Интерполяция

Цыбулин Иван (tsybulin@crec.mipt.ru)

Приближение функций

Задача интерполяции состоит в том, чтобы приблизить заданную функцию $f(x)$ другой функцией $P(x)$ из некоторого класса, так, чтобы в заданных узлах x_k они совпадали

$$f(x_k) = P(x_k)$$

Виды интерполяции

Интерполяция может быть

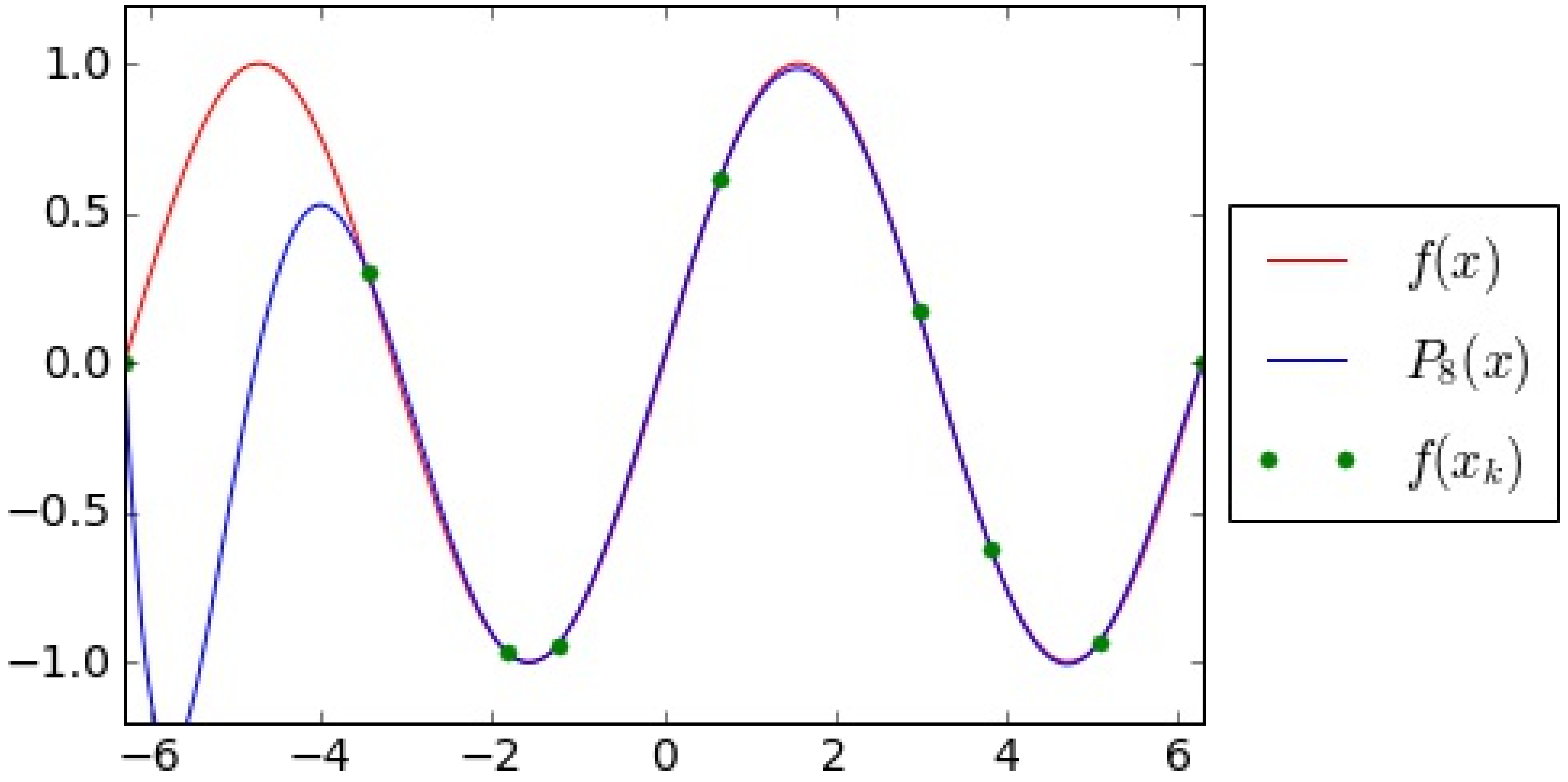
- алгебраической: $P(x)$ — многочлен некоторой степени
- тригонометрической: $P(x)$ — тригонометрический многочлен
$$P(x) = a_0 + a_1 \cos x + b_1 \sin x + a_2 \cos 2x + b_2 \sin 2x \ldots$$
- сплайновой: этот вид будет рассмотрен позже.

Сведение к СЛАУ

$$
\begin{aligned}
P(x_1) &= c_0 + c_1 x_1 + c_2 x_1^2 + \dots = f(x_1) \\
P(x_2) &= c_0 + c_1 x_2 + c_2 x_2^2 + \dots = f(x_2) \\
&\vdots \\
P(x_n) &= c_0 + c_1 x_n + c_2 x_n^2 + \dots = f(x_n)
\end{aligned}
$$

Неизвестными параметрами интерполирующего многочлена $P(x)$ являются его коэффициенты.
Относительно них система является линейной и разрешима, если $\deg P = n - 1$

Show code



Способы построение интерполяционного многочлена

Существуют способы построение интерполяционного многочлена, не требующие решения системы линейных уравнений

- Интерполяционный многочлен в форме Ньютона
- Интерполяционный многочлен в форме Лагранжа

При этом интерполяционный многочлен остается одним и тем же (он единственный!), изменяется лишь форма его представления.

Интерполяционный многочлен в форме Ньютона

Интерполяционный многочлен в форме Ньютона имеет вид

$$P_{n-1}(x) = f(x_1) + f(x_1, x_2)(x - x_1) + f(x_1, x_2, x_3)(x - x_1)(x - x_2) + \dots$$

$$\dots + f(x_1, \dots, x_n)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})$$

Величины $f(x_1, x_2), f(x_1, x_2, x_3), \dots$ называются *разделенными разностями*.

Разделенные разности

Порядком разделенной разности $f(x_i, \ldots, x_{i+k})$ называется число аргументов без единицы (k).
Разделенные разности нулевого порядка $f(x_i)$ совпадают со значениями функции $f(x_i)$
(путаницы в обозначениях нет)

Разделенная разность порядка $k+1$ определяется через разделенные разности порядка k:

$$f({\color{red}x_i}, \ldots, {\color{blue}x_{i+k+1}}) = \frac{f(x_{i+1}, \ldots, {\color{blue}x_{i+k+1}}) - f({\color{red}x_i}, \ldots, x_{i+k})}{{\color{blue}x_{i+k+1}} - {\color{red}x_i}}$$

Разделенные разности удобно вычислять в таблице

x_i	$f(x_i)$	$f(x_i, x_{i+1})$	$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$
1	1		
		2	
2	3		-1
		-1	
4	1		

$$P(x) = 1 + 2(x-1) - 1(x-1)(x-2)$$

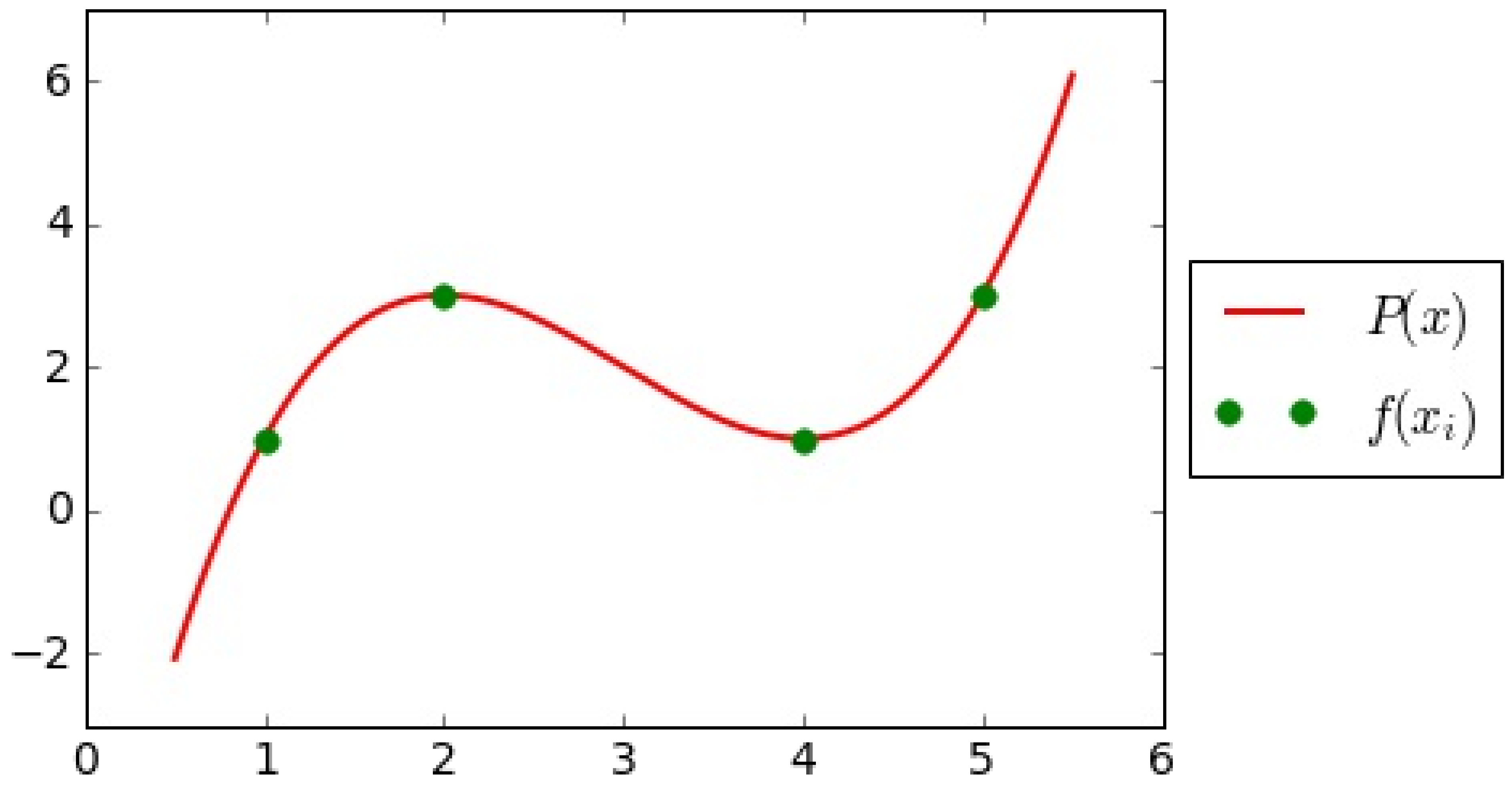
```python
def divided_differences(x, f):
    n = len(x);
    F = np.empty((n, n))
    F[:, 0] = f
    for k in range(1, n):
        F[0:n-k, k] = (F[1:n-k+1, k-1] - F[0:n-k, k-1]) / (x[k:] - x[:-k])
    return F # F[i, k] = f(x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+k})

x = np.array([1, 2, 4, 5])
f = np.array([1, 3, 1, 3])
F = divided_differences(x, f)
print(F)
```

```
[[  1.00000000e+000   2.00000000e+000  -1.00000000e+000   5.00000000e-001]
 [  3.00000000e+000  -1.00000000e+000   1.00000000e+000   1.73383010e-316]
 [  1.00000000e+000   2.00000000e+000   6.91364661e-310   0.00000000e+000]
 [  3.00000000e+000   6.91364663e-310   0.00000000e+000   0.00000000e+000]]
```

```
def evaluate(x, F, x0):
    n = len(x);
    P = 0;
    xprod = 1.0 # (x - x1) (x - x2) ... (x - xi)
    for i in range(n):
        P += F[0, i] * xprod
        xprod *= (x0 - x[i])
    return P

X = np.linspace(0.5, 5.5, 1000)
plt.plot(X, evaluate(x, F, X), 'r', lw=2, label='$P(x)$')
plt.plot(x, f, 'g.', ms=15, label='$f(x_i)$')
plt.legend(loc='center left', bbox_to_anchor=(1, .5)); plt.show()
```



Интерполяционные многочлены в форме Лагранжа

Рассмотрим вспомогательную задачу. Построим интерполяционный многочлен для функции

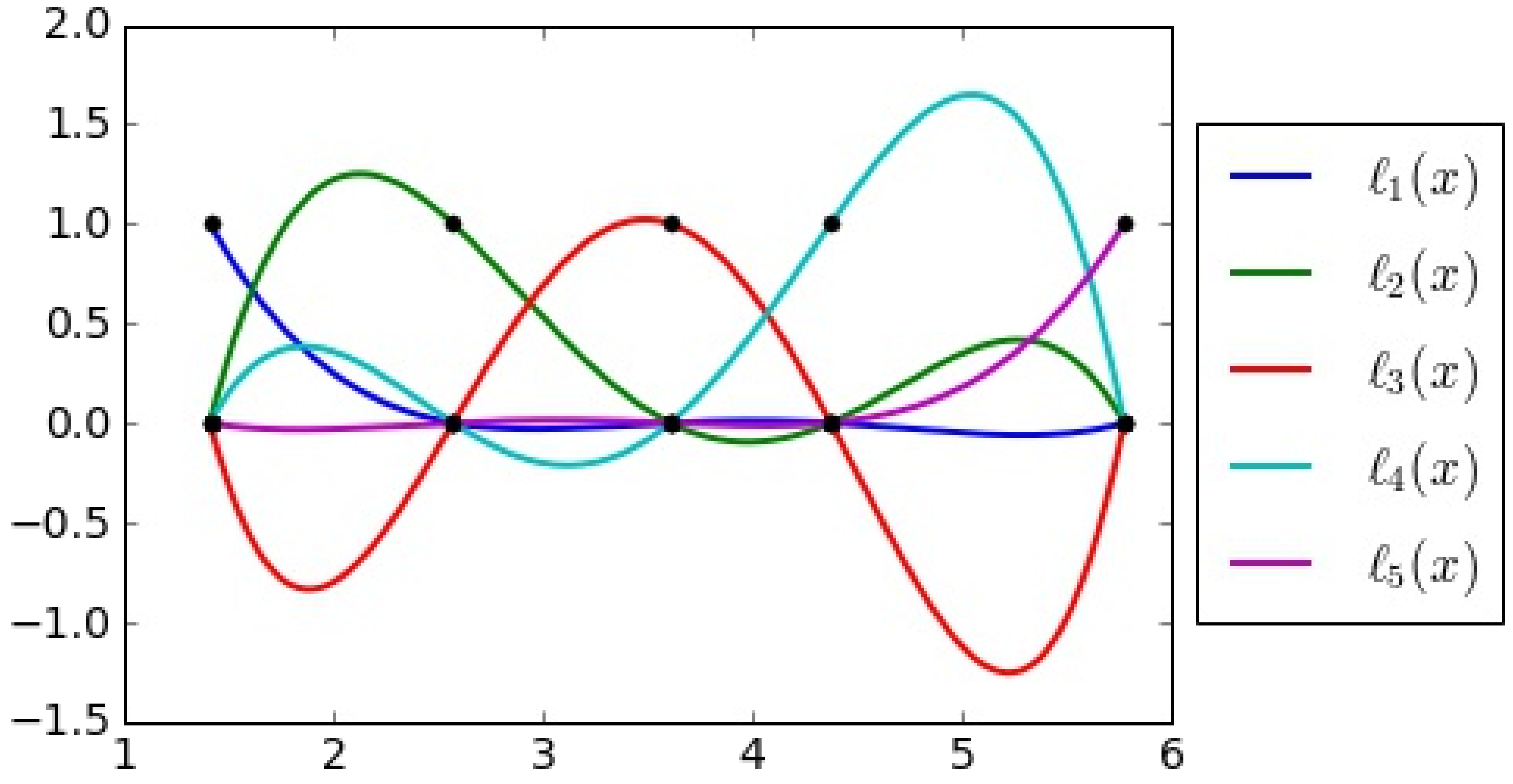
$$f_k(x_i) = \delta_{ik} = \begin{cases} 1, & x_i = x_k \\ 0, & x_i \neq x_k \end{cases}$$

Этот многочлен имеет вид

$$\ell_k(x) = \frac{(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\cdots(x - x_n)}{(x_k - x_1)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)} = \prod_{i \neq k} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

Данный многочлен называется *базисным интерполяционным многочленом Лагранжа*

```
n = 5
x = np.cumsum(0.5 + np.random.rand(n))
X = np.linspace(x[0], x[-1], 1000)
for i in range(n):
    v = np.eye(n)[i]
    F = divided_differences(x, v)
    plt.plot(X, evaluate(x, F, X), label='$\ell_{%d}(x)$' % (i+1), lw=2)
    plt.plot(x, v, 'k.', ms=10)
plt.legend(loc='center left', bbox_to_anchor=(1, .5)); plt.show()
```



Интерполянт в форме Лагранжа

После построения базисных интерполяционных многочленов интерполянт записывается особенно просто

$$P(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k)\ell_k(x)$$

Хорошо видно, что от x зависят лишь базисные многочлены, а от f — лишь коэффициенты разложения по этим многочленам.

Ошибка интерполяции

Важный вопрос — насколько $P(x)$ и $f(x)$ различаются? Очевидно, что в узлах x_k они совпадают, но что происходит в промежутках?

Верна теорема

$$|f(x) - P(x)| \leqslant \frac{|f^{(n)}(\xi)|}{n!} |\omega(x)|,$$

где

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n).$$

$$\varepsilon_{\text{метод}} = |f(x) - P(x)| \leqslant \frac{|f^{(n)}(\xi)|}{n!}|\omega(x)|,$$

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_n),$$

Первый сомножитель можно оценить как $\frac{M_n}{n!}$, то есть величиной, зависящей лишь от функции, а второй сомножитель $|\omega(x)|$ зависит лишь от расположения узлов, но не от самой функции.

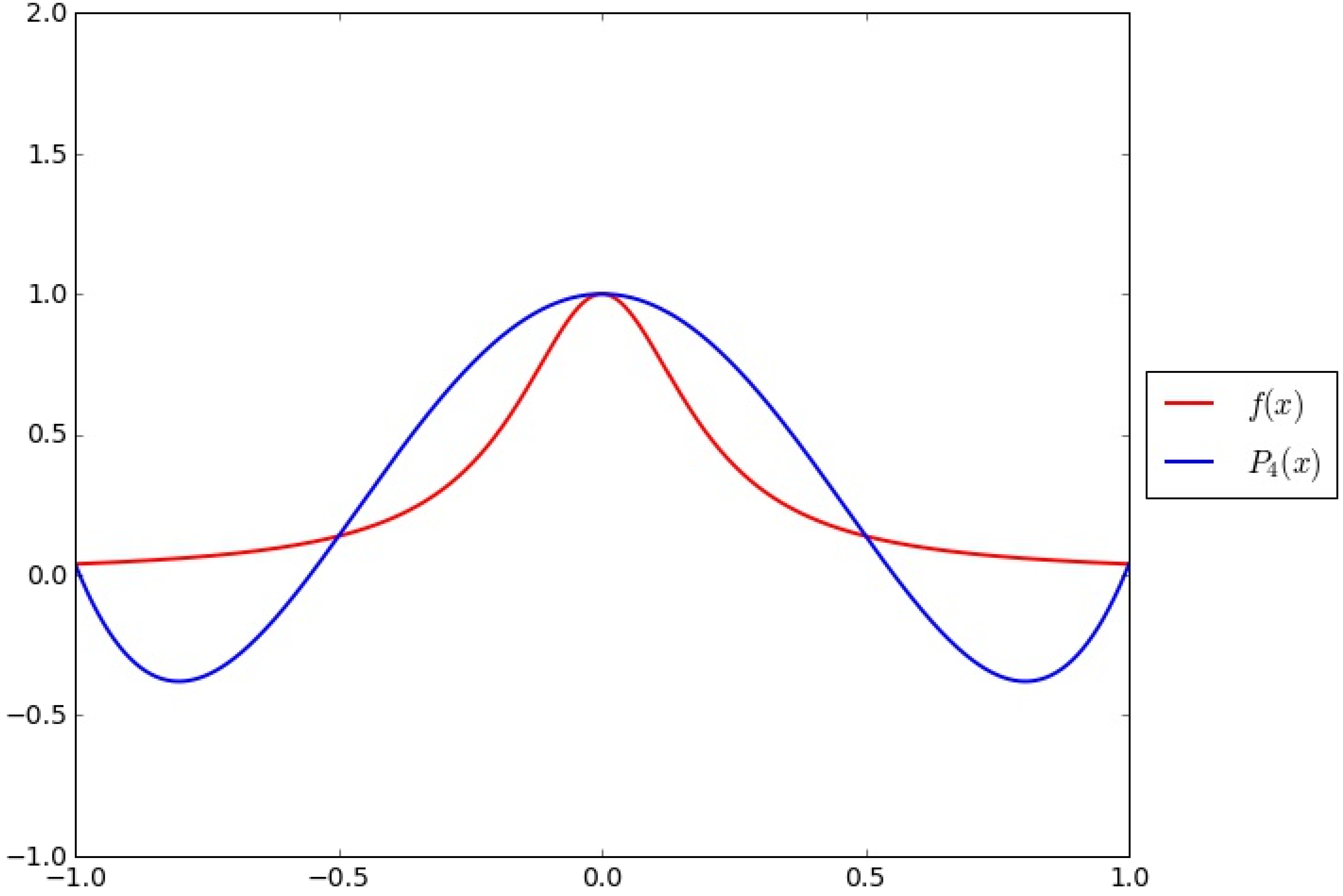
Феномен Рунге

Оказывается, что увеличение количества узлов интерполяции не гарантирует улучшения приближения функции. Пример

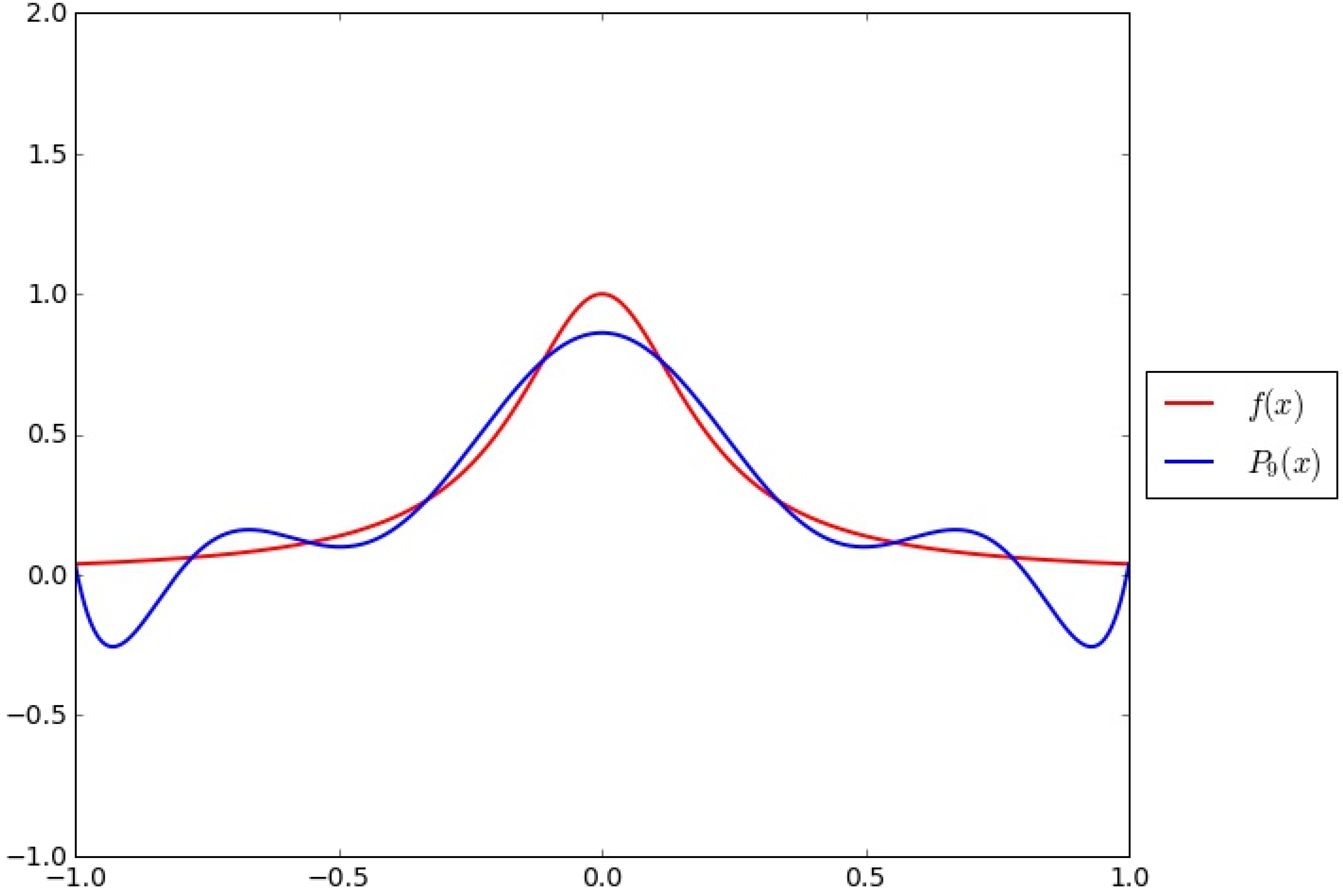
$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}, \qquad x \in [-1, 1]$$

Будем проводить интерполяцию этой функции на равномерной сетке с числом узлов $n = 5, 10, 15, 20$

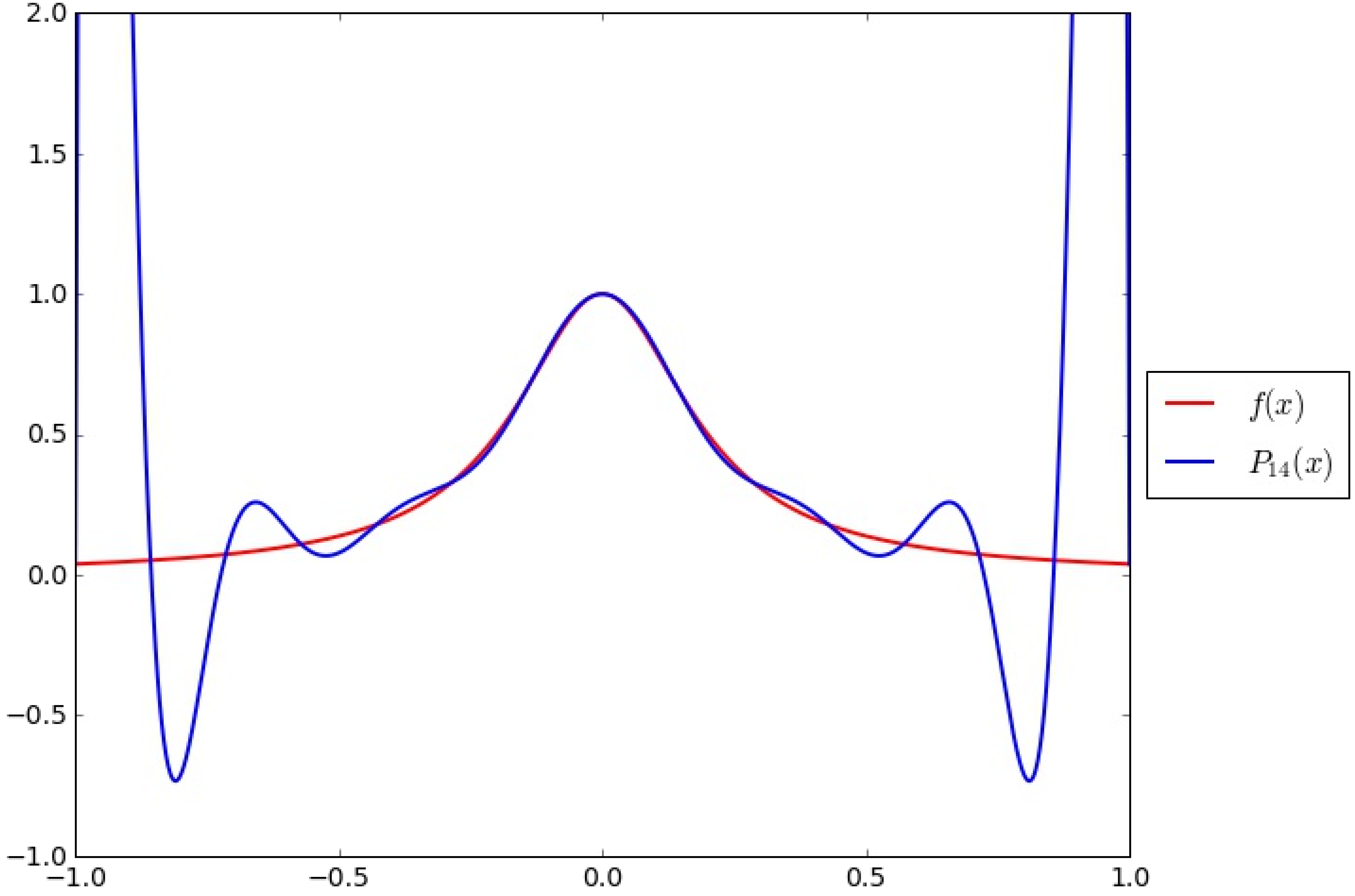
Show code



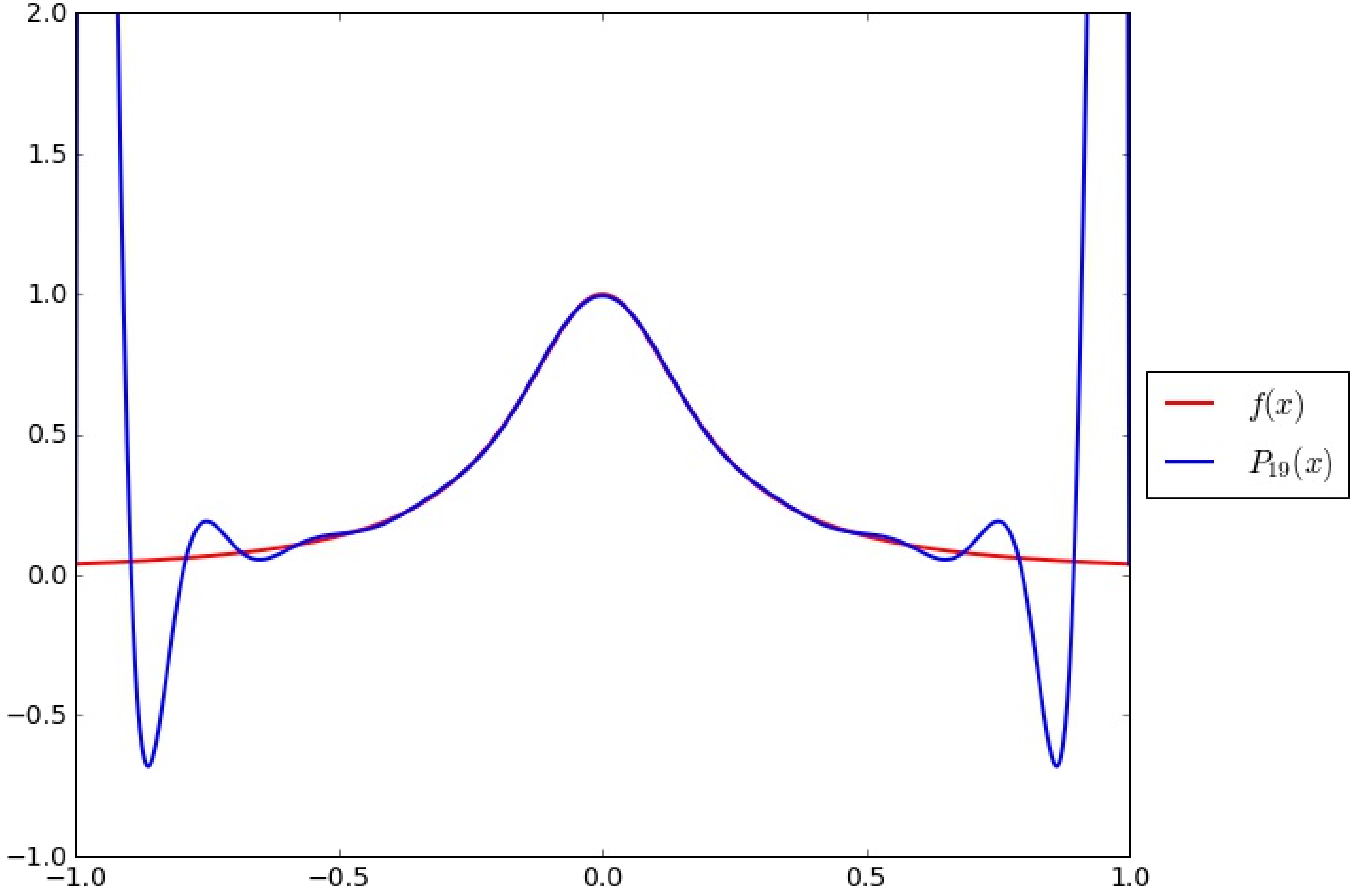
Show code



Show code



Show code

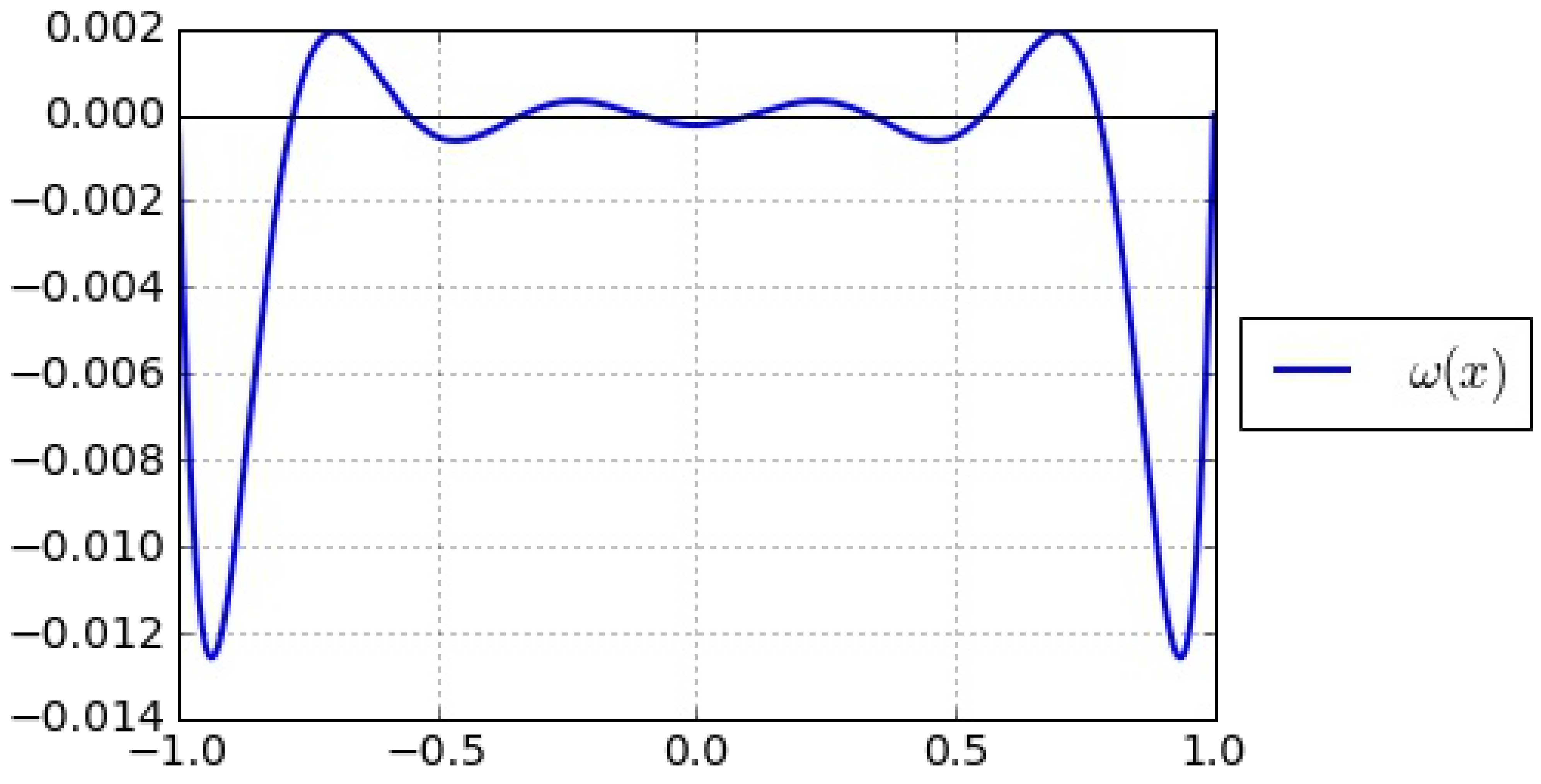


Оптимальное расположение узлов

Изучим, насколько сильно можно уменьшить ошибку интерполяции, если грамотно выбирать узлы интерполяции.

Рассмотрим функцию $\omega(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$. На равномерной сетке она сильно растет к краям отрезка:

Show code



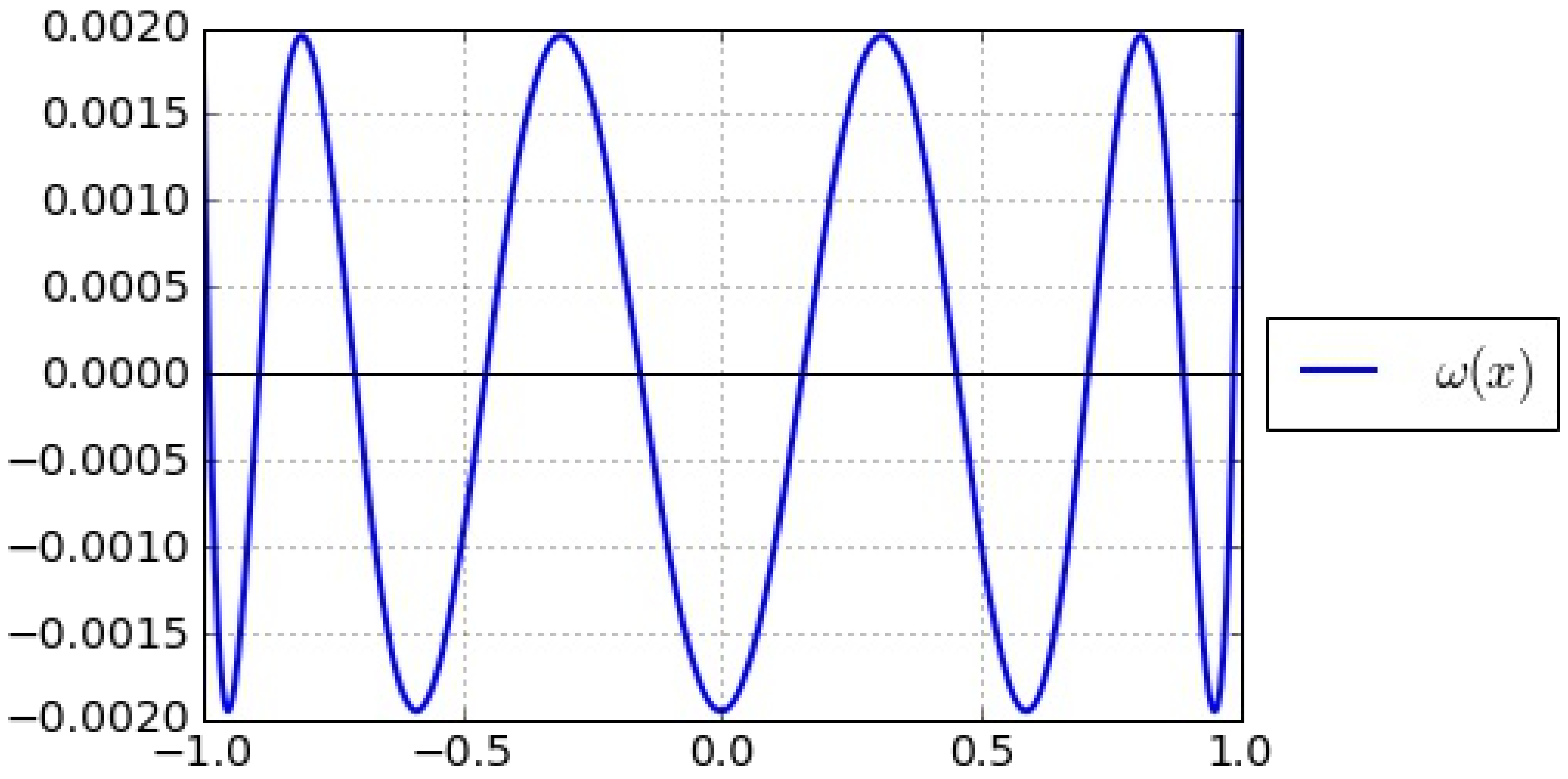
Чебышевские узлы

Если выбрать узлы интерполяции в корнях многочлена Чебышева

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right),$$

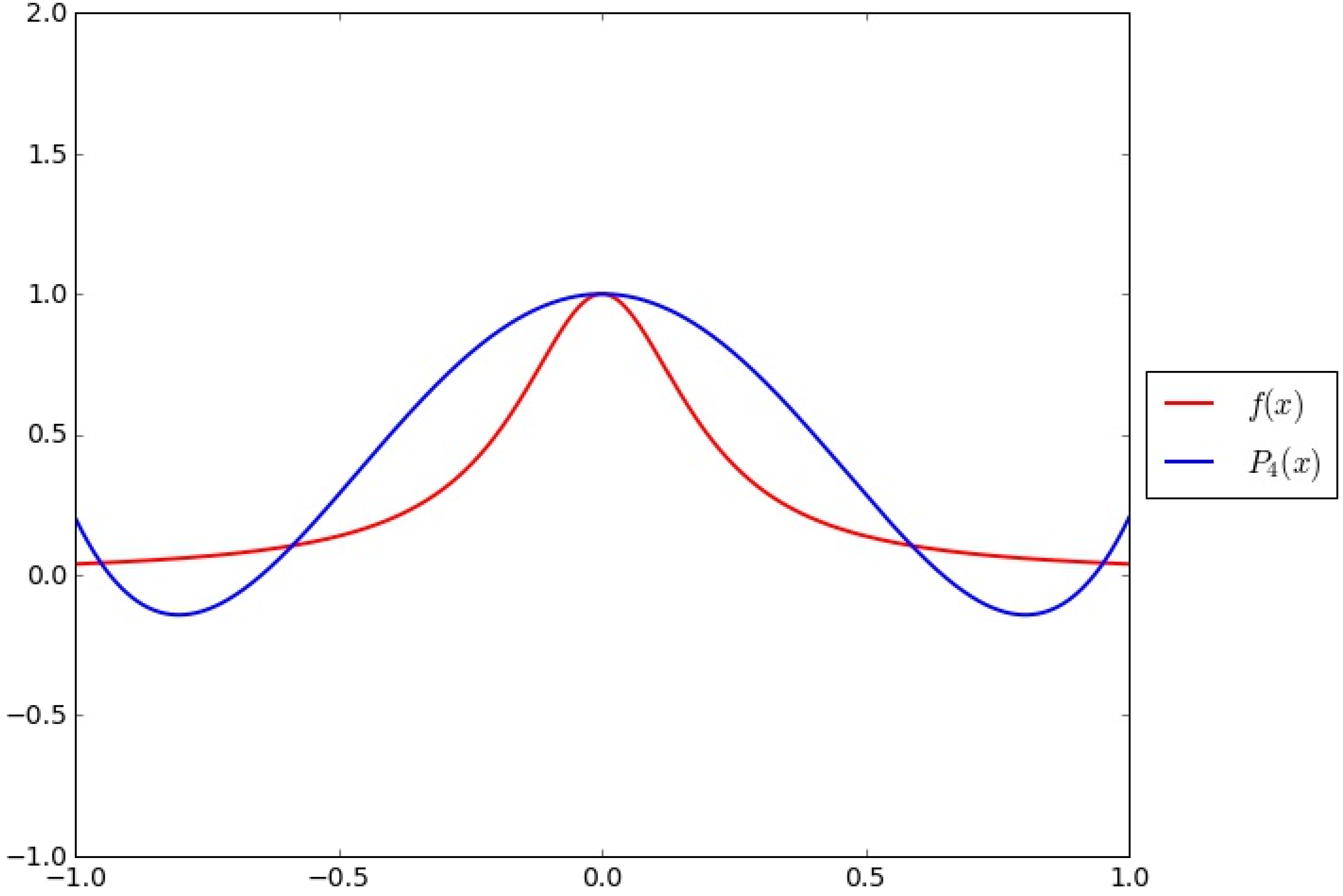
то функция $\omega(x)$ ведет себя как многочлен Чебышева:

Show code

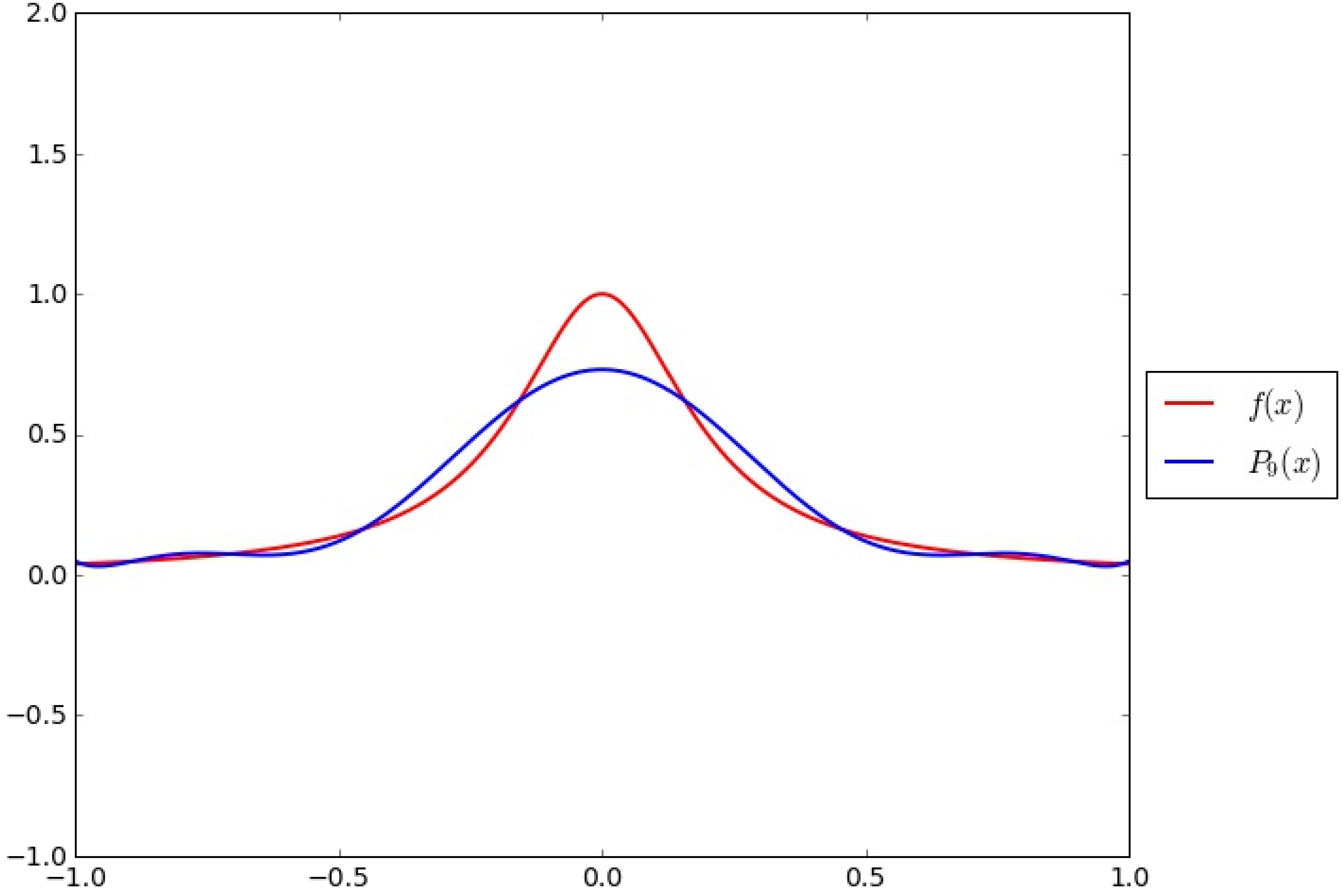


Доказано, что в случае выбра Чебышевских узлов интерполяции последовательность интерполяционных многочленов $P_n(x)$ будет сходиться к $f(x)$ *равномерно*, если $f(x)$ имеет ограниченную первую производную.

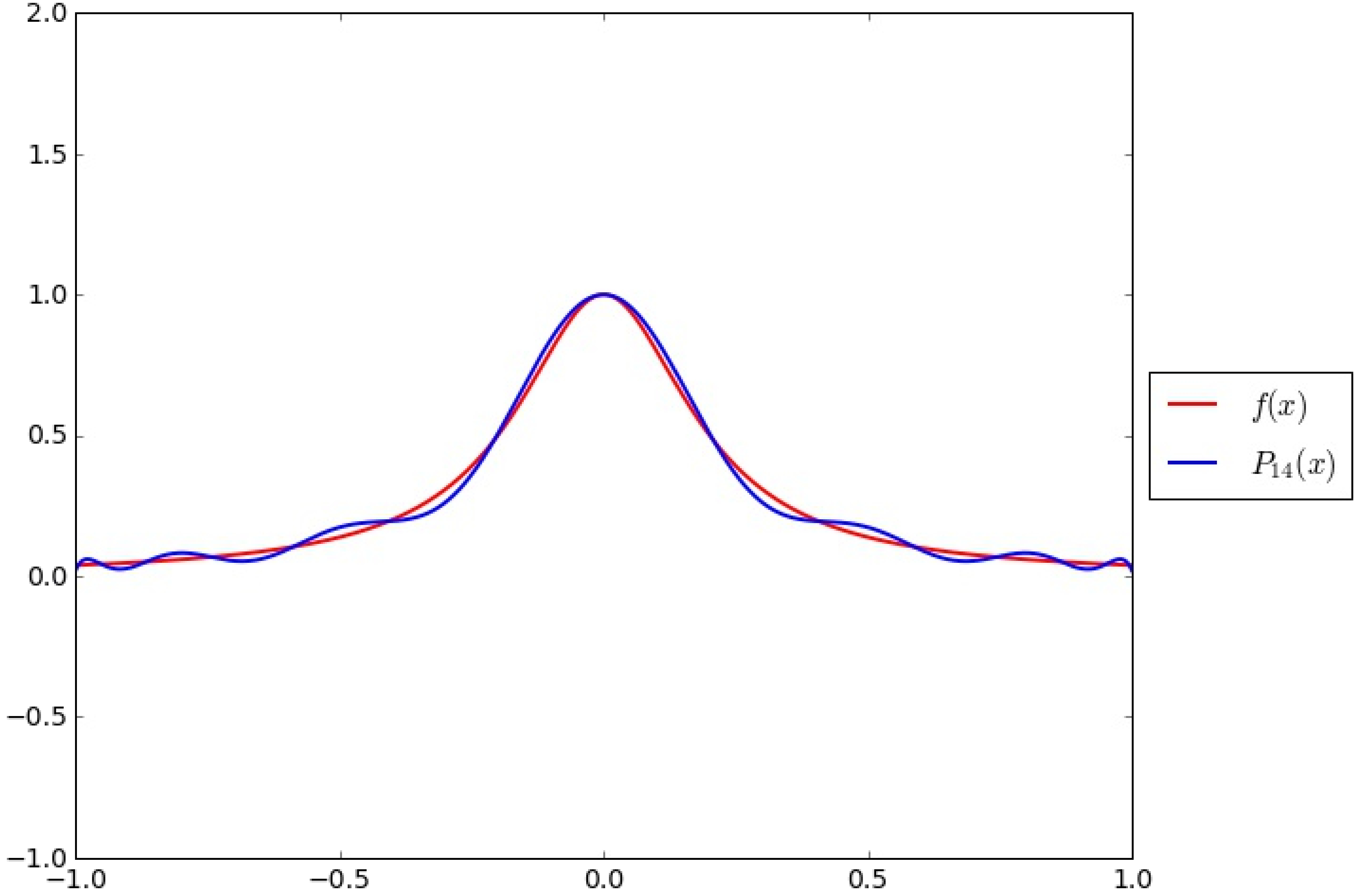
Show code



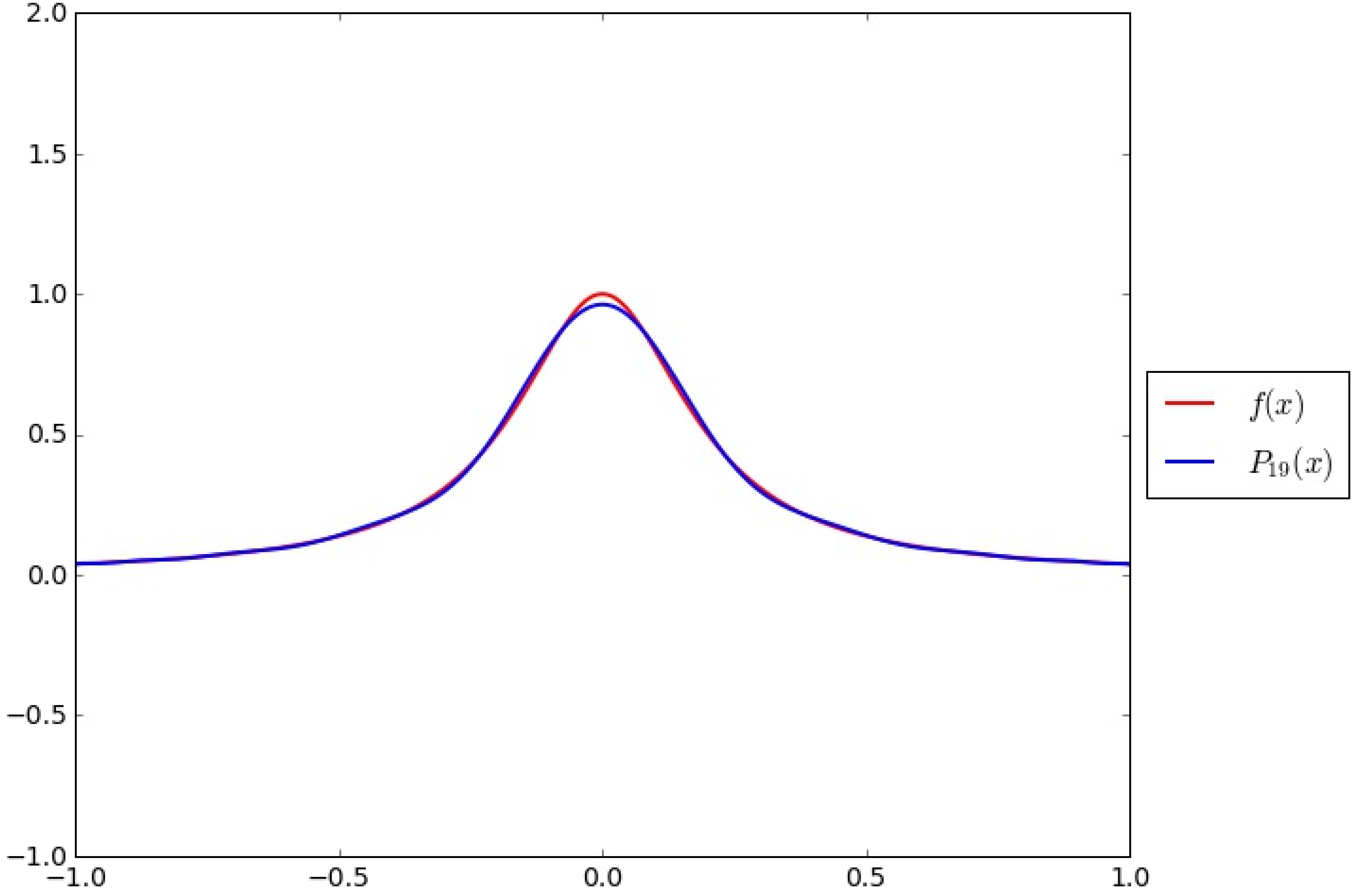
Show code



Show code



Show code



Чувствительность интерполяции

До сих пор мы считали, что значения функции $f(x)$ в узлах интерполяции заданы точно. На практике в значениях $f(x)$ присутствуют ошибки, свзяанные, например, с погрешностью измерения функции $f(x)$. В любом случае, при представлении в вычислительной технике $f(x_i)$ всегда содержит ошибку округления.

Для исследования чувствительности интерполяции удобно записывать интерполяционный многочлен в форме Лагранжа

$$P(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\ell_i(x).$$

При возмущении значений в узлах на $\Delta f(x_i)$ интерполяционный многочлен изменяется

$$\tilde{P}(x) = \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) + \Delta f(x_i)\right] \ell_i(x).$$

Ошибка чувствительности интерполяции

Разность $|\tilde{P}(x) - P(x)|$ будем называть *ошибкой чувствительности интерполяции*

$$|\tilde{P}(x) - P(x)| = \left|\sum_{i=1}^{n} \Delta f(x_i)\ell_i(x)\right|.$$

Предположим, что все $|\Delta f(x_i)| \leqslant \Delta f$. Тогда

$$|\tilde{P}(x) - P(x)| \leqslant \Delta f \sum_{i=1}^{n} |\ell_i(x)|.$$

Функция $L(x) = \sum_{i=1}^{n} |\ell_i(x)|$ называется функцией Лебега и зависит только от расположения узлов.

Функция Лебега

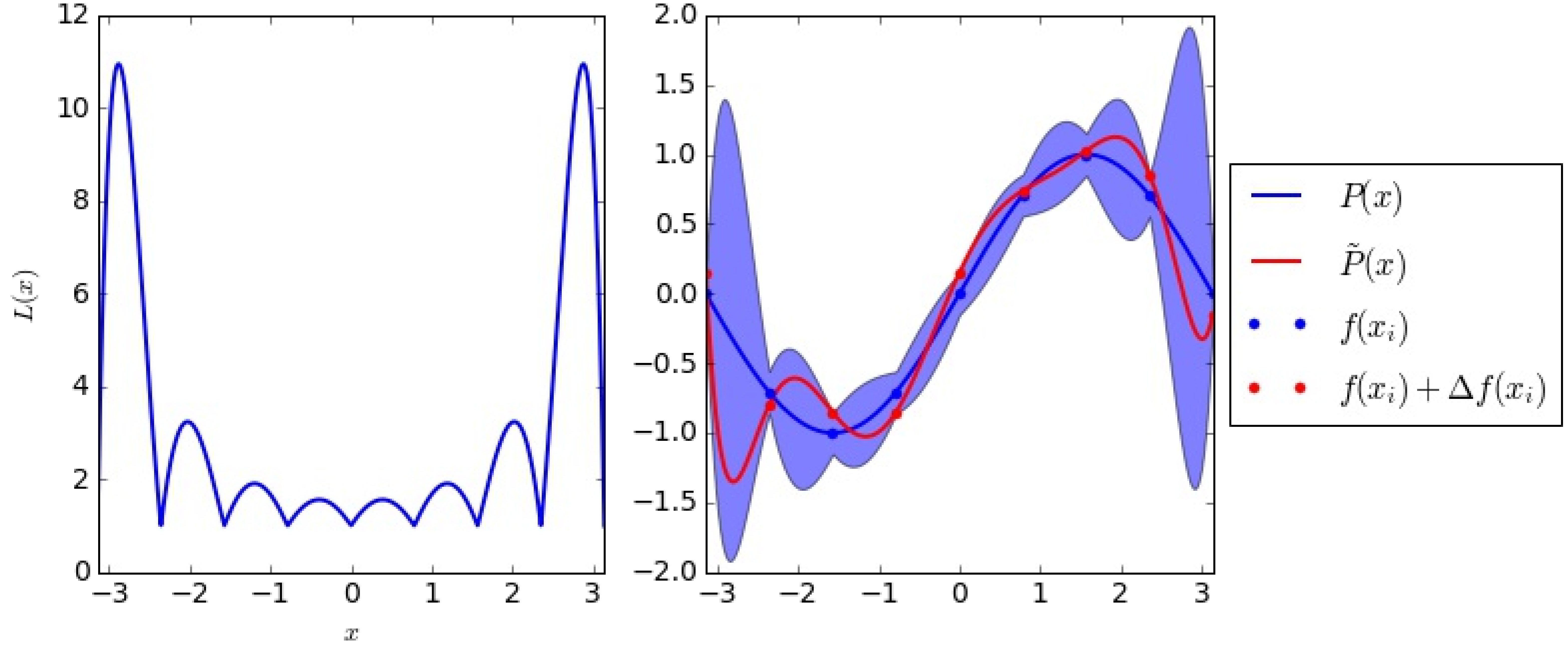
Заметим, что

$$L(x) = \sum_{i=1}^{n} |\ell_i(x)| \geqslant \left| \sum_{i=1}^{n} \ell_i(x) \right| = 1,$$

то есть максимальная погрешность между узлами не меньше погрешности в самих узлах.

Величина $L = \max_{x \in [a,b]} L(x)$ называется константой Лебега.

Show code



Рост констант Лебега

Для *равномерной* сетки константа Лебега зависит только от числа узлов

- Для линейной интерполяции ($n = 2$) константа Лебега $L = 1$.
- Для квадратичной интерполяции ($n = 3$) константа Лебега $L = 1.25$.
- При $n = 10$ константа Лебега $L \approx 19$.
- При $n = 20$ константа Лебега $L \approx 6900$.
- При $n = 30$ константа Лебега $L \approx 4 \cdot 10^6$.
- При $n \gg 1$ константа Лебега растет как $L \sim \frac{2^n}{e(n-1)\ln(n-1)}$

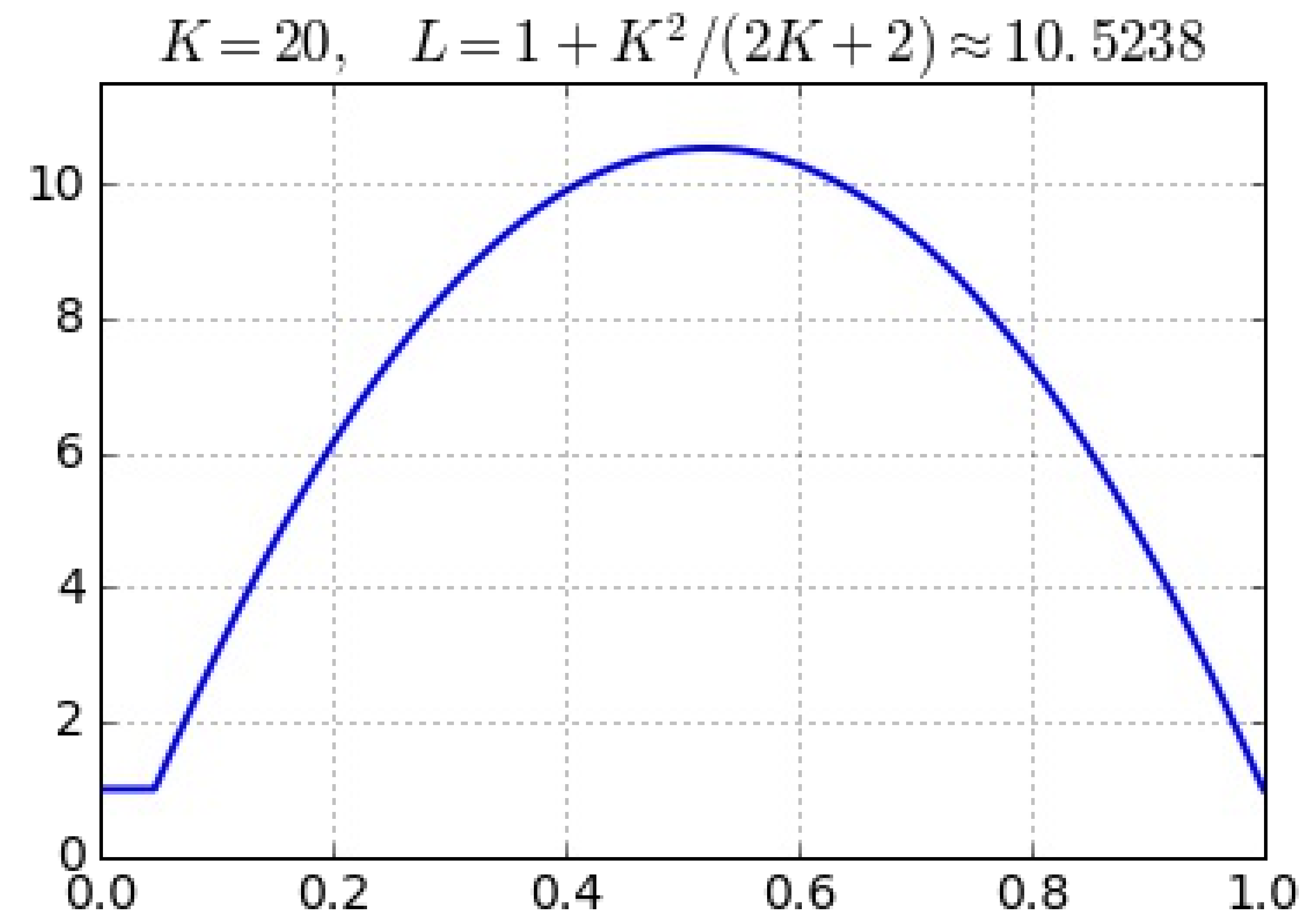
Напротив, для сетки из нулей многочлена Чебышева (которая минимизирует ошибку интерполяции), константа Лебега оказывается довольно малой:

- Для линейной интерполяции ($n = 2$) константа Лебега $L = \sqrt{2}$.
- Для квадратичной интерполяции ($n = 3$) константа Лебега $L = 5/3 \approx 1.6667$.
- При $n = 10$ константа Лебега $L \approx 2.4288$.
- При $n = 20$ константа Лебега $L \approx 2.8698$.
- При $n = 30$ константа Лебега $L \approx 3.1278$.
- В общем случае $\frac{2}{\pi} \ln n + 0.96 < L < \frac{2}{\pi} \ln n + 1$

Для случайной сетки константа Лебега может быть сколь угодно большой: рассмотрим сетку из трех узлов, где $x_2 - x_1 \ll x_3 - x_2$.

Тогда функция Лебега такой сетки зависит от отношения $K = \frac{x_3 - x_2}{x_2 - x_1}$. Для равномерной сетки $K = 1$ и $L = 1.25$.

Show code



Сплайн-интерполяция

При интерполяции единым многочленом для большой равномерной сетки возникают проблемы

- Интерполяционный многочлен не обязан хорошо приближать функцию (пример Рунге).
- Интерполянт чувствителен к погрешностям в узлах, при $n > 50$ не хватает даже машинной точности.

Данные проблемы решаются переходом к кусочно-многочленным интерполянтам — сплайнам.

Сплайн

Для сетки $[x_0, x_1, \ldots, x_n]$ сплайн задается в виде n функций $s_i(x)$:

$$s(x) = s_i(x),\ x \in [x_{i-1}, x_i], \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

В узлах интерполяции x_i сплайн принимает заданные значения $f(x_i)$:

$$s(x_i) = s_i(x_i) = s_{i+1}(x_i) = f(x_i)$$

Характеристики сплайна

Сплайн характеризуется следующими параметрами:

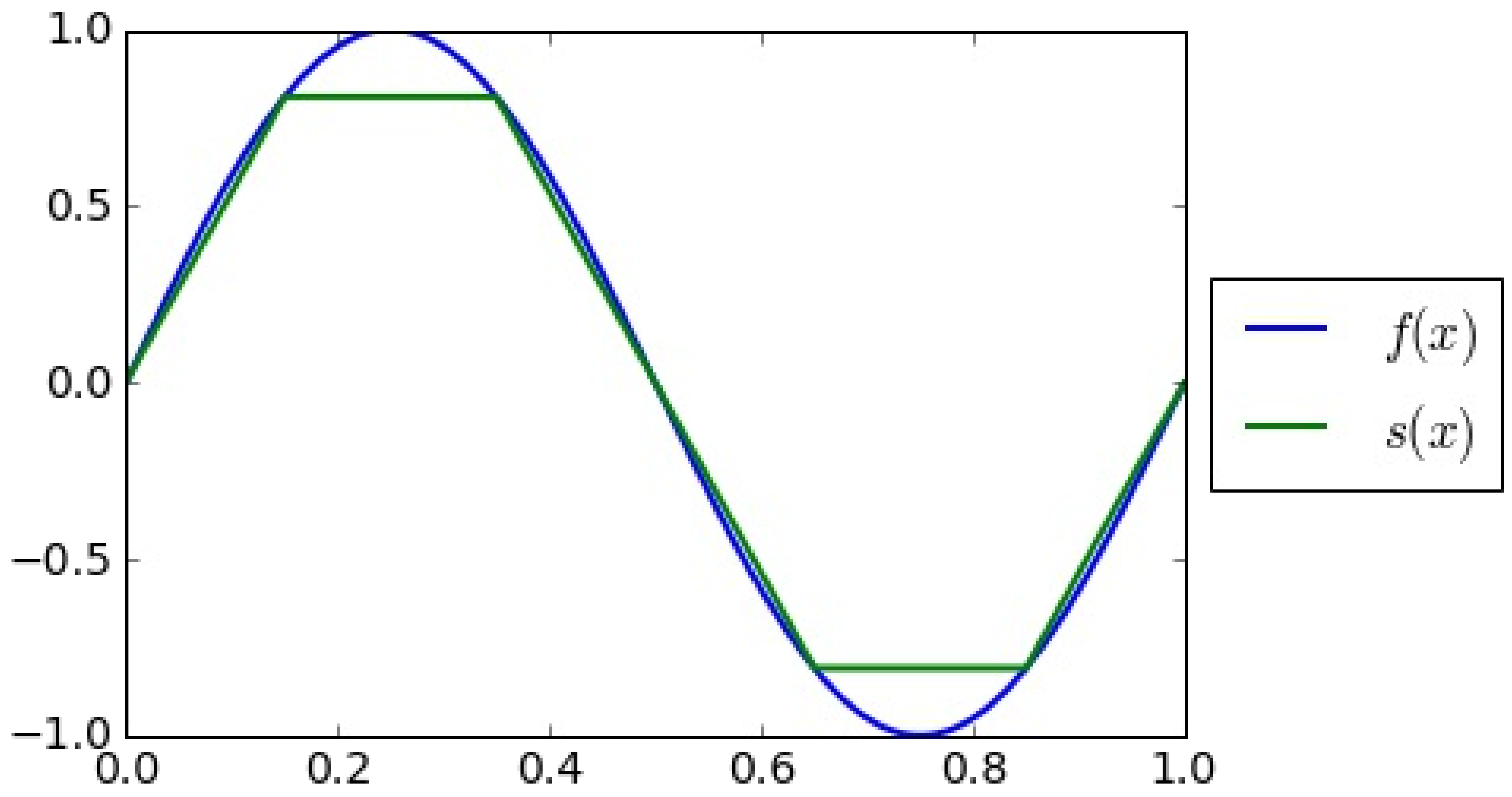
- Степень — это степень многочленов $s_i(x)$
- Гладкость — это количество непрерывных производных у $s(x)$
- Дефект — это разность между степенью и гладкостью.

Легко показать, что условие «дефект = 0» приводит к тому, что все $s_i(x)$ совпадают, а сплайн превращается в интерполяционный многочлен.

Кусочно линейная аппроксимация

Простейший сплайн имеет степень 1 и гладкость 0 — это приближение функции кусочно-линейной ломанной:

```
x = np.linspace(0, 1, 1000)
xs = np.array([0, 0.15, 0.35, 0.65, 0.85, 1])
plt.plot(x, np.sin(2*np.pi*x), lw=2, label='$f(x)$')
plt.plot(xs, np.sin(2*np.pi*xs), lw=2, label='$s(x)$')
plt.legend(loc='center left', bbox_to_anchor=(1, .5))
plt.show()
```



Кубический сплайн дефекта 1

Каждая функция $s_i(x)$ определяется черырьмя параметрами

$$s_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + \frac{c_i}{2}(x - x_i)^2 + \frac{d_i}{6}(x - x_i)^3,$$

$$a_i = s_i(x_i),\;\; b_i = s_i'(x_i),\;\; c_i = s_i''(x_i),\;\; d_i = s_i'''(x_i).$$

На данный сплайн наложены условия ($4n - 2$ штуки)

$$s_i(x_{i-1}) = f(x_{i-1}),\;\; s_i(x_i) = f(x_i),\quad i = 1, 2, \ldots, n$$

$$s_i'(x_i) = s_{i+1}'(x_i),\;\; s_i''(x_i) = s_{i+1}''(x_i),\quad i = 1, 2, \ldots, n-1$$

Граничные условия для сплайна

У сплайна остаются два свободных параметра, их определяют из различных граничных условий, например

- $s_1'(x_0) = f'(x_0), \;\; s_n'(x_n) = f'(x_n)$
- $s_1''(x_0) = f''(x_0), \;\; s_n''(x_n) = f''(x_n)$
- «Естественный» сплайн: $s_1''(x_0) = s_n''(x_n) = 0$

Построение сплайна

Существует несколько способов определения функций $s_i(x)$ для кубического сплайна, все они сводят задачу к решению трехдиагональной системы.

Рассмотрим вспомогательную задачу: определить $s_i(x)$ из условий

$$s_i(x_{i-1}) = f_{i-1}$$

$$s_i(x_i) = f_i$$

$$s_i'(x_{i-1}) = m_{i-1}$$

$$s_i'(x_i) = m_i$$

Эта задача называется задачей Эрмитовой интерполяции.

Эрмитов элемент

Решая задачу построения кубического сплайна Эрмита, получаем

$$s_i(x) = f_i + m_i(x - x_i) + \frac{2m_i + m_{i-1} - 3f(x_{i-1}, x_i)}{x_i - x_{i-1}}(x - x_i)^2$$
$$+ \frac{m_i + m_{i-1} - 2f(x_{i-1}, x_i)}{(x_i - x_{i-1})^2}(x - x_i)^2$$

Составляя сплайн из Эрмитовых элементов мы сразу можем обеспечить непрерывность первой производной, задавая m_i в каждом узле. Сами значения m_i $(n+1$ штука) нужно определить из условия непрерывности второй производной и граничных условий.

Система для m_i

Условие $s_i''(x_i) = s_{i+1}''(x_i)$ для соседних Эрмитовых элементов превращается в

$$\frac{2m_i + m_{i-1} - 3f(x_{i-1}, x_i)}{h_{i-1/2}} = -\frac{2m_i + m_{i+1} - 3f(x_i, x_{i+1})}{h_{i+1/2}}$$

$$\frac{m_{i-1}}{h_{i-1/2}} + \left(\frac{2}{h_{i-1/2}} + \frac{2}{h_{i+1/2}}\right)m_i + \frac{m_{i+1}}{h_{i+1/2}} = 3\left(\frac{f(x_{i-1}, x_i)}{h_{i-1/2}} + \frac{f(x_i, x_{i+1})}{h_{i+1/2}}\right),$$

что является трехдиагональной системой при $i = 1, \ldots, n-1$. Здесь $h_{i-1/2} = x_i - x_{i-1}$.

Граничные условия

Для естественного сплайна

$$\frac{s_1''(x_0)}{2} = -\frac{2m_1 + m_0 - 3f(x_0, x_1)}{h_{1/2}} = 0, \qquad \frac{s_n''(x_n)}{2} = \frac{2m_n + m_{n-1} - 3f(x_{n-1}, x_n)}{h_{n-1/2}} = 0$$

дают граничные уравнения в системе

$$\frac{m_0 + 2m_1}{h_{1/2}} = 3\frac{f(x_0, x_1)}{h_{1/2}}$$

$$\frac{2m_n + m_{n-1}}{h_{n-1/2}} = 3\frac{f(x_{n-1}, x_n)}{h_{n-1/2}}.$$

Матрица такой системы будет симметричной и положительно определенной.

```python
from scipy.linalg import solveh_banded

def cubic_spline(x, f):
    h = np.diff(x)
    n = len(h)
    df = np.diff(f) / h # Разделенные разности
    ab = np.zeros((2, n+1))
    b = np.zeros(n+1)
    ab[0, :n] = 2 / h; ab[0, 1:] += 2 / h
    ab[1, :n] = 1 / h
    b[:n] = 3 * df / h; b[1:] += 3 * df / h
    return solveh_banded(ab, b, lower=True)

def hermite(f1,m1,f2,m2,x1,x2,x):
    h = x2-x1; fd = (f2-f1)/h; dx = x-x2;
    return f2+m2*dx+(-3*fd+m1+2*m2)*dx**2/h + (m1+m2-2*fd)*dx**3/h**2
```

```
xs = np.array([0, .3, .5, .7, 1.]); ys = np.sin(2*np.pi*xs)
m = cubic_spline(xs, ys)
plt.plot(np.linspace(0, 1, 1000), np.sin(np.linspace(0, 2*np.pi, 1000)), 'r', lw=2)
for i in range(1, len(m)):
    x = np.linspace(xs[i-1], xs[i])
    plt.plot(x, hermite(ys[i-1], m[i-1], ys[i], m[i], xs[i-1], xs[i], x), 'b', lw=2)
plt.plot(xs, ys, 'g.', ms=10)
plt.show()
```