Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice

3 - Interpolacja

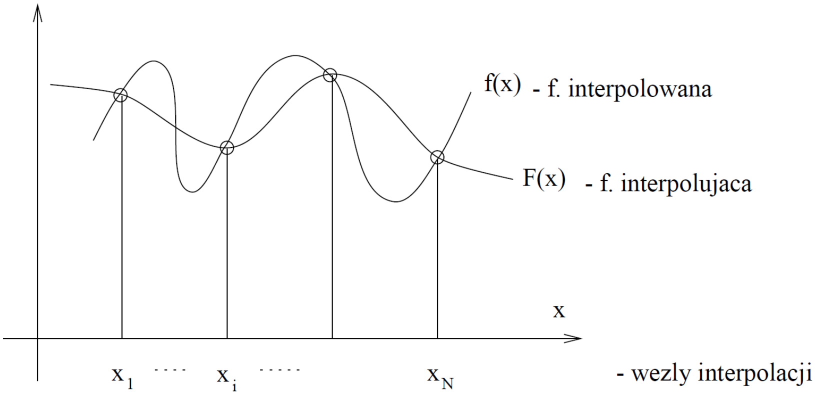
Marian Bubak, Katarzyna Rycerz

Department of Computer Science
AGH University of Science and Technology
Krakow, Poland
kzajac@agh.edu.pl
dice.cyfronet.pl

Contributors
Dawid Prokopek
Paweł Matejko
Arkadiusz Placha

Plan wykładu

3.1 Zadanie interpolacji



Dane:

- $[a, \ b]$
- $\{(x_i, \ f_i = f(x_i)), \ i = 1, \ 2, \ . \ . \ . \ , \ N\}$

Szukane:

- $F(x)$ - funkcja interpolująca $\longrightarrow$ wartości w $x \neq x_i$
- $E(x)$ - oszacowanie błędu interpolacji

pod warunkiem:
$F(x_i) = f_i$ - takie same w węzłach

Odmiana: poza $f(x_i)$ dane także $f^{(k)}(x_i)$

3.2 Klasy funkcji interpolujących

Funkcje o „rozsądnym przebiegu między węzłami”, tj.:

- gładkość (smoothness),
- prostota (simplicity);

a takimi są np.:

- wielomiany algebraiczne,
- wielomiany trygonometryczne,
- funkcje wymierne,
- funkcje sklejane (spline).

3.3 Przydatność interpolacji

- zagęszczenie tablic (zamiast długiej tablicy krótka tablica + krótka procedura interpolacyjna),
- zastępowanie skomplikowanych funkcji np. wielomianami,
- znajdowanie $f^{(k)}(x)$ w punktach pośrednich,
- całkowanie numeryczne,
- rozwiązywanie równiań różniczkowych,
- interpolacja odwrotna: wyznaczanie x, któremu odpowiada $y = f(x)$ nie występujaca w tablicy.

3.4 Wielomiany algebraiczne
3.4.1 Cechy wielomianów algebraicznych

- łatwość obliczeń $+, *, \frac{d}{dx}, \int dx \ldots$

Twierdzenie Weierstrass'a

Dla dowolnej $f(x)$ – ciągłej na $[a, \ b]$ (skończonym) i każdego $\epsilon > 0$, istnieje wielomian W_n, $n = n(\epsilon)$ taki, że:

$$\max_{x \in [a,b]} |f(x) - W_n(x)| < \epsilon$$

3.4.2 Postać naturalna wielomianu

$$W(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i, \;\; a_i = \frac{W^{(i)}(0)}{i!}$$

- postać naturalna - rozwinięcie Maclaurina
- a_i - znormalizowane pochodne

3.4.3 Algorytm W.G. Hornera

Do wyliczania wartości wielomianu dla konkretnego x

$$W(x) = (\dots(a_n x + a_{n-1})x + \dots + a_1)x + a_0$$

czyli:

$$W_n = a_n,$$
$$W_i = W_{i+1}x + a_i, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 0$$
$$W(x) = W_0$$

otrzymujemy:

- $n-$mnożeń, $n-$dodawań
- numerycznie poprawny (wskaźnik kumulacji $\approx 2n + 1$)

Zadanie: sprawdzić.

3.4.4 Postać Newtona

$$W(x) = \sum_{k=0}^{n} b_k p_k(x) \; ;$$

$$p_0(x) = 1$$

$$p_k(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})$$

Algorytm Hornera dla postaci Newtona

$$W_n = b_n$$
$$W_i = W_{i+1} \cdot (x - x_i) + b_i$$
$$W(x) = W_0$$

Postać naturalna wielomianu dla zadania interpolacji

- teoretycznie można wyznaczyć wartości wielomianu interpolacyjnego rozwiązując układ równań, gdzie niewiadomymi są współczynniki a_j szukanego wielomianu

$$f(x_i) = \sum_{j=0}^{n} a_j x_i^j$$

- w praktyce macierz tego układu jest źle uwarunkowana (macierz Vandermonde'a)

3.5 Wielomian Interpolacyjny Lagrange'a
3.5.1 Interpolacja liniowa

Szukamy wielomianu $P_1(x)$ przechodzącego przez:
$(x_0,\ y_0)$ i $(x_1,\ y_1)$
Można sprawdzić, że wielomian postaci:

$$P_1(x) = \underbrace{\frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)}}_{L_0(x)} y_0 + \underbrace{\frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}}_{L_1(x)} y_1 = \sum_{k=0}^{1} L_k(x) f(x_k)$$

To:

- wielomian stopnia $\leqslant 1$
- Przechodzi przez wymagane punkty:
  gdy $x = x_0$ to $P_1(x_0) = y_0$
  gdy $x = x_1$ to $P_1(x_1) = y_1$

Ale: Czy jest jedynym takim wielomianem?

3.5.2 Wielomian n-tego stopnia

przez $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$

$L_k(x_l) = \delta_{k,l} = \begin{cases} 0, & k \neq l \ (\star) \\ 1, & k = l \ (\star\star) \end{cases}$ dla $k \in \{0, 1, .., n\}$

$(\star)$ – licznik d

$d = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{k-1})^{\downarrow}(x - x_{k+1})\ldots(x - x_n)$

$(\star\star)$ – mianownik m

$m = (x_k - x_0)(x_k - x_1)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_n)$

LIP:

$$L_k(x) = \frac{d}{m} = \prod_{i=0, i\neq k}^{n} \frac{x - x_i}{(x_k - x_i)},$$

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \underbrace{f(x_k)}_{\text{współczynniki}} \underbrace{L_k(x)}_{\text{baza Lagrange'a}}$$

Interpolacja ze wzoru Lagrange'a - cechy

- (+) łatwo utworzyć wzór
- (-) przy dodawaniu nowego węzła $\longrightarrow$ wyliczamy wszystko od początku
- (-) przy obliczaniu wartości w konkretnym punkcie $\longrightarrow$ musimy powtórzyć obliczanie licznika dla $L_k(x)$

3.5.3 Jednoznaczność rozwiązania

$P_n(x)$ – wiel. stopnia $\leqslant n$, przechodzący przez punkty:

$$\{(x_i,\ f_i),\ i = 0,\ 1,\ 2, \cdots,\ n\ ,\ x_i \neq x_j\}$$

Twierdzenie

Jest tylko jeden taki wielomian.

Dowód: Niech $\exists Q_n(x) \neq P_n(x)$, przechodzący przez w/w punkty.
Ustalmy $R_n(x) = P_n(x) - Q_n(x)$ – wiel. stopnia $\leqslant n$
Ponieważ P_n oraz Q_n są sobie równe dla $x = x_i, i = 0, 1, ..., n$ to:

$$R_n(x_i) = 0,\ i = \underbrace{0, 1, \ldots, n}_{n+1}$$

Jeśli wielomian stopnia $\leqslant n$ ma n+1 miejsc zerowych, to musi być tożsamościowo równy 0

$$R_n(x) \equiv 0$$

3.5.4 Błąd interpolacji Lagrange'a

Dygresja: Twierdzenie uogólnione *Tw. Rolle'a*:

Założenia:

1. $f \in C[a, \ b]$,
2. $f \in C^n(a, \ b)$,
3. $f = 0$ *w* $(n+1)$ różnych *punktach*

Teza:

$$\exists c \in (a, \ b) : f^{(n)}(c) = 0$$

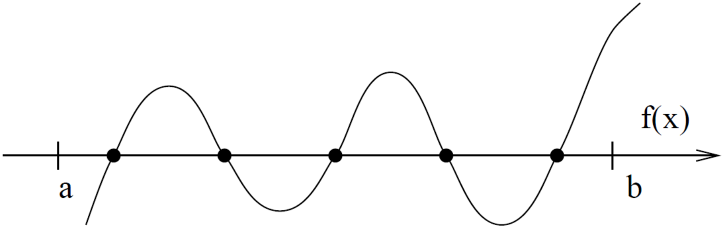
Dowód:

Twierdzenie Rolle'a kolejno do:

$f \longrightarrow f'$o n zerach

$f' \longrightarrow f''$ o $(n-1)$ zerach

$f^{(n-1)} \longrightarrow f^{(n)}$$o$ 1 zerze



Rysunek 3.2: Funkcja spełniająca założenia uogólnionego tw. Rolle'a

Założenia:

- $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a,\ b]$ – różne punkty
- $P_n(x)$ – wiel. interpolacyjny Lagrange'a
- $f \in C^{(n+1)}[a,\ b]$

Teza:

$$\forall x \in [a,\ b]\ \exists \eta \in (a, b), \eta = \eta(x) :$$

$$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{n+1}(\eta)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\ (\star)$$

- dla węzłów interpolacji $x = x_k, k = 0,\ 1,\ \ldots,$
$n \rightarrow f(x_k) = P_n(x_k)$ $\Rightarrow$dowolny η spelnia $(\star)$
- dla ustalonego $\tilde{x} \neq x_k, k = 0,\ 1, \ldots,\ n$
definiuję funkcję g(t),[a, b]:

$$g(t) = f(t) - P_n(t) - [f(\tilde{x}) - P_n(\tilde{x})] \prod_{i=0}^{n} \frac{t - x_i}{\tilde{x} - x_i}$$

$$\left.\begin{array}{l} f \in C^{(n+1)}[a,\ b] \\ P \in C^{\infty}[a,\ b] \\ \tilde{x} \neq x_k \end{array}\right\} \Rightarrow g(t) \in C^{(n+1)}[a,\ b]$$

$\boxed{\text{dla } t = x_k :}$

$$g(x_k) = \underbrace{f(x_k) - P_n(x_k)}_{=0} - [f(\tilde{x}) - P_n(\tilde{x})] \underbrace{\prod_{i=0}^{n} \frac{x_k - x_i}{\tilde{x} - x_i}}_{=0} = 0$$

$\boxed{\text{dla } t = \tilde{x}\text{, z założenia } \tilde{x} \neq x_k}$

$$g(\tilde{x}) = f(\tilde{x}) - P_n(\tilde{x}) - [f(\tilde{x}) - P_n(\tilde{x})] \underbrace{\prod_{i=0}^{n} \frac{\tilde{x} - x_i}{\tilde{x} - x_i}}_{=1} = 0$$

$\Rightarrow g(t)$ ma $(n+2)$ miejsc zerowych: węzły interpolacji $x_0, x_1, \ldots,$ x_n oraz $\tilde{x}$ wybrane przy definiowaniu $g(t)$

Zastosowanie twierdzenia Rolle'a:

$$0 = g^{(n+1)}(\eta) =$$
$$f^{(n+1)}(\eta) - \underbrace{P_n^{(n+1)}(\eta)}_{=0} - [f(\tilde{x}) - P_n(\tilde{x})] \frac{d^{n+1}}{dt^{n+1}} \left\{ \prod_{i=0}^{n} \frac{t - x_i}{\tilde{x} - x_i} \right\}_{t=\eta}$$

$$\prod_{i=0}^{n} \frac{t - x_i}{\tilde{x} - x_i} = \frac{t^{n+1}}{\prod_{i=0}^{n}(\tilde{x} - x_i)} + at^n + \cdots$$

$$f^{(n+1)}(\eta) = [f(\tilde{x}) - P_n(\tilde{x})] \frac{(n+1)!}{\prod_{i=0}^{n}(\tilde{x} - x_i)}$$

gdzie $\tilde{x}$ jest dowolnym $x \neq x_i$

Błąd interpolacji Lagrange'a:

$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$

3.6 Algorytm Neville'a

Cel: wyznaczanie wartości wielomianu interpolacyjnego w danym punkcie, bez obliczania jego wzoru.
Przy dużej liczbie punktów $\longrightarrow$ niepraktyczne
Istota: budowa tablicy wartosci wielomianów coraz wyższych stopni.

	$k=0$	$k=1$	$k=2$	$k=3$
x_0	$f(x_0) = P_0(x)$			
		$\rangle\, P_{01}(x)$		
x_1	$f(x_1) = P_1(x)$		$\rangle\, P_{012}(x)$	
		$\rangle\, P_{12}(x)$		$\rangle\, P_{0123}(x)$
x_2	$f(x_2) = P_2(x)$		$\rangle\, P_{123}(x)$	
		$\rangle\, P_{23}(x)$		
x_3	$f(x_3) = P_3(x)$			

P_1, P_2, P_3, P_4 – wiel. stopnia 0, przechodzący przez $(x_i,\ f_i)$,
P_{12}, P_{23}, P_{34} – wartość w x dla wielomianów stopnia 1, przechodzącego przez pary punktów,

Rekurencyjne zapełnianie tabeli:

$$P_{i(i+1)\ldots(i+m)}(x) =$$
$$= \frac{(x - x_{i+m})P_{i(i+1)\ldots(i+m-1)}(x) + (x_i - x)P_{(i+1)(i+2)\ldots(i+m)}(x)}{x_i - x_{i+m}}$$

- Otrzymamy wartości dla wielomianu stopnia $N - 1$
- zgodnego z $f(x)$ w węzłach, np.:

$$P_{12} = \frac{(x - x_2)P_1 - (x - x_1)P_2}{x_1 - x_2}\ ;\ P_{12}(x_1) = P_1; P_{12}(x_2) = P_2$$

3.7 Metoda ilorazów różnicowych (divided differences, Newtona)

Interesuje nas nie wartość, a postać wielomianu (dobra do celów praktycznych)
$P_n(x)$ – LIP, stp. $\leqslant n$, zgodny z $f(x)$ w $\{x_0,\ x_1,\ \ldots,\ x_n\}$
Można go zapisać w postaci:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \\ \cdots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})$$

a_0: $f(x_0) = P_n(x_0) = a_0$
a_1 : $f(x_1) = P_n(x_1) = a_0 + a_1(x_1 - x_0) = f(x_0) + a_1(x_1 - x_0) \Rightarrow$

$$a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

Wprowadzamy notację:

- 0-wy iloraz różnicowy wzgl. x_i : $f[x_i] = f(x_i)$
  pozostałe - indukcyjnie:
- 1-szy:
  $$f[x_i,\ x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}$$
  Gdy zaś określone są ilorazy aż do $(k-1)$, czyli
  $$f[x_i,\ x_{i+1},\ x_{i+k-1}]\ i\ f[x_{i+1},\ x_{i+2},\ x_{i+k}]$$
- to wtedy k-ty iloraz różnicowy:

$$f[x_i,\ x_{i+1}, \ldots\ x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \ldots .x_{i+k}] - f[x_i, x_{i+1}, \ldots .x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

Budowa tablicy ilorazów różnicowych

- wystarczy zrobić tylko raz dla danego zestawu węzłów interpolacji
- do wzoru wykorzystujemy wyniki na przekątnej (czerwone)
- dodanie nowego węzła nie wymaga powtarzania obliczeń od początku

$$
\begin{array}{llllll}
x_0 & f(x_0) & & & & \\
x_1 & f(x_1) & f[x_0, x_1] & & & \\
x_2 & f(x_2) & f[x_1, x_2] & f[x_0, x_1, x_2] & & \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
x_n & f(x_n) & f[x_{n-1}, x_n] & \dots & \dots & f[x_0, \dots, x_n]
\end{array}
$$

Interpolacyjny wzór Newtona z ilorazami różnicowymi:

$$P_n(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] +$$

$$+ \cdots + (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})f[x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

$$P_n(x) = f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} f[x_0,\ x_1,\ \ldots,\ x_k](x - x_0)\cdots(x - x_{k-1})$$

Postać Newtona $\rightarrow$ do obliczania wartości wielomianu najlepiej użyć wariantu schematu Hornera

Związek ilorazów różnicowych z pochodnymi.

Generalized Mean value theorem

Założenia:

- $f \in C^n[a, \ b]$
- $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, \ b]$ i są różne

Teza:

$$\exists \eta \in (a, \ b) \ f[x_0, \ x_1, \ \ldots, \ x_n] = \frac{f^{(n)}(\eta)}{n!}$$

Materiały o potrzebnych twierdzeniach.

`https://tinyurl.com/tb95zoe`

Wzor Newtona dla węzłów równoodległych

$h = x_{i+1} - x_i \quad i = 0, 1, ..., n-1$

$x_i = x_0 + i \cdot h$

$x = x_0 + s \cdot h$

$x - x_i = (s - i)h$

$$P_n(x) = P_n(x_0 + s \cdot h) =$$
$$f[x_0] + s \cdot h \cdot f[x_0, x_1] + s(s-1)h^2 f[x_0, x_1, x_2] +$$
$$+ \cdots + s(s-1) \cdots (s-n+1)h^n f[x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

$$\binom{s}{k} = \frac{s(s-1)\ldots(s-k+1)}{k!}$$

$$P_n(x) = P_n(x_0 + sh) = \sum_{k=0}^{n} \binom{s}{k} k! h^k f[x_0, x_1, \cdots, x_k] (**)$$

Różnica progresywna(forward difference)

Progresywna, bo pomiędzy i oraz $i+1$ (do przodu):

$$\Delta^{(0)} y_i := y_i$$
$$\Delta^{(k)} y_i := \Delta^{(k-1)} y_{i+1} - \Delta^{(k-1)} y_i, k \geqslant 1$$

Forward differences – przykład dla 4 punktów:

$$\begin{array}{cccc}
y_0 & & & \\
 & \Delta y_0 & & \\
y_1 & & \Delta^2 y_0 & \\
 & \Delta y_1 & & \Delta^3 y_0 \\
y_2 & & \Delta^2 y_1 & \\
 & \Delta y_2 & & \\
y_3 & & &
\end{array}$$

Newton forward divided-difference formula

- Dla węzłów równoodległych iloraz różnicowy jest równy:

$$f[x_0,\ x_1, \cdots,\ x_k] = \frac{1}{k!h^k}\triangle^k f(x_0)$$

- Podstawiając do (**) mamy:

$$P_n(x) = P_n(x_0 + s \cdot h) = \sum_{k=0}^{n} \binom{s}{k} \triangle^k f(x_0)$$

- Dysponując wartościami różnic progresywnych można wyznaczyć wartość wielomianu.

Interpolacja Hermite'a

Dane:

- $k+1$ różnych węzłów: $x_0, x_1, \ldots, x_k$
- tzw. krotności węzłów dane liczbami naturalnymi $m_0, m_1, \ldots, m_k, \sum_{i=0}^{k} m_i = n+1$

Szukamy:

Dla dowolnej funkcji f – szukamy wielomianu H_n stopnia $\leqslant n$, takiego, że:

$H_n^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i) \quad$ dla $i = 0, 1, \ldots, k$ oraz $j = 0, 1, \ldots, m_i$

Krotność mówi nam, ile pochodnych ma być równych. Gdy $m_i = 1$ – interpolacja Lagrange'a.

Rozwiązanie

Suma krotności i początkowych węzłów interpolacyjnych

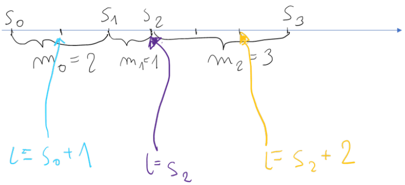
$$s(i) = \begin{cases} 0, & i = 0 \\ m_0 + m_1 + \cdots + m_{i-1}, & i > 0 \end{cases}$$

Zauważmy, że każda liczba $0 \leqslant l \leqslant n$ da się przedstawić w postaci $l = s(i) + j$ gdzie $0 \leqslant i \leqslant k$ oraz $0 \leqslant j \leqslant m_i - 1$

$m_0 = 2 \rightarrow f(x_0), f'(x_0)$

$m_1 = 1 \rightarrow f(x_1)$

$m_2 = 3 \rightarrow f(x_2), f'(x_2), f''(x_2)$



$P_1 = (x - x_0)^1$

$P_2 = (x - x_0)^2$

$P_3 = (x - x_0)^2 (x - x_1)^1$

$P_4 = (x - x_0)^2 (x - x_1)^1 (x - x_2)^1$

$P_5 = (x - x_0)^2 (x - x_1)^1 (x - x_2)^2$

Definiujemy wielomiany:
$p_{s(0)}(x) = 1$
$p_{(s(i)+j)}(x) = (x - x_0)^{m_0}(x - x_1)^{m_1} \ldots (x - x_{i-1})^{m_{i-1}}(x - x_i)^j (\star)$
gdzie: $i = 0, 1, \ldots, k$; $j = 0, 1, \ldots, m_i - 1$
Wtedy szukany wielomian interpolacyjny to kombinacja linowa takich wielomianów (por. postać Newtona)

$$H_n(x) = \sum_{l=0}^{n} b_l \cdot p_l(x) = \sum_{i=0}^{k} \sum_{j=0}^{m_i-1} b_{(s(i)+j)} \cdot p_{(s(i)+j)}(x)$$

Jak znaleźć współczynniki b_l:

- Tworzymy tablicę ilorazów różnicowych jak w metodzie Newtona.
- Tam gdzie nie można utworzyć ilorazu $\longrightarrow$ wykorzystujemy informację o pochodnej

Przykład dla $m_1 = 3$

$$
\begin{array}{llllll}
x_0 & f(x_0) & & & & \\
x_1 & f(x_1) & f[x_0, x_1] & & & \\
x_1 & f(x_1) & f'(x_1) & f[x_0, x_1, x_1] & & \\
x_1 & f(x_1) & f'(x_1) & \frac{f''(x_1)}{2!} & f[x_0, x_1, x_1, x_1] & \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
x_n & f(x_n) & f[x_{n-1}, x_n] & \dots & \dots & f[x_0, \dots, x_n]
\end{array}
$$

3.9 Efekt Rungego

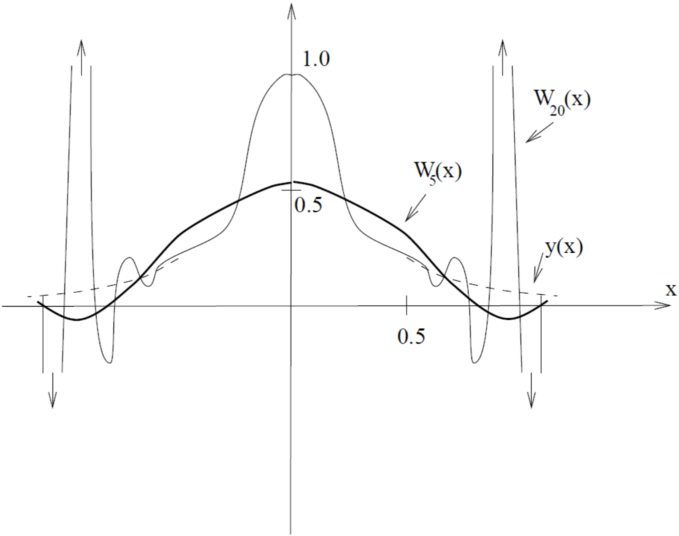
Intuicja: Zwiększenie liczby węzłów $\Rightarrow$ lepsza dokładność.
Rzeczywistość: Efekt Rungego – zmniejszenie dokładności.

(C. Runge, 1901)

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

Występuje, gdy:

- interpolujemy wielomianami
- węzły interpolacyjne są równoodległe



Rysunek 3.4: Ilustracja efektu Rungego

- Katastrofalna rozbieżność dla $0.726 \leqslant |x| < 1$.
- Lecz bardzo dobra zbieżność w strefie centralnej.

(Konsekwencja tego, że zadanie to jest *źle uwarunkowane*.)

Efekt Rungego – rady praktyczne:

- zaczynać od interpolacji liniowej,
- zwiększać liczbę węzłów i stopień wielomianu, aż do ustabilizowania istotnych miejsc.

Inne sposoby:

- interpolacja funkcjami sklejanymi
- specjalny dobór węzłów.