Splines 1-D

Ein **Spline von Grad $\boldsymbol{n}$** ist eine Funktion, die für eine gegebene Menge Knoten $P = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}$ über jedem offenen Intervall $(x_i, x_{i+1}), (x_n, \infty)$ und $(-\infty, x_1)$ einem Polynom vom Grad n entspricht und deren Ableitungen auf den Knoten $x_1, \dots, x_N$ bis zum Grad $n-1$ stetig sind.

Der Raum aller Funktionen, die diesen Spline-Eigenschaften entsprechen, wird als $\mathrm{SP}_{P,n}$ bezeichnet.

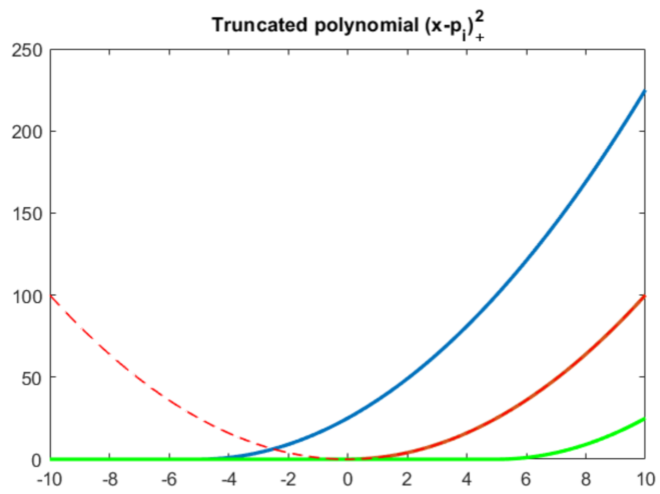
Splines 1-D

Ein **Spline von Grad n** ist eine Funktion, die für eine gegebene Menge Knoten $P = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}$ über jedem offenen Intervall $(x_i, x_{i+1}), (x_n, \infty)$ und $(-\infty, x_1)$ einem Polynom vom Grad n entspricht und deren Ableitungen auf den Knoten $x_1, \dots, x_N$ bis zum Grad $n-1$ stetig sind.

Der Raum aller Funktionen, die diesen Spline-Eigenschaften entsprechen, wird als $\mathrm{SP}_{P,n}$ bezeichnet.

Ein Beispiel für die Element von $\mathrm{SP}_{P,n}$ sind so genannte *verschränkte* (*truncated*) Polynome:

$$(x-p_i)_+^n = \begin{cases} (x-p_i)^n, \text{falls } \mathrm{x} \geq p_i, \\ 0, \text{sonst} \end{cases}$$



Splines 1-D

Ein **Spline von Grad $\boldsymbol{n}$** ist eine Funktion, die für eine gegebene Menge Knoten $P = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}$ über jedem offenen Intervall $(x_i, x_{i+1}), (x_n, \infty)$ und $(-\infty, x_1)$ einem Polynom vom Grad n entspricht und deren Ableitungen auf den Knoten $x_1, \dots, x_N$ bis zum Grad $n-1$ stetig sind.

Der Raum aller Funktionen, die diesen Spline-Eigenschaften entsprechen, wird als $\mathrm{SP}_{P,n}$ bezeichnet.

Ein Beispiel für die Element von $\mathrm{SP}_{P,n}$ sind so genannte *verschränkte* (*truncated*) Polynome:

$$(x - p_i)_+^n = \begin{cases} (x - p_i)^n, \text{falls x} \geq p_i, \\ 0, \text{sonst} \end{cases}$$

Die n-te Ableitung $S^{(n)}$ eines Splines aus $\mathrm{SP}_{P,n}$ führt zu einer Stufenfunktion mit Sprüngen an x_i.

Splines 1-D

Die Dimension von $\mathrm{SP}_{P,n}$ ist

$$\dim\left(\mathrm{SP}_{P,n}\right) = n + N + 1,$$

dies kann wie folgt interpretiert werden: Auf jedem Intervall (x_i, x_{i+1}) liegen $n + 1$ Freiheitsgrade. Durch die Ableitungsbedingung an den Knoten geht dort ein n Freiheitsgrade verloren:

$$\dim\left(\mathrm{SP}_{P,n}\right) = (N + 1)(n + 1) - nN = n + N + 1$$

Splines 1-D

Die Dimension von $SP_{P,n}$ ist

$$\dim\left(SP_{P,n}\right) = n + N + 1,$$

dies kann wie folgt interpretiert werden: Auf jedem Intervall (x_i, x_{i+1}) liegen $n + 1$ Freiheitsgrade. Durch die Ableitungsbedingung an den Knoten geht dort ein n Freiheitsgrade verloren:

$$\dim\left(SP_{P,n}\right) = (N + 1)(n + 1) - nN = n + N + 1$$

Ein Spline S kann daher wie folgt ausgedrückt werden:

$$S(x) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i (x - x_i)_+^n + \sum_{j=0}^{n} \lambda_{j+N+1} x^j$$

Die Gewichte $\lambda_1, \dots, \lambda_{n+N+1}$ werden über ein lineares Gleichungssystem bestimmt, ähnlich der Polynom-Interpolation / -approximation,

Splines 1-D

Die Dimension von $\mathrm{SP}_{P,n}$ ist

$$\dim(\mathrm{SP}_{P,n}) = n + N + 1,$$

dies kann wie folgt interpretiert werden: Auf jedem Intervall (x_i, x_{i+1}) liegen $n + 1$ Freiheitsgrade. Durch die Ableitungsbedingung an den Knoten geht dort ein n Freiheitsgrade verloren:

$$\dim(\mathrm{SP}_{P,n}) = (N + 1)(n + 1) - nN = n + N + 1$$

Ein Spline S kann daher wie folgt ausgedrückt werden:

$$S(x) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i (x - x_i)_+^n + \sum_{j=0}^{n} \lambda_{j+N+1} x^j$$

Die Gewichte $\lambda_1, \dots, \lambda_{n+N+1}$ werden über ein lineares Gleichungssystem bestimmt, ähnlich der Polynom-Interpolation / -approximation.

Zumeist liegen nur ein Messwert y_i pro Knoten x_i und damit nur N Randbedingungen vor. Um das o.g. Problem lösen zu können, werden $n + 1$ zusätzliche Randbedingungen benötigt. Im Fall von $n = 2m - 1$ könnten diese z.B. sein:

$$S^{(k)}(x_1) = S^{(k)}(x_N) = 0, k = m, \dots, n - 1$$

Splines, die diese Bedingung erfüllen werden als **natürliche Splines** bezeichnet, der zugehörige Raum $\mathrm{SPN}_{P,n}$.

Splines 1-D

Warum sind Splines so nützlich?

Liegen die Werte y_i an den Punkten x_i mit $i = 1, \ldots, N$ vor, so gilt für den Spline $S \in \mathrm{SPN}_{P,n}$, der

$$S(x_i) = y_i, i = 1, \ldots, N$$

interpoliert, dass er folgenden Ausdruck minimiert:

$$\min_{f \text{ interpolates } P} \int_{x_i}^{x_N} |f^n(x)|^2 dx$$

(Minimierung der n-ten Ableitung der Interpolationsfunktion).

Diese Splines werden auch als **kubische Splines** bezeichnet und kombinieren den einfachen Charakter von Polynominterpolation mit zusätzlicher Stabilität und geringerer Oszillation.

Splines 1-D

Warum sind Splines so nützlich?

Liegen die Werte y_i an den Punkten x_i mit $i = 1, \dots, N$ vor, so gilt für den Spline $S \in \mathrm{SPN}_{P,n}$, der

$$S(x_i) = y_i, i = 1, \dots, N$$

interpoliert, dass er folgenden Ausdruck minimiert:

$$\min_{f \text{ interpolates } P} \int_{x_i}^{x_N} |f^n(x)|^2 dx$$

(Minimierung der n-ten Ableitung der Interpolationsfunktion).

Diese Splines werden auch als **kubische Splines** bezeichnet und kombinieren den einfachen Charakter von Polynominterpolation mit zusätzlicher Stabilität und geringerer Oszillation.

Eigenschaften:

- $f(x)$ ist kontinuierlich und min. $n-1$-mal stetig differenzierbar
- Globaler Interpolator
- Extrapolation ist konzeptuell möglich (hier können dann aber Oszillationen auftreten)

Spline n-D / Radial Basis Functions (RBFs)

Wenn man annimmt, dass ein regelmäßiges Gitter von Knoten vorliegt, lässt sich der 1D-Ansatz zu Splines auf beliebige Dimensionen erweitern. Im Allgemeinen liegen Daten aber nicht auf einem solchen Gitter vor. Hier müssen andere Ansätze verwendet werden. Eine Option hier sind so genannte radiale Basisfunktionen (*radial basis functions* / RBF).

Liegen die Werte y_i an den Punkten $x_i \in \mathbb{R}^2$ mit $i = 1, \dots, N$ vor, dann kann man mit einem so genannten **thin plate spline** der Form

$$S(x) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \Phi(|x - x_i|)$$

mit $\Phi(\mathrm{r}) = \mathrm{r}^2 \ln(\mathrm{r})$, welche

$$S(x_i) = y_i, i = 1, \dots, N$$

interpoliert, ist die Interpolationsfunktion, welche folgenden Ausdruck minimiert:

$$\min_{f \text{ interpoliert } P} \int_D \left|\partial_{x_1}^2 f(x)^2\right| + \left|\partial_{x_1} \partial_{x_2} f(x)^2\right| + \left|\partial_{x_2}^2 f(x)^2\right| dx\,.$$

Spline n-D / Radial Basis Functions (RBFs)

Jede Funktion $\Phi\colon [0,\infty) \to \mathbb{R}$ die zu einer Funktion der Form $\phi(x) = \Phi(|\mathbf{x}|)$ führt, die nur von der Länge eines Vektors abhängt, kann als **radiale Basisfunktion** bezeichnet werden. Typischerweise sind weitere „gutartige“ Eigenschaften wie z.B. positive Definiertheit, gewünscht. Eine Approximationsfunktion basierend auf diesem Ansatz ist immer der Form

$$S(x) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \phi_i(x)$$

mit $\phi_i(x) = \Phi(|x - x_i|)$ und $S(x_i) = y_i, i = 1, \dots, N$.

Spline n-D / Radial Basis Functions (RBFs)

Jede Funktion $\Phi\colon [0,\infty) \to \mathbb{R}$ die zu einer Funktion der Form $\phi(x) = \Phi(|\mathbf{x}|)$ führt, die nur von der Länge eines Vektors abhängt, kann als **radiale Basisfunktion** bezeichnet werden. Typischerweise sind weitere „gutartige“ Eigenschaften wie z.B. positive Definiertheit, gewünscht. Eine Approximationsfunktion basierend auf diesem Ansatz ist immer der Form

$$S(x) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \phi_i(x)$$

mit $\phi_i(x) = \Phi(|x - x_i|)$ und $S(x_i) = y_i, i = 1, \ldots, N$.

Häufige verwendete positiv definite Basisfunktionen sind z.B.

$$\Phi(r) = e^{-a^2 r^2}, \text{(Gaussian)}$$

$$\Phi(r) = (r^2 + a^2)^{\frac{1}{2}}, \text{(Multiquadric)}$$

$$\Phi(r) = \frac{1}{r^2 + a^2}, \text{(Inverse Quadric)}$$

$$\Phi(\mathrm{r}) = \mathrm{r}^2 \ln(\mathrm{r}), \text{(thin plate)}$$

Andere mögliche RBFs (z.B. mit kompaktem Support) sind komplexer.

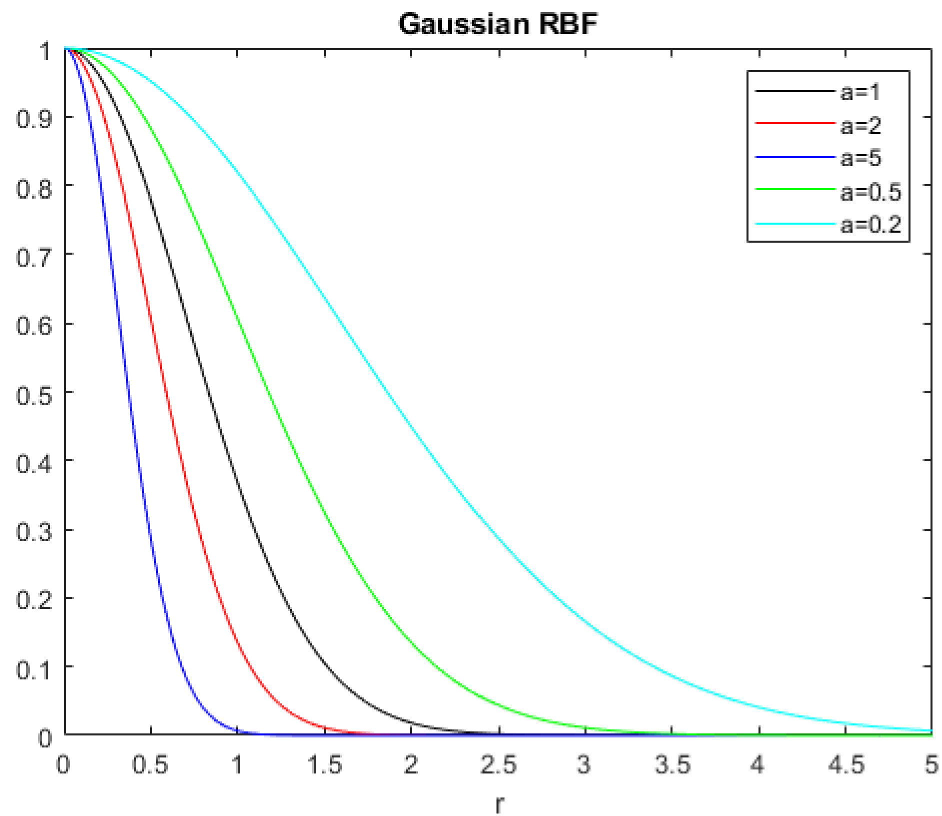
Spline n-D / Radial Basis Functions (RBFs)

Jede Funktion $\Phi\colon [0,\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ die zu einer Funktion der Form $\phi(x) = \Phi(|\mathbf{x}|)$ führt, die nur von der Länge … werden.
Typischer… …ertheit, gewünscht.
Eine Appr…

mit $\phi_i(x)$ …

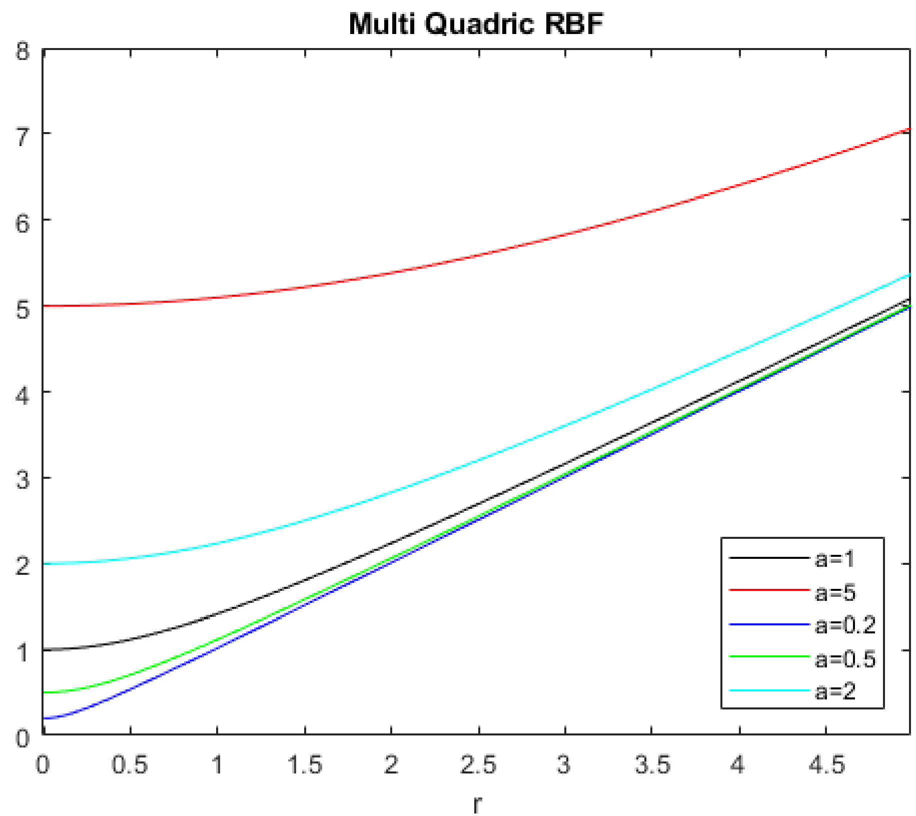
Häufige ve…

Andere m…



Spline n-D / Radial Basis Functions (RBFs)

Jede Funktion $\Phi: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ die zu einer Funktion der Form $\phi(x) = \Phi(|\mathbf{x}|)$ führt, die nur von der Länge eir … rden.
Typischerwei: … eit, gewünscht.
Eine Approxir



mit $\phi_i(x) = \Phi$

Häufige verw

Andere mögli

Spline n-D / Radial Basis Functions (RBFs)

Zur Bestimmung der notwendigen Koeffizienten $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ muss wieder ein lineares Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{M}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y}$$

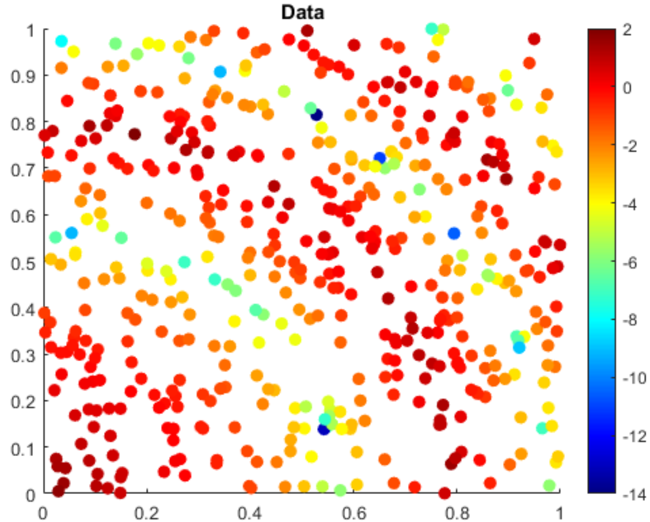
mit $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_0, \ldots, \lambda_m)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_N)$ und

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \Phi(0) & \Phi(|x_1 - x_2|) & \Phi(|x_1 - x_3|) & \cdots & \Phi(|x_1 - x_N|) \\ \Phi(|x_2 - x_1|) & \Phi(0) & \Phi(|x_2 - x_3|) & \cdots & x_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi(|x_N - x_1|) & \Phi(|x_N - x_2|) & \Phi(|x_N - x_3|) & \cdots & \Phi(0) \end{pmatrix}$$

Die (eindeutige) Lösbarkeit und damit die Qualität der Interpolation hängen sehr stark vom gewählten Typ der RBF ab.

Spline n-D / Radial Basis Functions (RBFs)

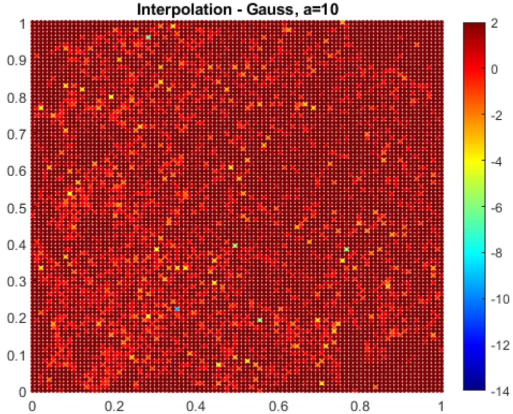
Zur Bestimmung der r … ler ein lineares
Gleichungssystem de …

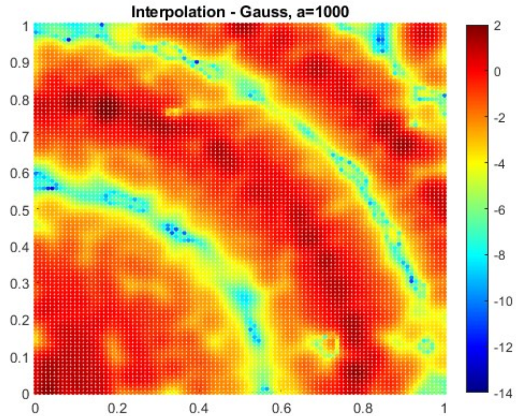


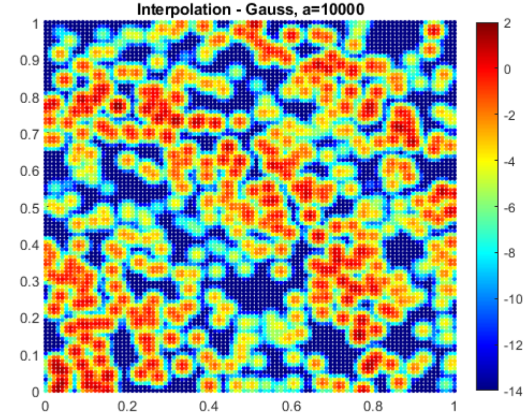
mit $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_0, \dots, \lambda_m)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{y}$ …

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \Phi((\cdots & \cdots {}_1 - x_N|) \\ \Phi(|x_2 - \cdots & \cdots x_2^m \\ \vdots & \vdots \\ \Phi(|x_N - \cdots & \cdots \Phi(0) \end{pmatrix}$$

Die (eindeutige) Lösbarkeit und damit die Qualität der Interpolaton hängen sehr stark







Spline n-D / Radial Basis Functions (RBFs)

Zur Bestimmung der notwendigen Koeffizienten $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ muss wieder ein lineares Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{M\lambda} = \mathbf{y}$$

mit $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_0, \dots, \lambda_m)^\mathrm{T}$, $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N)$ und

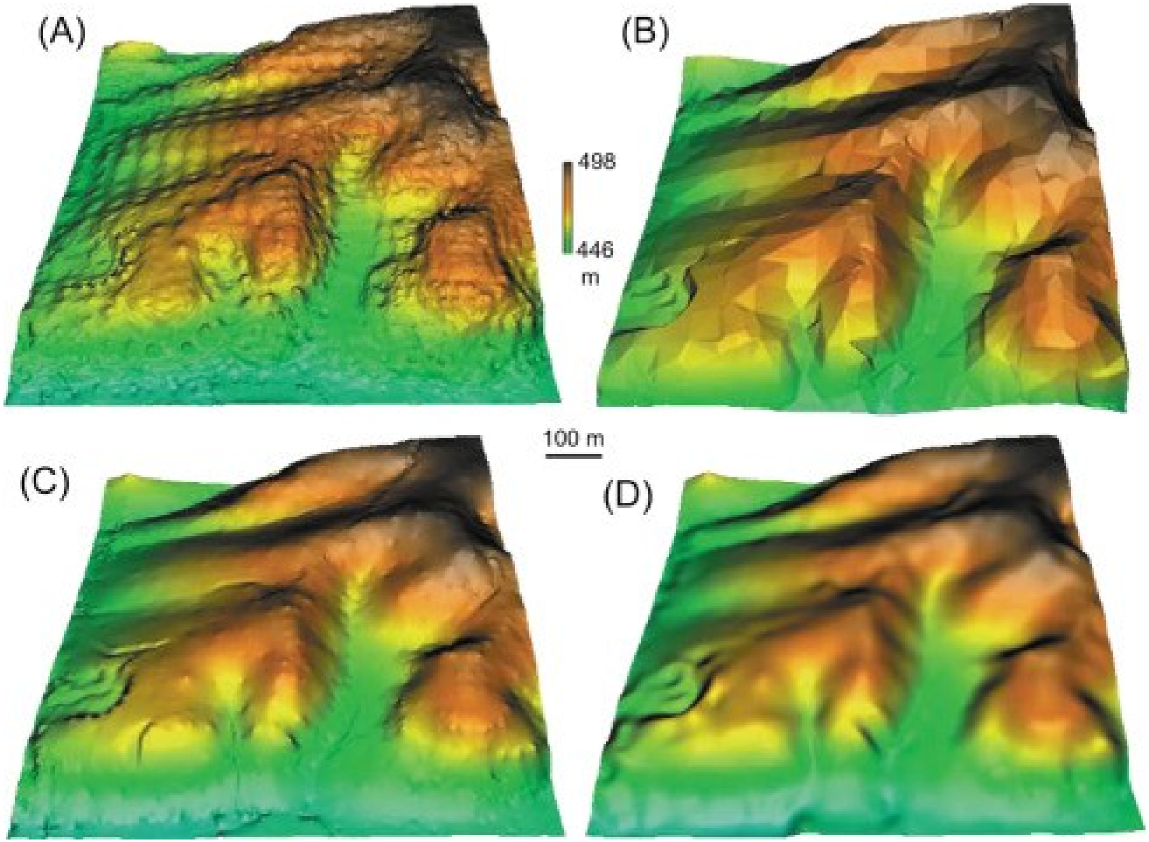
$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \Phi(0) & \Phi(|x_1 - x_2|) & \Phi(|x_1 - x_3|) & \cdots & \Phi(|x_1 - x_N|) \\ \Phi(|x_2 - x_1|) & \Phi(0) & \Phi(|x_2 - x_3|) & \cdots & x_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi(|x_N - x_1|) & \Phi(|x_N - x_2|) & \Phi(|x_N - x_3|) & \cdots & \Phi(0) \end{pmatrix}$$

Die (eindeutige) Lösbarkeit und damit die Qualität der Interpolaton hängen sehr stark vom gewählten Typ der RBF ab.

Eigenschaften:

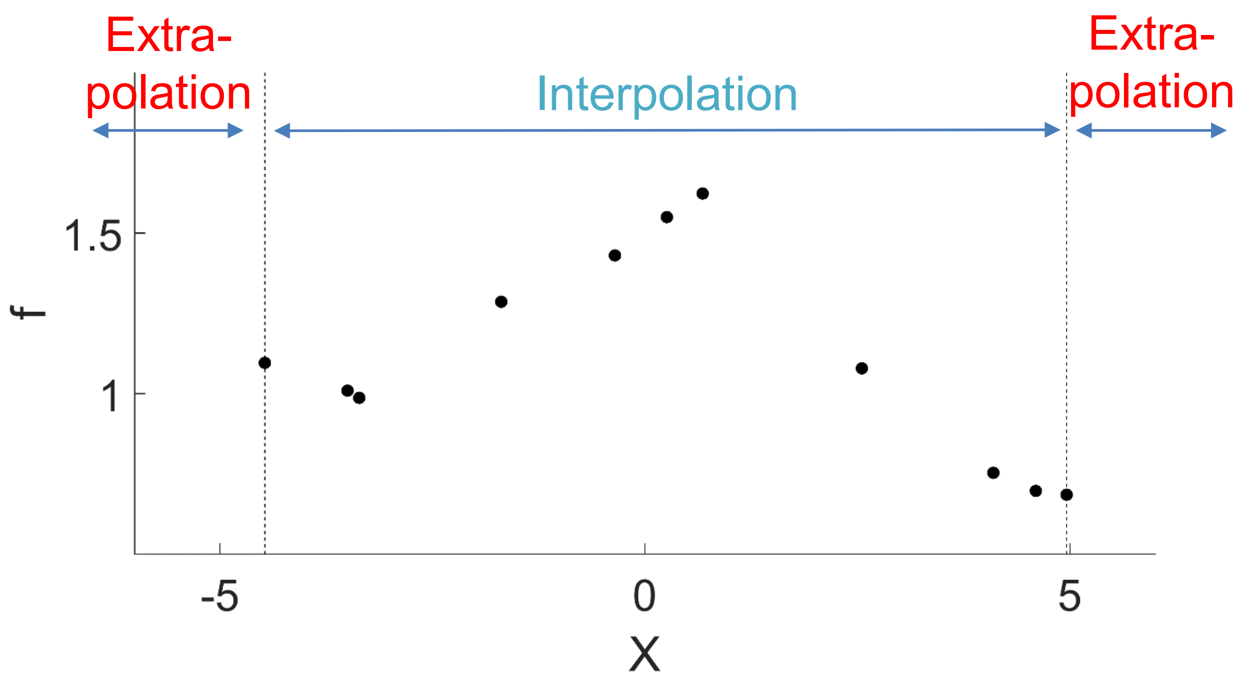
- $f(x)$ ist stetig und differenzierbar
- Globaler Interpolator
- Extrapolation ist konzeptionell möglich

Example IDW, Lin. Interp. on Triangulation, Splines



Interpolation vs Extrapolation

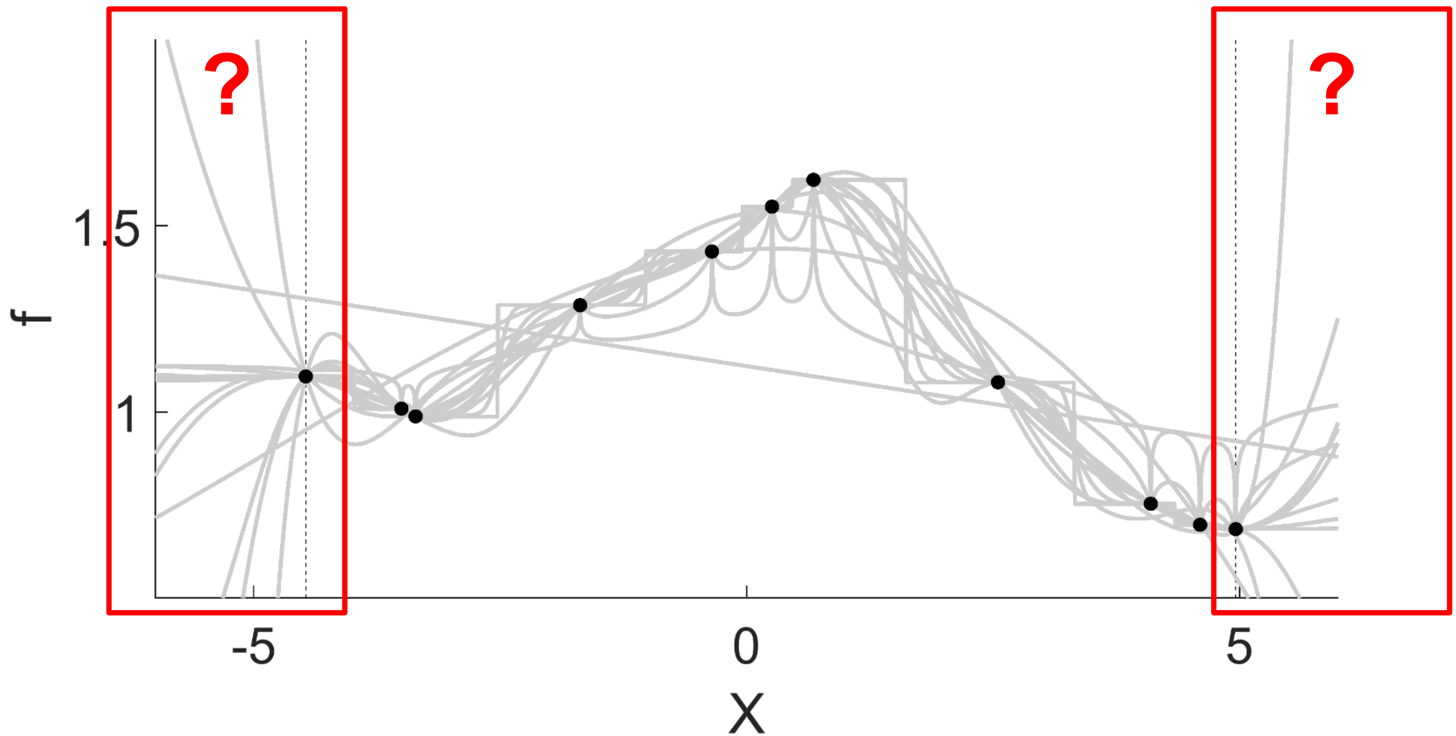
- **Inter**polation: Vorhersage **innerhalb** der Daten / **zwischen** den Datenpunkten
- **Extra**polation: Vorhersage **außerhalb** der Daten (zumeist außerhalb der konvexen Hülle)



Interpolation vs Extrapolation

Was ist das Problem bei Extrapolation?

- Vorhersage basierend auf ungenügender Datengrundlage
- **Vorhersage rein Modell-basiert, zumeist nicht plausibel**



Interpolation

Wie kann man entscheiden, welches Verfahren man nutzen sollte …

Folgende Fragen sollten berücksichtigt werden:

- Ist lokale oder globale Interpolation notwendig?
- Ist Extrapolation notwendig?
- Welche mathematischen Eigenschaften hat der Zielparameter?
- Gibt es Zusatzinformationen, welche durch die Interpolation berücksichtigt werden müssen?
- …