Kübik Spline'lar/Cubic Splines

- Kübik spline'lar önceki metodların aksine bütün data noktalarına tek bir fonksiyon/eğri uydurMAZ. Bunun yerine her çift nokta için ayrı ayrı üçüncü dereceden polinomlar uydurur.

- x_i noktasından geçen soldaki (yani x_i ve x_{i-1}den geçen) kübük spline $f_{i-1,i}(x)$ ile; x_i noktasından geçen sağdaki (yani x_i ve x_{i+1}den geçen) kübük spline $f_{i,i+1}(x)$ ile gösterilir.

- Normalde iki noktadan bir doğru da geçilebilir, doğru yerine 3. dereceden bir polinom uydurmamızın sebebi geçiş noktalarında daha yumuşak bir eğri birleşmesini sağlamaktır.

Kübik Spline'lar/Cubic Splines

- Bu kübik spline'ları/üçüncü dereceden polinomları bulmak için üç grup şart/özellik kullanıyoruz.
- (i) Kübik spline'lar, (x_i, y_i) lerden geçmeli
- (ii) Bağlantı noktasında sağdaki ve soldaki kübik spline'lar için birinci dereceden türevler eşit olmalı.
- (iıı) Bağlantı noktasında sağdaki ve soldaki kübik spline'lar için ikiinci dereceden türevler eşit olmalı.

Kübik Spline'lar/Cubic Splines

- Toplam n nokta için $n-1$ tane kübik spline olur

$$f_{1,2}(x),\ f_{2,3}(x), \ldots.., f_{n-1,n}(x)$$

- Önce bağlantı noktalarında ikinci türevlerin eşit olma yani (iii) numaralı şartı kullanalım, $f''_{i-1,i}(x_i) = f''_{i,i+1}(x_i) = k_i$ olsun

- Kübik spline'ın ikinci türevi birinci dereceden yani doğru olur; bu doğru (x_i, k_i) ve (x_{i+1}, k_{i+1}) noktalarından geçecektir ve şu şekilde yazılabilir.

$$f''_{i,i+1}(x) = k_i l_i(x) + k_{i+1} l_{i+1}(x)$$

$$l_i(x) = \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} \qquad l_{i+1}(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Kübik Spline'lar/Cubic Splines

- Kübik spline'ı bulmak için iki kere integral alalım

$$f_{i,i+1} = \frac{k_i(x - x_{i+1})^3 - k_{i+1}(x - x_x)^3}{6(x_i - x_{i+1})} + A(x - x_{i+1}) - B(x - x_i),$$

- Burada A ve B'yi bulmak için (i). şartı yani kübik spline'ların (x_i, y_i)'den geçme şartını kullanalım.

$$f_{i,i+1}(x_i) = y_i \rightarrow \frac{k_i(x_i - x_{i+1})^3}{6(x_i - x_{i+1})} + A(x_i - x_{i+1}) = y_i$$

$$A = \frac{y_i}{x_i - x_{i+1}} - \frac{k_i}{6}(x_i - x_{i+1}).$$

Benzer şekilde x_{i+1} koyarak $y_i$ye eşitleriz ve B'yi buluruz

$$B = \frac{y_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} - \frac{k_{i+1}}{6}(x_i - x_{i+1})$$

Kübik Spline'lar/Cubic Splines

- Bu bulunan A ve B değerleri kübik spline'da yerine konur:

$$f_{i,i+1}(x) = \frac{k_i}{6}[\frac{(x-x_{i+1})^3}{x_i - x_{i+1}} - (x-x_{i+1})(x_i - x_{i+1})] -$$

$$\frac{k_{i+1}}{6}[\frac{(x-x_i)^3}{x_i - x_{i+1}} - (x-x_i)(x_i - x_{i+1})] + \frac{y_i(x-x_{i+1}) - y_{i+1}(x-x_i)}{x_i - x_{i+1}}$$

Kübik Spline'lar/Cubic Splines

- Son olarak $k_i$leri bulmak için (ii) numaralı şart yani bağlantı noktalarında birinci türevin eşit olma şartı kullanılır $f'_{i-1,i}(x_i) = f'_{i,i+1}(x_i)$

- Birinci türevler alınıp eşitlenirse şu denklemlere ulaşılır

$$k_{i-1}(x_{i-1} - x_i) + 2k_i(x_{i-1} - x_{i+1}) + k_{i+1}(x_i - x_{i+1}) =$$

$$6\left(\frac{y_{i-1} - y_i}{x_{i-1} - x_i} - \frac{y_i - y_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right), \qquad i = 2, 3..., n-1$$

- Eğer x'ler arasındaki aralıklar eşitse bu denklemler biraz daha sadeleşir

$$k_{i-1} + 4k_i + k_{i+1} = \frac{6}{h^2}(y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}), \qquad i = 2, 3, ..., n-1$$

- Uç noktalarda sol ve sağdaki kübik spline'lar tanımlı olmadığı için $k_1 = k_n = 0$ olarak alınır.

En küçük kareler ile Eğri Uydurma/Least-Squares Fit

- En küçük kareler ile eğri uydurmada uyduracağımız fonksiyon polinom olmak zorunda değil ve genel olarak m tane parametreye bağlı bir genel fonksiyon olabilir: $f(x) = f(x; a_1, a_2, ..., a_m)$

- Verilen data'ya uygun olan $a_1, a_2, ..., a_m$ parametreleri aşağıdaki hata fonksiyonunu minimize ederek bulunabilir

$$S(a_1, a_2, ..., a_m) = \sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i; a_1, a_2, ..., a_m)]^2$$

- Bu minimizasyon problemi türevler alınıp sıfıra eşitlenerek çözülebilir:

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, \qquad k = 1, 2, ..., m$$

Doğrusal Parametreli Fonksiyonlar için En Kücük Kareler ile Eğri Uydurma

- Bu özel durum için bilinmeyen a parametreleri sadece doğrusal çarpanlar olarak yer alırlar

$$f(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + ... + a_m f_m(x) = \sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x)$$

$$(f_j(x) : baz\ fonksiyonları)$$

$$S = \sum_{i=1}^{n} [y_i - \sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i)]^2 \qquad \frac{\partial S}{\partial a_k} = 0$$

$$\sum_{j=1}^{m} [\sum_{i=1}^{n} f_j(x_i) f_k(x_i)] a_j = \sum_{i=1}^{n} f_k(x_i) y_i, \qquad k = 1, 2, ..., m$$

Doğrusal Parametreli Fonksiyonlar için En Kücük Kareler ile Eğri Uydurma

- Matris olarak yazarsak:

$$A\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}$$

$$A_{jk} = \sum_{i=1}^{n} f_j(x_i) f_k(x_i) \qquad b_k = \sum_{i=1}^{n} f_k(x_i) y_i$$

En Kücük Kareler ile Polinom Uydurma

- Bir önceki örnekte $f$ler yerine polinom kullanırsak $f(x) = \sum_{j=1}^{m} a_j x^{j-1}$

$$f_j(x) = x^{j-1}, \qquad j = 1, 2, ..., m$$

- Yukardaki çözümü bu polinomlar için kullanırsak

$$A_{kj} = \sum_{i=1}^{n} {x_i}^{j+k-2} \qquad b_k = \sum_{i=1}^{n} {x_i}^{k-1} y_i$$

- Bu A ve $\boldsymbol{b}$ değerleri için a parametreli rahatça bulunabilir.

En küçük Kareler ile Doğru Uydurma/Lineer Regresyon

- Bu basit durumda $f(x) = a + bx$, yani 1. derece bir polinom

- Bir önceki çözüm sadece ikinci derece için kullanılır, veya direkt olarak hata fonksiyonu bu $ax + b$ için a, b'ye göre minimze edilir.

$$S(a, b) = \sum_{i=1}^{n} [y_i - a - bx_i]^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} -2(y_i - a - bx_i) = 0, \qquad \frac{\partial S}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} -2(y_i - a - bx_i) = 0 \quad yields;$$

$$a + b\bar{x} = \bar{y}, \qquad a\bar{x} + (\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} {x_i}^2)b = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

$$b = \frac{\sum y_i(x_i - \bar{x})}{\sum x_i(x_i - \bar{x})} \qquad a = \bar{y} - \bar{x}b$$