Ajuste de Splines a um Conjunto de Dados

Reginaldo J. Santos
Departamento de Matemática-ICEx
Universidade Federal de Minas Gerais
http://www.mat.ufmg.br/~regi
regi@mat.ufmg.br

7 de junho de 2001

Seja $\mathcal{C}^2(I)$ o espaço das funções que possuem a segunda derivada contínua no intervalo I. Dados os números reais $b_1 < b_2 < \ldots < b_n$, igualmente espaçados, isto é, $b_{k+1} - b_k = (b_n - b_1)/(n-1)$, para $k = 1, \ldots, n-1$. Seja $\mathcal{S}$ o subconjunto de $\mathcal{C}^2[b_1, b_n]$ formado pelas funções que são polinômios de grau menor ou igual a 3 em cada subintervalo $[b_k, b_{k+1}]$, para $k = 1, \ldots, n-1$. Este conjunto é chamado de **Splines (cúbicos) em** $[b_1, b_n]$ **com pontos de quebra** $b_2, \ldots, b_{n-1}$. O conjunto $\mathcal{S}$ é claramente um subespaço de $\mathcal{C}^2[b_1, b_n]$. Vamos mostrar que a dimensão de $\mathcal{S}$ é $n+2$.

Seja f um elemento genérico de $\mathcal{S}$. Então

$$f(x) = \begin{cases} a_0^{(1)} + a_1^{(1)}x + a_2^{(1)}x^2 + a_3^{(1)}x^3, & \text{se } b_1 \leq x < b_2, \\ \quad\vdots & \quad\vdots \\ a_0^{(n-1)} + a_1^{(n-1)}x + a_2^{(n-1)}x^2 + a_3^{(n-1)}x^3, & \text{se } b_{n-1} \leq x \leq b_n, \end{cases}$$

Assim a função f é uma combinação linear de $4(n-1) = 4n-4$ funções. Mas, os coeficientes não são independentes, pois precisamos usar o fato de que f, f' e f'' são contínuas nos pontos de quebra $b_2, \ldots, b_{n-1}$. Do fato de que f, f' e f'' são contínuas em b_2 obtemos as equações

$$\left\{ \begin{array}{rcrcrcrcrcrcrcrcl} a_0^{(1)} & + & a_1^{(1)}b_2 & + & a_2^{(1)}b_2^2 & + & a_3^{(1)}b_2^3 & - & a_0^{(2)} & - & a_1^{(2)}b_2 & - & a_2^{(2)}b_2^2 & - & a_3^{(2)}b_2^3 & = & 0 \\ & & a_1^{(1)} & + & 2a_2^{(1)}b_2 & + & 3a_3^{(1)}b_2^2 & & & - & a_1^{(2)} & - & 2a_2^{(2)}b_2 & - & 3a_3^{(2)}b_2^2 & = & 0 \\ & & & & 2a_2^{(1)} & + & 3a_3^{(1)}b_2 & & & & & - & 2a_2^{(2)} & - & 6a_3^{(2)}b_2 & = & 0 \end{array} \right.$$

Do fato de que f, f' e f'' são contínuas em b_3 obtemos as equações

$$\left\{ \begin{array}{rcrcrcrcrcrcrcrcl} a_0^{(2)} & + & a_1^{(2)}b_3 & + & a_2^{(2)}b_3^2 & + & a_3^{(2)}b_3^3 & - & a_0^{(3)} & - & a_1^{(3)}b_3 & - & a_2^{(3)}b_3^2 & - & a_3^{(3)}b_3^3 & = & 0 \\ & & a_1^{(2)} & + & 2a_2^{(2)}b_3 & + & 3a_3^{(2)}b_3^2 & & & - & a_1^{(3)} & - & 2a_2^{(3)}b_3 & - & 3a_3^{(3)}b_3^2 & = & 0 \\ & & & & 2a_2^{(2)} & + & 3a_3^{(2)}b_3 & & & & & - & 2a_2^{(3)} & - & 6a_3^{(3)}b_3 & = & 0 \end{array} \right.$$

Juntando os dois conjuntos de equações obtidos aos que podemos obter para os pontos de quebra restantes obtemos um sistema linear homogêneo triangular superior com $3(n-2) = 3n-6$ equações e $4n-4$ incógnitas. Como o sistema é triangular superior, então as equações são linearmente independentes e portanto teremos uma solução que depende de $(4n-4)-(3n-6) =$

$n+2$ parâmetros. E assim, podemos escrever todo spline de $\mathcal{S}$ como combinação linear de apenas $n+2$ funções. Isto mostra que a dimensão de $\mathcal{S}$ é menor ou igual a $n+2$.

Vamos agora exibir um conjunto de $n+2$ splines linearmente independentes o que vai nos permitir concluir que a dimensão de $\mathcal{S}$ é $n+2$. Para $k = 1, \ldots, n+2$, sejam

$$q_k(x) = \begin{cases} p_1(t), & \text{se } b_{k-3} \leq x < b_{k-2}, \\ p_2(t), & \text{se } b_{k-2} \leq x < b_{k-1}, \\ p_2(1-t), & \text{se } b_{k-1} \leq x < b_k, \\ p_1(1-t), & \text{se } b_k \leq x \leq b_{k+1}, \end{cases}$$

em que

$$\begin{aligned} p_1(t) &= \frac{1}{4} t^3, \\ p_2(t) &= 1 - \frac{3}{4}(1+t)(1-t)^2 \end{aligned}$$

e $t = (x - b_k)/h$ com $h = b_{k+1} - b_k = (b_n - b_1)/(n-1)$.

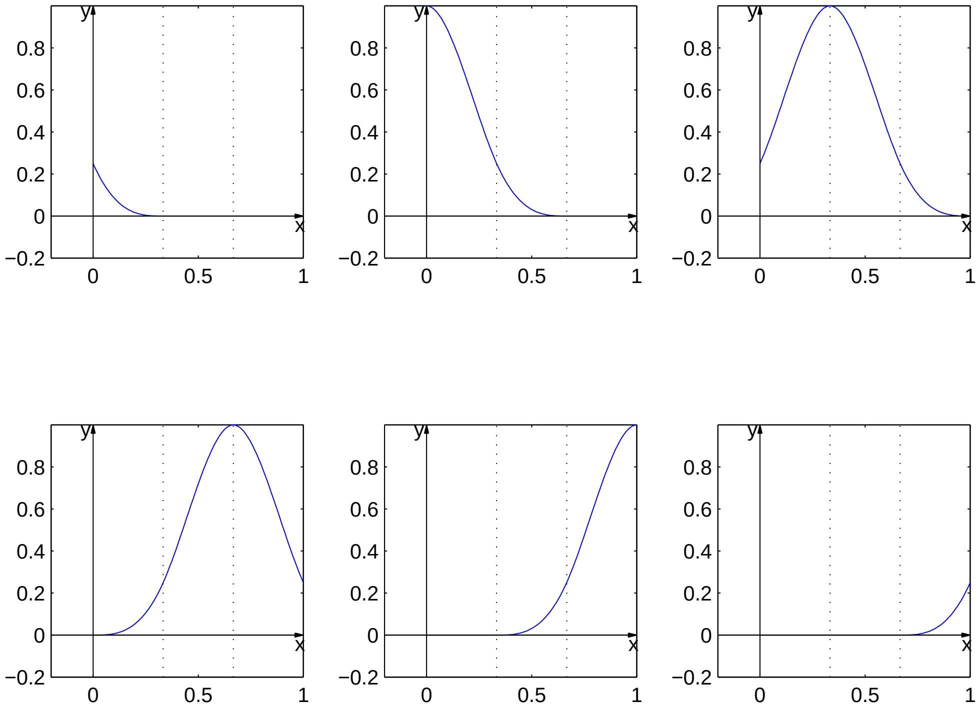

Figura 1: Funções q_k, para $k = 1, \ldots, 6$ no intervalo $[0, 1]$ dividido em 3 subintervalos

Vamos considerar a combinação linear nula dos splines q_k

$$\sum_{k=1}^{n+2} \alpha_k q_k(x) = 0. \tag{1}$$

Em cada intervalo $[b_k, b_{k+1}]$ somente as funções q_k, q_{k+1}, q_{k+2} e q_{k+3} podem ser diferentes de zero, e são dadas neste intervalo por

$$q_k(x) = p_1(1-t),$$

$$\begin{aligned} q_{k+1}(x) &= p_2(1-t), \\ q_{k+2}(x) &= p_2(t), \\ q_{k+3}(x) &= p_1(t) \end{aligned}$$

em que $t = (x - b_k)/h$ com $h = b_{k+1} - b_k = (b_n - b_1)/(n-1)$.

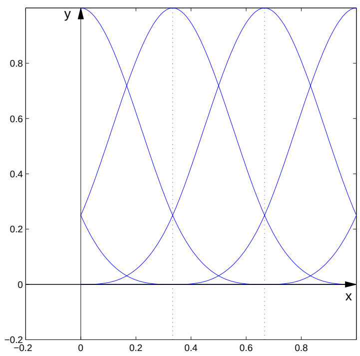

Figura 2: Funções q_k, para $k = 1, \ldots, 6$ no intervalo $[0, 1]$ dividido em 3 subintervalos

Derivando a equação (1) e substituindo nos pontos $x = b_1$ e $x = b_2$ obtemos as equações

$$\left\{ \begin{array}{rrrrrrrcl} -\frac{3}{4}\alpha_1 & & & + & \frac{3}{4}\alpha_3 & & & = & 0 \\ & - & \frac{3}{4}\alpha_2 & & & + & \frac{3}{4}\alpha_4 & = & 0 \end{array} \right.$$

Juntando com as equações correspondentes aos pontos $b_3, \ldots, b_n$ obtemos n equações que dão que os α_k's para k ímpar são iguais o mesmo acontecendo para os α_k's para k par.

Substituindo $x = b_1$ e $x = b_2$ na equação (1) obtemos as equações

$$\left\{ \begin{array}{rrrrrrrcl} \frac{1}{4}\alpha_1 & + & \alpha_2 & + & \frac{1}{4}\alpha_3 & & & = & 0 \\ & & \frac{1}{4}\alpha_2 & + & \alpha_3 & + & \frac{1}{4}\alpha_4 & = & 0 \end{array} \right.$$

Como $\alpha_3 = \alpha_1$ e $\alpha_4 = \alpha_2$, obtemos as equações

$$\left\{ \begin{array}{rrrcl} \frac{1}{2}\alpha_1 & + & \alpha_2 & = & 0 \\ \alpha_1 & + & \frac{1}{2}\alpha_2 & = & 0 \end{array} \right.$$

o que dá que $\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_{n+2} = 0$. Portanto as funções q_k, para $k = 1, \ldots, n+2$, são L.I. o que prova que o subespaço $\mathcal{S}$ tem dimensão $n + 2$ e que o conjunto $\{q_k \mid k = 1, \ldots, n+2\}$ é uma base de $\mathcal{S}$.

Assim cada função $f \in \mathcal{S}$ tem uma única representação como uma combinação linear

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n+2} c_j q_j(x).$$

Usando a base $\{q_k \mid k = 1, \ldots, n+2\}$ o problema de encontrar uma função de $\mathcal{S}$ que melhor se ajusta a um conjunto de pontos $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$ no sentido de quadrados mínimos toma a forma

$$\min ||AX - B||,$$

em que a matriz A é definida por $a_{ij} = q_j(x_i)$, o vetor B é dado por $b_i = y_i$ e X é o vetor dos coeficientes c_j, para $j = 1, \ldots, n+2$ e $i = 1, \ldots, m$.

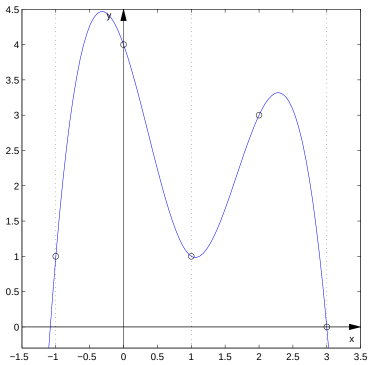

Figura 3: Ajuste dos dados do Exemplo 1 por splines dividindo-se o intervalo $[-1, 3]$ em dois subintervalos

Exemplo 1. Considere o seguinte conjunto de dados

x	-1	0	1	2	3
y	1	4	1	3	0

Dividindo-se o intervalo $[-1, 3]$ em dois subintervalos e usando a base $\{q_1, q_2, q_3, q_4, q_5\}$, o problema de encontrar um spline

$$f(x) = c_1q_1(x) + c_2q_2(x) + c_3q_3(x) + c_4q_4(x) + c_5q_5(x)$$

que melhor se ajusta ao conjunto de pontos $(-1, 1)$, $(0, 4)$, $(1, 1)$, $(2, 3)$, $(3, 0)$ no sentido de quadrados mínimos toma a forma

$$\min ||AX - B||,$$

em que a matriz A é definida por $a_{ij} = q_j(x_i)$, B por $b_j = y_j$ e X por $x_j = c_j$, para $i = 1, \ldots, 6$, $j = 1, \ldots, 5$. Neste caso

$$A = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 1 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ \frac{1}{32} & \frac{23}{32} & \frac{23}{32} & \frac{1}{32} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 1 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{32} & \frac{23}{32} & \frac{23}{32} & \frac{1}{32} \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 1 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{bmatrix},$$

Os coeficientes c_j obtidos resolvendo o problema de quadrados mínimos são

$$c_1 = -103/3, \quad c_2 = 95/9, \quad c_3 = -35/9, \quad c_4 = 9, \quad c_5 = -289/9$$

Exemplo 2. Vamos, agora, acrscentar o par $(1/2, 2)$ ao conjunto de dados do exemplo anterior obtendo o seguinte conjunto de dados

x	-1	0	$1/2$	1	2	3
y	1	4	2	1	3	0

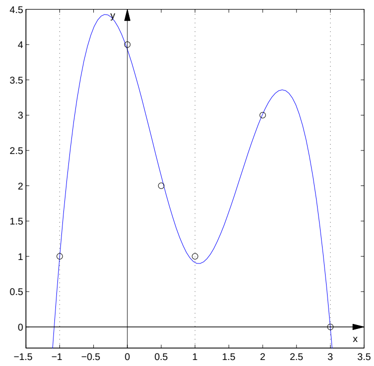

Figura 4: Ajuste dos dados do Exemplo 2 por splines dividindo-se o intervalo $[-1, 3]$ em dois subintervalos

Como no exemplo anterior, dividindo-se o intervalo $[-1, 3]$ em dois subintervalos e usando a base $\{q_1, q_2, q_3, q_4, q_5\}$, o problema de encontrar um spline

$$f(x) = c_1 q_1(x) + c_2 q_2(x) + c_3 q_3(x) + c_4 q_4(x) + c_5 q_5(x)$$

que melhor se ajusta ao conjunto de pontos $(-1, 1)$, $(0, 4)$, $(1/2, 2)$, $(1, 1)$, $(2, 3)$, $(3, 0)$ no sentido de quadrados mínimos toma a forma

$$\min ||AX - B||,$$

em que a matriz A é definida por $a_{ij} = q_j(x_i)$, B por $b_j = y_j$ e X por $x_j = c_j$, para $i = 1, \ldots, 6$, $j = 1, \ldots, 5$. Neste caso

$$A = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 1 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ \frac{1}{32} & \frac{23}{32} & \frac{23}{32} & \frac{1}{32} & 0 \\ \frac{1}{256} & \frac{121}{256} & \frac{235}{256} & \frac{27}{256} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 1 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{32} & \frac{23}{32} & \frac{23}{32} & \frac{1}{32} \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 1 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \\ 1 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{bmatrix},$$

Os coeficientes c_j obtidos resolvendo o problema de quadrados mínimos são

$$c_1 = -34.3558, \quad c_2 = 10.6063, \quad c_3 = -4.0436, \quad c_4 = 9.2060, \quad c_5 = -32.7890$$

Comandos do MATLAB:

`>>x=linspace(a,b)` cria um vetor `x` contendo 100 valores igualmente espaçados entre `a` e `b`.
`>>plot(x,f(x))` desenha as função `f(x)` ligando os pontos que $(x_i, f(x_i)$.

Comandos do pacote GAAL:

`>> qk=spline1(k,x,nbp,a,b)` calcula o spline q_k em `x` para um intervalo `[a,b]` dividido em `nbp-1` subintervalos.
`>> A=spline1(X,nbp,a,b)` cria a matriz $a_{ij} = q_j(X_i)$ para um intervalo `[a,b]` dividido em `nbp`-1 subintervalos.
`>> f=spline1(C,x,nbp,a,b)` calcula a soma $C_k q_k(x)$ com `k=1:nbp+2`

Referências

[1] Charles L. Lawson and Richard J. Hanson. *Solving Least Squares Problems*. SIAM, Philadelphia, 1995.

[2] Reginaldo J. Santos. *Geometria Analítica e Álgebra Linear*. Imprensa Universitária da UFMG, Belo Horizonte, 2000.