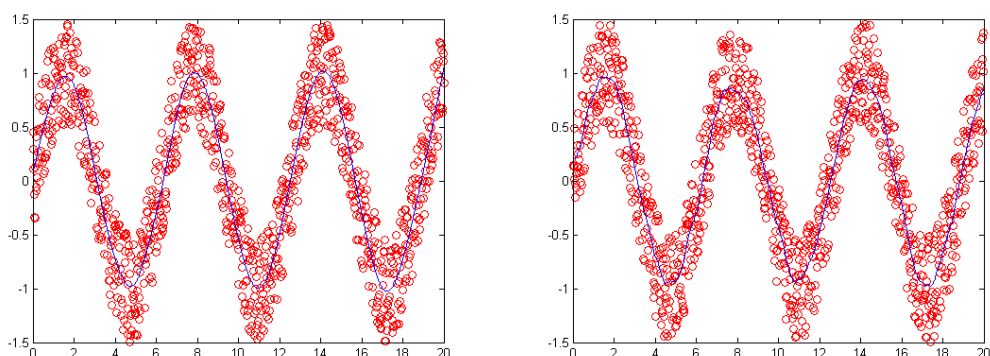
Pro porovnání zde nahradíme váhy α_j hodnotou 0.1, která by měla zapříčinit nižší přesnost aproximace.



V tomto příkladu jsou spliny v kvadratickém případě oproti případu kubickému "vyhlazenější", nicméně již je očividná neúplná přesnost aproximace v uzlech x_j , což se však při tak nízké hodnotě vah očekávalo. Podobně jako ve 4. příkladě, tedy v situaci s týmiž váhami, ale bez šumu, je i zde vidět vliv okrajové podmínky $s'_{N+1} = 0$.

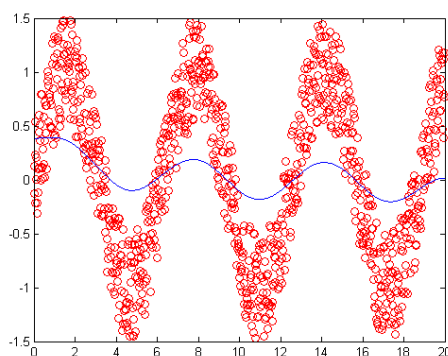
9. příklad

Ve zbylých případech se pracuje s daty již o větším rozsahu 1001 uzlů a váhy se u kubického a kvadratického splinu pro vzájemné vizuální přiblížení liší. Jako první je ukázán výstup při sinusových funkčních hodnotách s náhodným šumem daným funkcí generující náhodnou veličinu s rovnoměrným pravděpodobnostním rozdělením na intervalu $\langle 0,1 \rangle$ a následným snížením hodnot o 0.5. Hodnoty šumu se tedy pohybují mezi -0.5 a 0.5. Po prozkoumání výstupů pro různé váhy byly nejprve kvůli porovnatelným výsledkům zvoleny hodnoty vah α_j u kubického splinu rovny jedné a u kvadratického splinu rovny 1000.



Jak je znázorněno na dvojici obrázků, v obou případech spliny tvoří věrohodnou sinusovou křivku. Pro přibližně stejně kvalitní aproximaci však bylo zapotřebí navýšit hodnotu vah z kubického případu na kvadratický tisícinásobně, což je obrovský rozdíl. Výsledný kvadratický spline velmi závisí na volbě vah α_j .

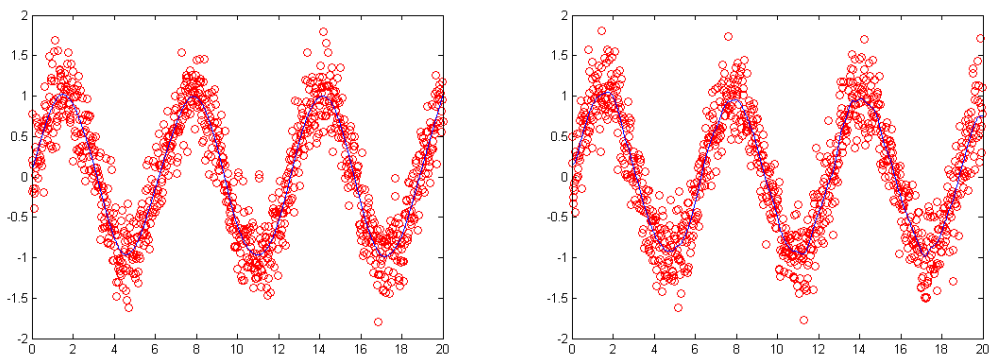
Na následujícím obrázku si u kvadratického splinu ukážeme efekt vah rovných deseti, což je nižší hodnota než v předchozím případě, přesto však stále vyšší než u splinu kubického.



Můžeme zhodnotit, že sinusový trend je sice pořád zřejmý, aproximace již však není příliš dobrá. Tento efekt je třeba mít na paměti. Taktéž se opět projeví okrajové podmínky $s'_0 = s'_{N+1} = 0$.

10. příklad

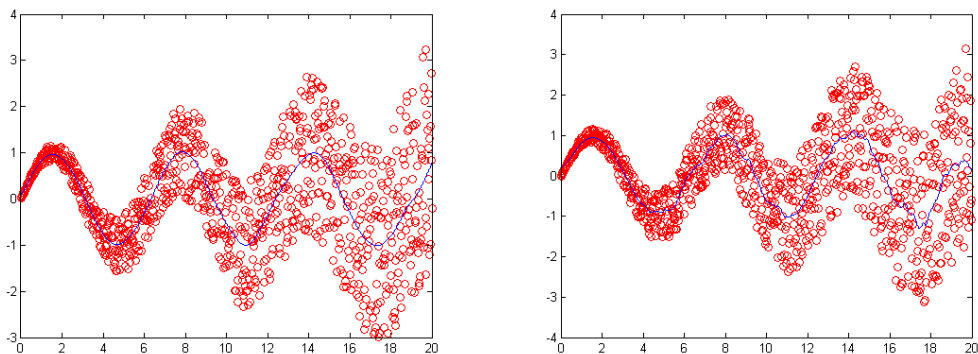
Oproti předchozímu případu je zde náhodný šum dán normálním pravděpodobnostním rozdělením. Aby však byl tento spline se splinem předchozím lépe porovnatelný, byly zajištěny stejné rozptyly šumu. Jelikož rozptyl rovnoměrného rozdělení na intervalu $(0,1)$ použitého výše je roven $\frac{1}{12}$ (viz [2], str. 33) a pro náhodnou veličinu X s normálním rozdělením $N(0,\sigma^2)$ platí $X = \sigma U$, kde U je náhodná veličina se standardizovaným normálním rozdělením, funkci generující náhodnou veličinu s tímto rozdělením stačí vynásobit směrodatnou odchylkou $\frac{1}{\sqrt{12}}$ (viz [2], str. 38). Váhy α_j byly opět zvoleny u kubického splinu rovny jedné a u kvadratického splinu rovny 1000.



Nyní stejně jako v předchozím příkladu jsou spliny ve tvaru téměř čisté sinusoidy, a to i přes delší chvosty šumu. Stále však zůstává potřeba vyšších vah v kvadratickém případě pro přibližně stejnou kvalitní aproximace.

11. příklad

Na následujících obrázcích náhodný šum roste společně s narůstající hodnotou uzlů, jejichž čtvrtinou (kvůli zmírnění rozptylu) je náhodný šum násoben. Váhy α_j jsou u kubického splinu rovny jedné a u kvadratického splinu rovny 1000. Nejprve je šum dán rovnoměrným pravděpodobnostním rozdělením.

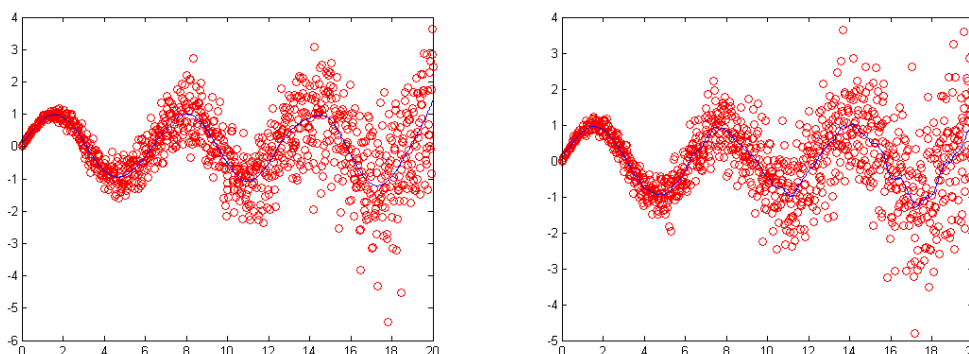


Podobně jako v 9. příkladu bylo i zde potřeba pro přibližně stejnou přesnost aproximace v uzlech x_j zvolit velmi rozdílné hodnoty vah α_j . Volba vah je tedy

pro tvar výsledného kvadratického splinu zcela zásadní.

12. příklad

Nyní je šum dán normálním pravděpodobnostním rozdělením, opět se stejným rozptylem jako u rozdělení rovnoměrného.



Přestože má v této situaci šum výrazně delší chvosty, příklad dává velmi podobné výsledky jako příklad předchozí.

Postupně jsme prozkoumali míru vlivu různě velkých vah na data o malém i velkém rozsahu, data se střídavými funkčními hodnotami, hodnotami druhých mocnin, hodnotami porušené výraznou chybou, sinusovými hodnotami či hodnotami zatížených náhodným šumem daném rovnoměrným nebo normálním pravděpodobnostním rozdělením.

Jak je zřejmé z prezentovaných grafických výsledků, zhlazující spliny jsou velmi užitečným nástrojem v oblasti numerické aproximace ve smyslu nejmenších čtverců. Výsledná křivka je výrazně hladká a daná data vyrovnává s lehce navolitelnou požadovanou přesností. I v případě dat se sinusovými hodnotami zatížených poměrně výrazným šumem je stále patrný sinusový trend. Z jednotlivých ukávek aproximace lze dále vyvodit, že váhy určující míru přesnosti se u kubického a kvadratického splinu projevují s odlišnou intenzitou; při stejných hodnotách vah je v kubickém případě zaručena vyšší přesnost. Velikost tohoto rozdílu závisí na typu dat.

Závěr

V této bakalářské práci jsme se zabývali tématem zhlazujících kubických a kvadratických splinů. Zavedli jsme pojmy s tímto tématem související, ukázali si možné volby doplňujících podmínek a pomocí Hilbertových prostorů a ortogonální projekce dokázali existenci a jednoznačnost interpolačních a návazně i zhlazujících splinů. Odvodili jsme si algoritmy konstrukce zhlazujícího kubického a kvadratického splinu, které jsme poté i implementovali v software Matlab. Testovací data jsme volili tak, aby se zřetelně projevil vliv různě velkých vah α_j . Zkoumali jsme jejich působení na data o malém i velkém rozsahu, data se střídavými funkčními hodnotami, hodnotami druhých mocnin, hodnotami porušené výraznou chybou, sinusovými hodnotami či hodnotami zatížených náhodným šumem daným rovnoměrným nebo normálním pravděpodobnostním rozdělením.

Naše zjištění mohou být v praktické aplikaci zásadně užitečná. Při případném dalším, navazujícím zkoumání chování splinů bych navrhovala zaměřit se na aplikaci zhlazujících splinů na skutečná data, případně také na zhlazující spliny ve více dimenzích.

Literatura

- [1] ADAMS, Robert A. *Sobolev spaces*. New York: Academic Press, 1975, xviii, Pure and applied mathematics (Academic Press), 65. ISBN 01-204-4150-0.
- [2] DUPAČ, Václav a HUŠKOVÁ, Marie. *Pravděpodobnost a matematická statistika*. 1. vyd. Praha: Karolinum, 2003, ISBN 80-246-0009-9.
- [3] GOLUB, Gene H. *Matrix computations*. 3rd ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, c1996, xxvii, Johns Hopkins studies in the mathematical sciences, ISBN 08-018-5414-8.
- [4] KOBZA, Jiří. *Splajny*. 1. vyd. Olomouc: Univerzita Palackého, fakulta přírodovědecká, 1993, ISBN 80-7067-265-X.
- [5] MICULA, Gheorghe a MICULA, Sanda . *Handbook of splines*. Boston: Kluwer Academic Publishers, c1999, xvi, Mathematics and its applications (Kluwer Academic Publishers), ISBN 07-923-5503-2.
- [6] NAJZAR, Karel. *Základy teorie splinů*. 1. vyd. Praha: Karolinum, 2006, ISBN 80-246-1287-9.
- [7] REKTORYS, Karel. *Přehled užití matematiky*. 3. nezm. vyd. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1973.
- [8] SEGETHOVÁ, Jitka. *Základy numerické matematiky*. 1. vyd. Praha: Karolinum, 1998, ISBN 80-7184-596-5.
- [9] ZAPLATÍLEK, Karel. *MATLAB pro začátečníky*. 2. vyd. ISBN 8073001756.