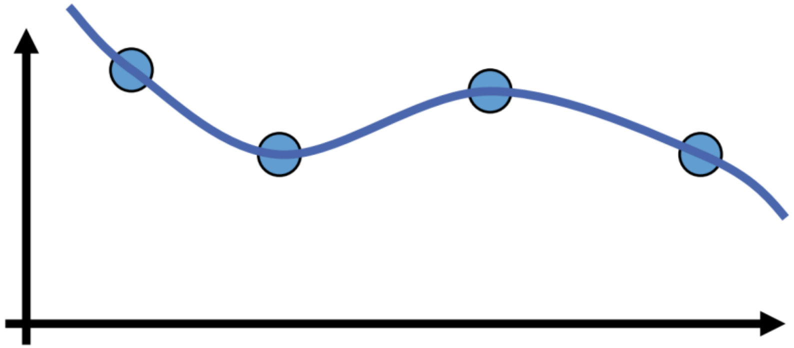
计算机辅助几何设计
2019秋学期

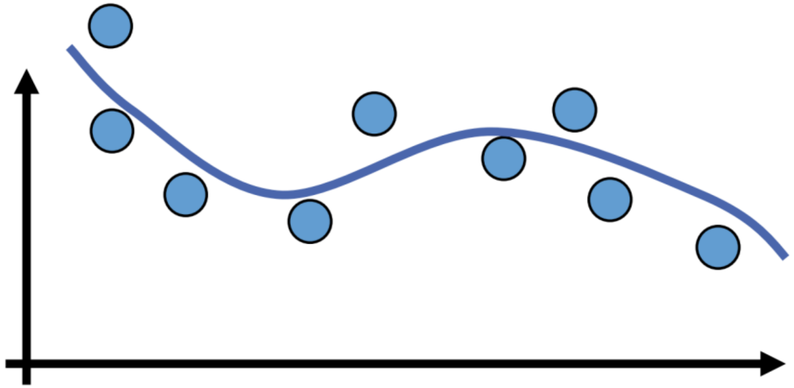
插值和逼近

陈仁杰

中国科学技术大学



插值



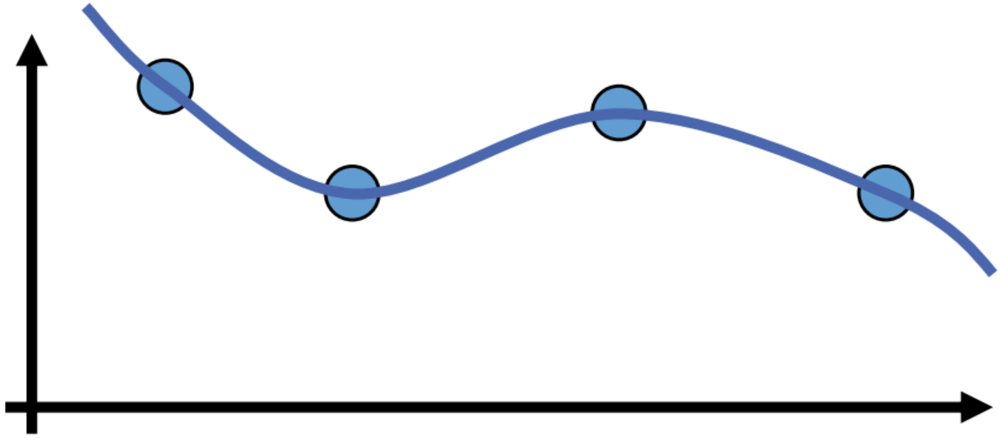
逼近

插值

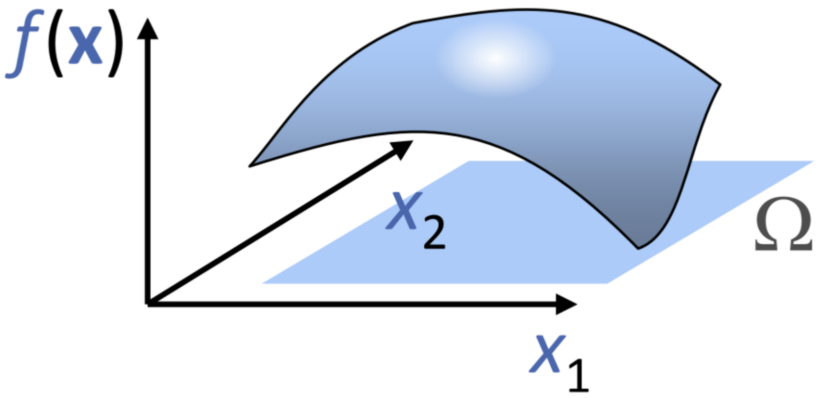
一般插值和多项式插值

插值问题

- 最简单的光滑曲线曲面建模
  - 给定曲线或曲面上一组点
  - 选择一组可张成合适的函数空间的基函数
    - 光滑基函数
    - 任意线性组合也光滑
  - 找到一个线性组合使得曲线或曲面能插值给定点



问题一般形式



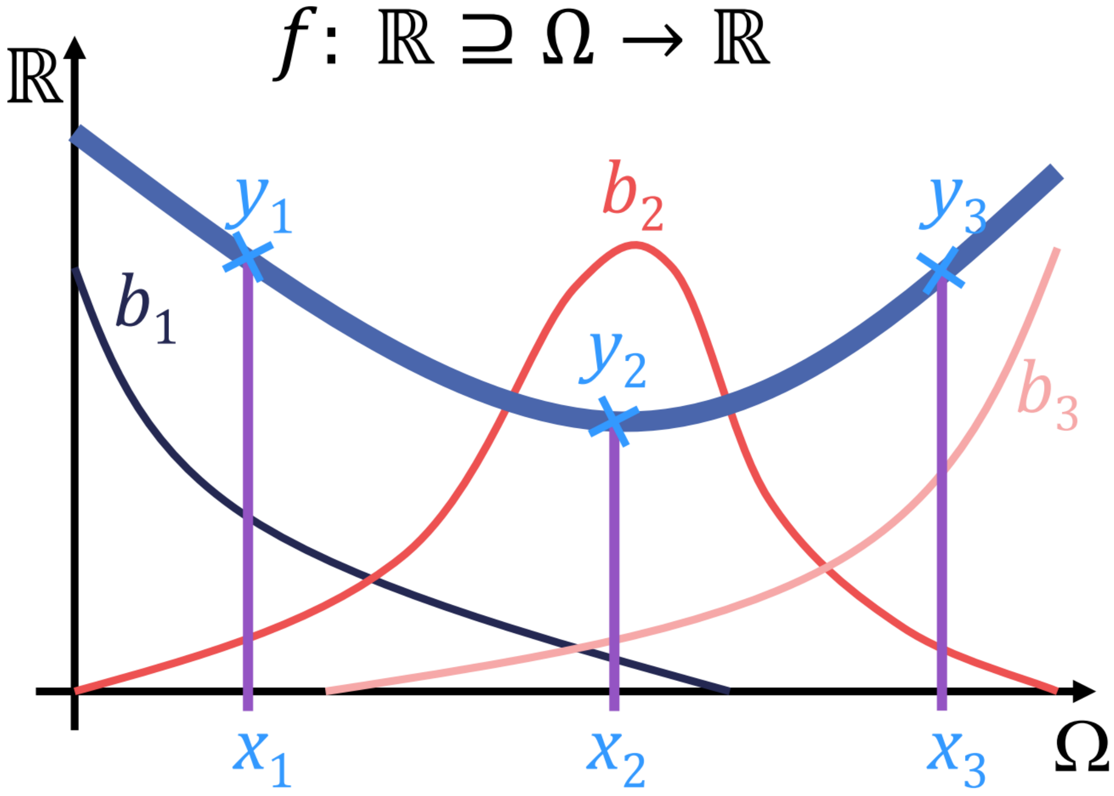
- 设定
  - 寻找定义域$\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$，值域$\mathbb{R}$上函数$f: \Omega \to \mathbb{R}$
  - 基函数集合：$B = \{b_1, \dots, b_n\}, b_i: \Omega \to \mathbb{R}$
  - 将f表示为基函数的线性组合

$$f_\lambda(x) = \sum_{k=0}^{n} \lambda_i b_i(x)$$

$$f \text{ 由 } \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \dots \\ \lambda_n \end{pmatrix} \text{唯一确定}$$

  - 函数值 $\{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}, (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$
  - 目标找到λ使得$f_\lambda(x_i) = y_i$对所有i成立

示意图



1D Example

插值问题求解

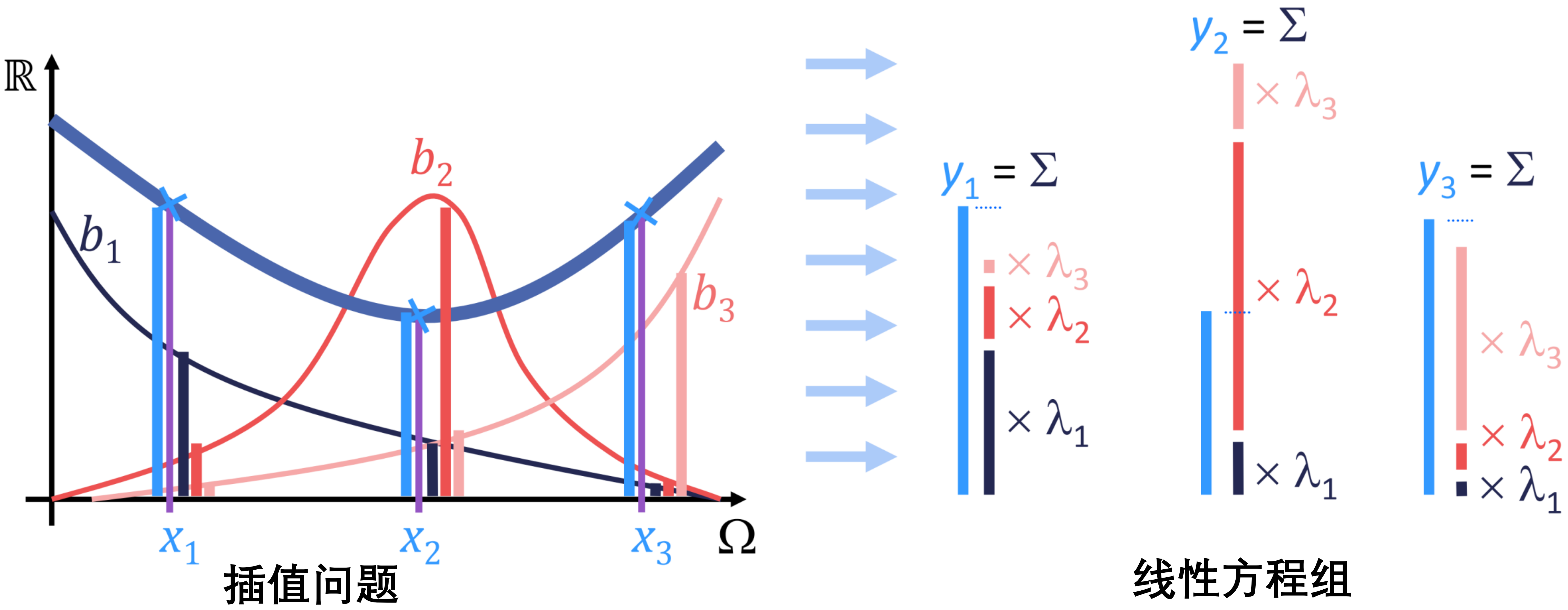
- 解决方法：构造线性方程组
  - 在数据点x_i上计算基函数:

$$\forall i \in \{1,\dots,n\}:\ \sum_{i=1}^{n} \lambda_i b_i(x_i) = y_i$$

  - 写成矩阵形式

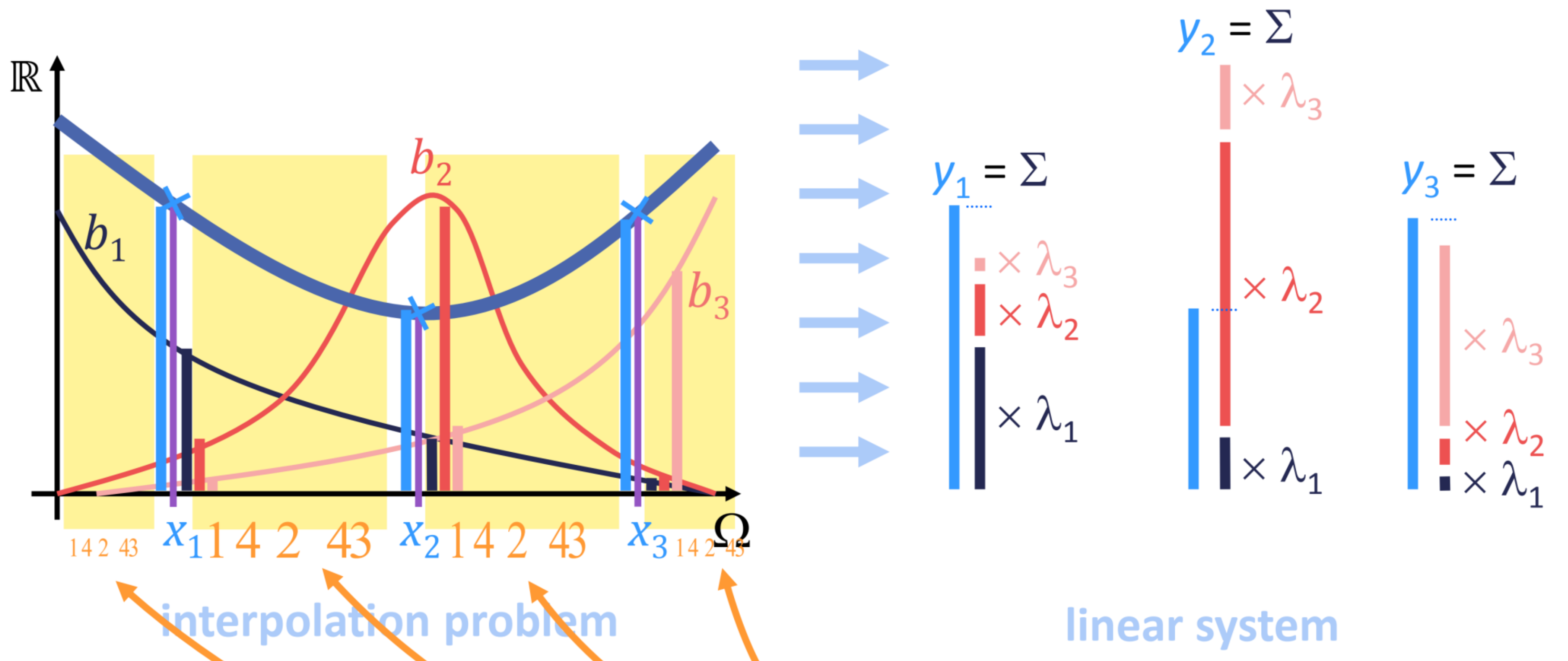
$$\begin{pmatrix} b_1(x_1) & \cdots & b_n(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_1(x_n) & \cdots & b_n(x_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

示意图



$\mathbb{R}$
b_1
b_2
b_3
x_1
x_2
x_3
Ω
插值问题
$y_1 = \Sigma$
$\times \lambda_3$
$\times \lambda_2$
$\times \lambda_1$
$y_2 = \Sigma$
$\times \lambda_3$
$\times \lambda_2$
$\times \lambda_1$
$y_3 = \Sigma$
$\times \lambda_3$
$\times \lambda_2$
$\times \lambda_1$
线性方程组

示意图



空白处可取任意值，
由基函数确定

多项式插值示例

- 多项式基$B = \{1, x, x^2, x^3, \ldots, x^{n-1}\}$
- 求解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & \ldots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & \ldots & x_2^{n-1} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \ldots \\ \lambda_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_n \end{pmatrix}$$

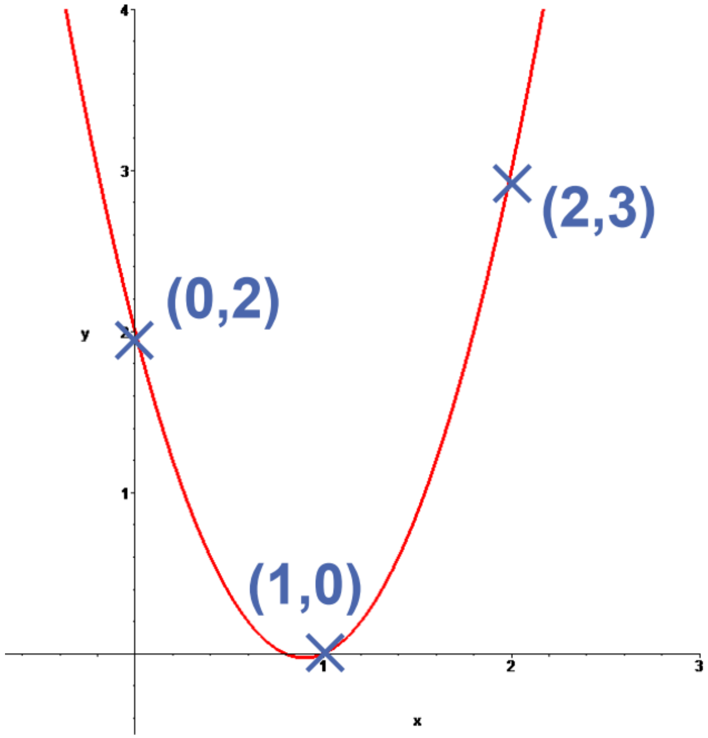
Vandermonde 范德蒙矩阵

数值实例

- 二次幂基(单项式) $B = \{1, x, x^2\}$
- 函数值$\{(0,2),(1,0),(2,3)\}$ $[(x,y)]$
- 求解线性系统

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$

解为： $\lambda_1 = 2,\ \lambda_2 = -\frac{9}{2},\ \lambda_3 = 5/2$



多项式插值存在的问题

- 系统矩阵稠密
- 依赖于基函数选取，矩阵可能病态，导致难于求解（求逆）

病态矩阵示例

- 考虑二元方程组
  - 解为(1,1)

$$\begin{aligned} x_1 + 0.5x_2 &= 1.5 \\ 0.667x_1 + 0.333x_2 &= 1 \end{aligned}$$

- 对第二个方程右边项扰动0.001
  - 解为$(0,3)$

$$\begin{aligned} x_1 + 0.5x_2 &= 1.5 \\ 0.667x_1 + 0.333x_2 &= 0.999 \end{aligned}$$

- 对矩阵系数进行扰动
  - 解为$(2,-1)$

$$\begin{aligned} x_1 + 0.5x_2 &= 1.5 \\ 0.667x_1 + 0.334x_2 &= 1 \end{aligned}$$

病态问题

- 输入数据的细微变化导致输出(解)的剧烈变化

- 将线性方程看成直线（超平面）
  - 当系统病态时，直线变为近似平行
  - 求解(即直线求交)变得困难、不精确

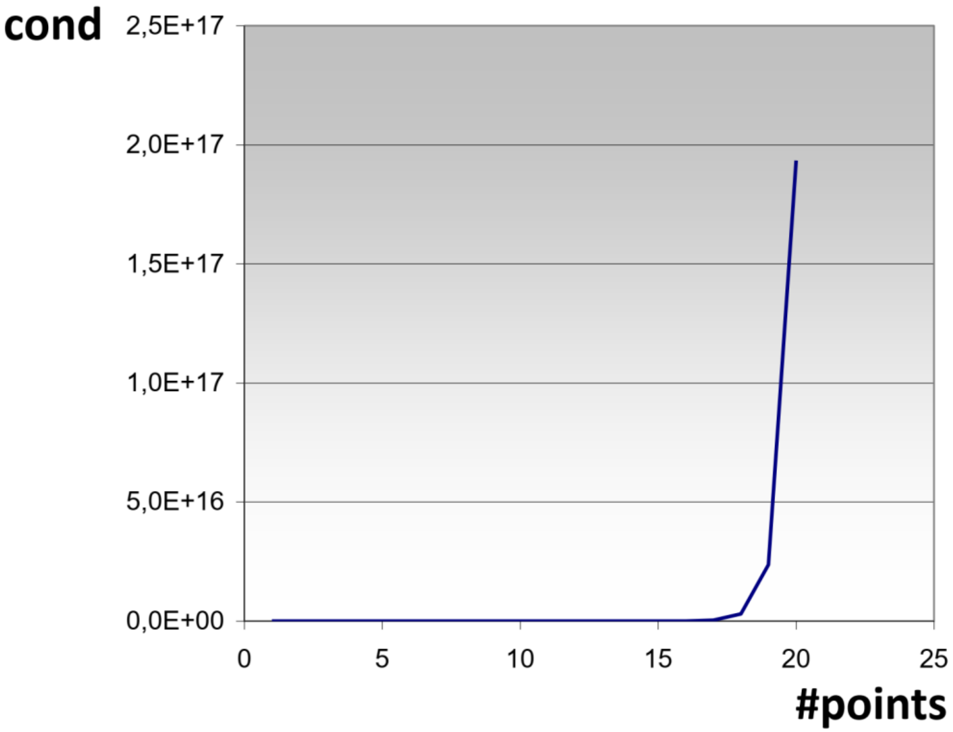
矩阵条件数

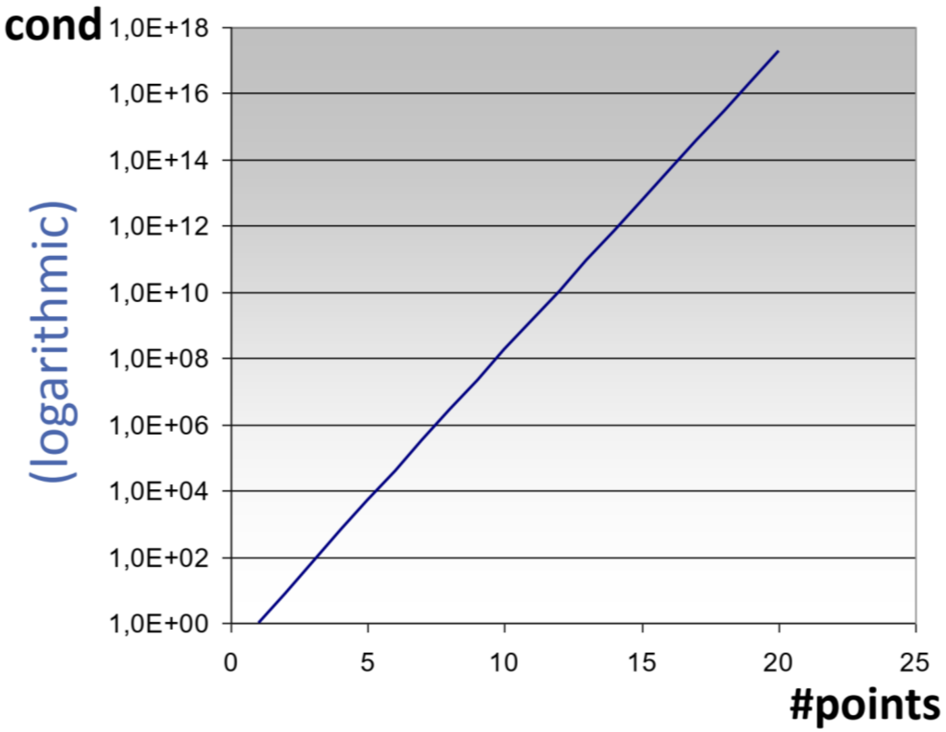
$$\kappa_2(A) = \frac{\max\limits_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}}{\min\limits_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}}$$

- 等于最大特征值和最小特征值之间比例
- 条件数大意味着基元之间有太多相关性

矩阵条件数

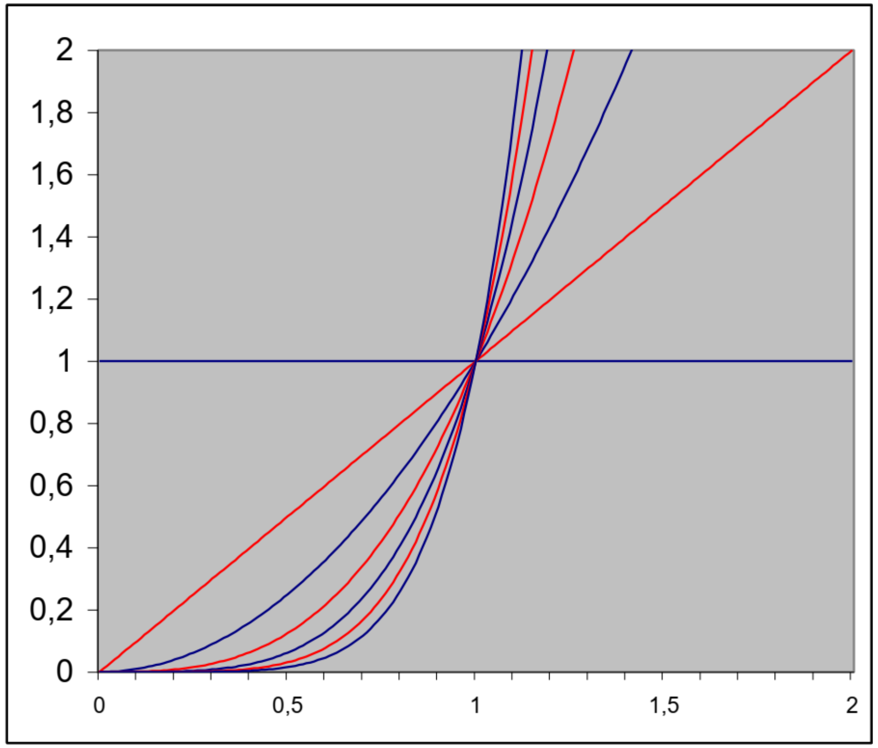
- 多项式插值问题是病态的
  - 对于等距分布的数据点x_i，范德蒙矩阵的条件数随着数据点数n呈指数级增长（多项式的最高次数为$n-1$）





为什么？

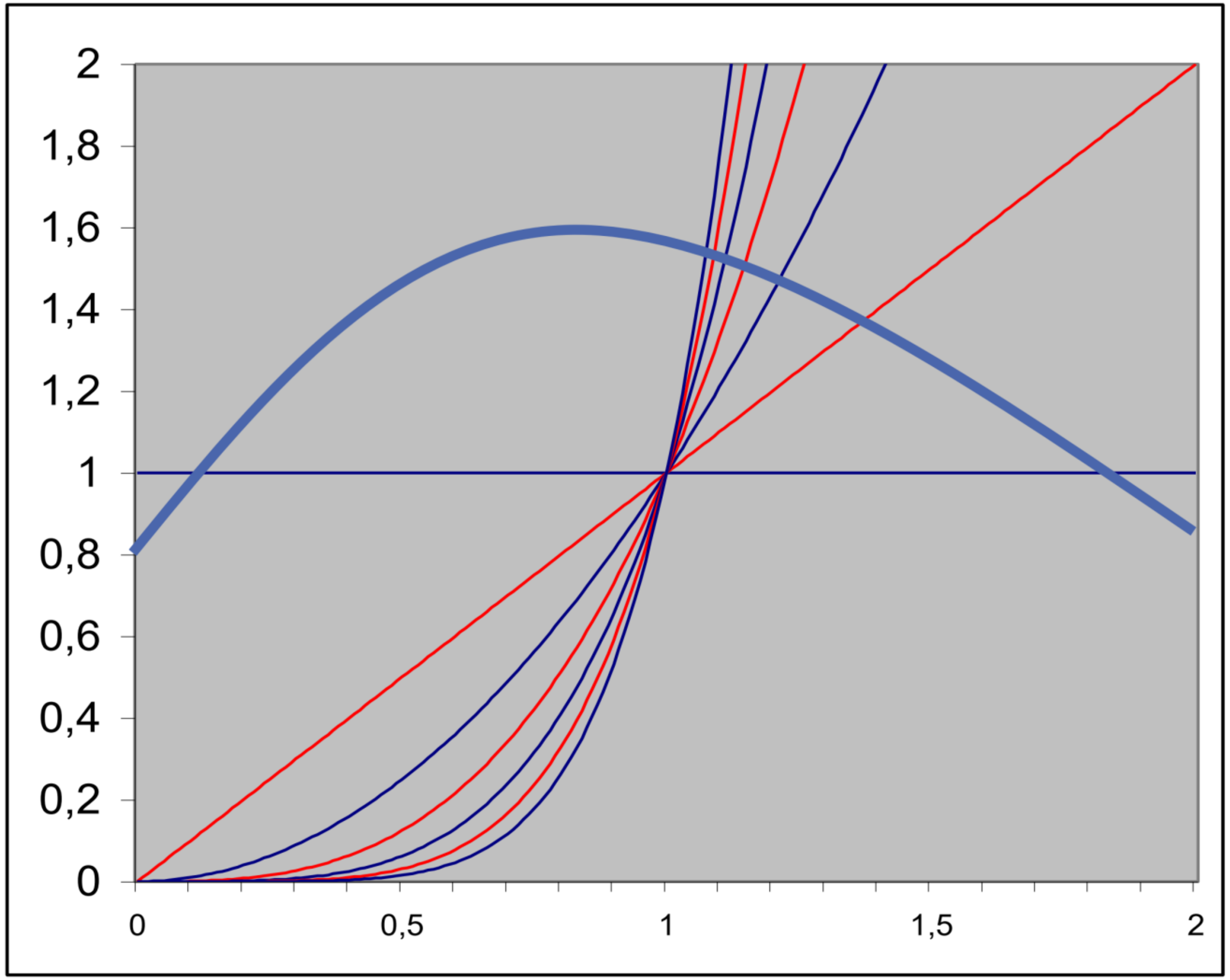
- 幂（单项式）函数基
  - 幂函数之间差别随着次数增加而减小
  - 不同幂函数之间唯一差别为增长速度(x^i比x^{i-1}增长快)



幂(单项式) 函数

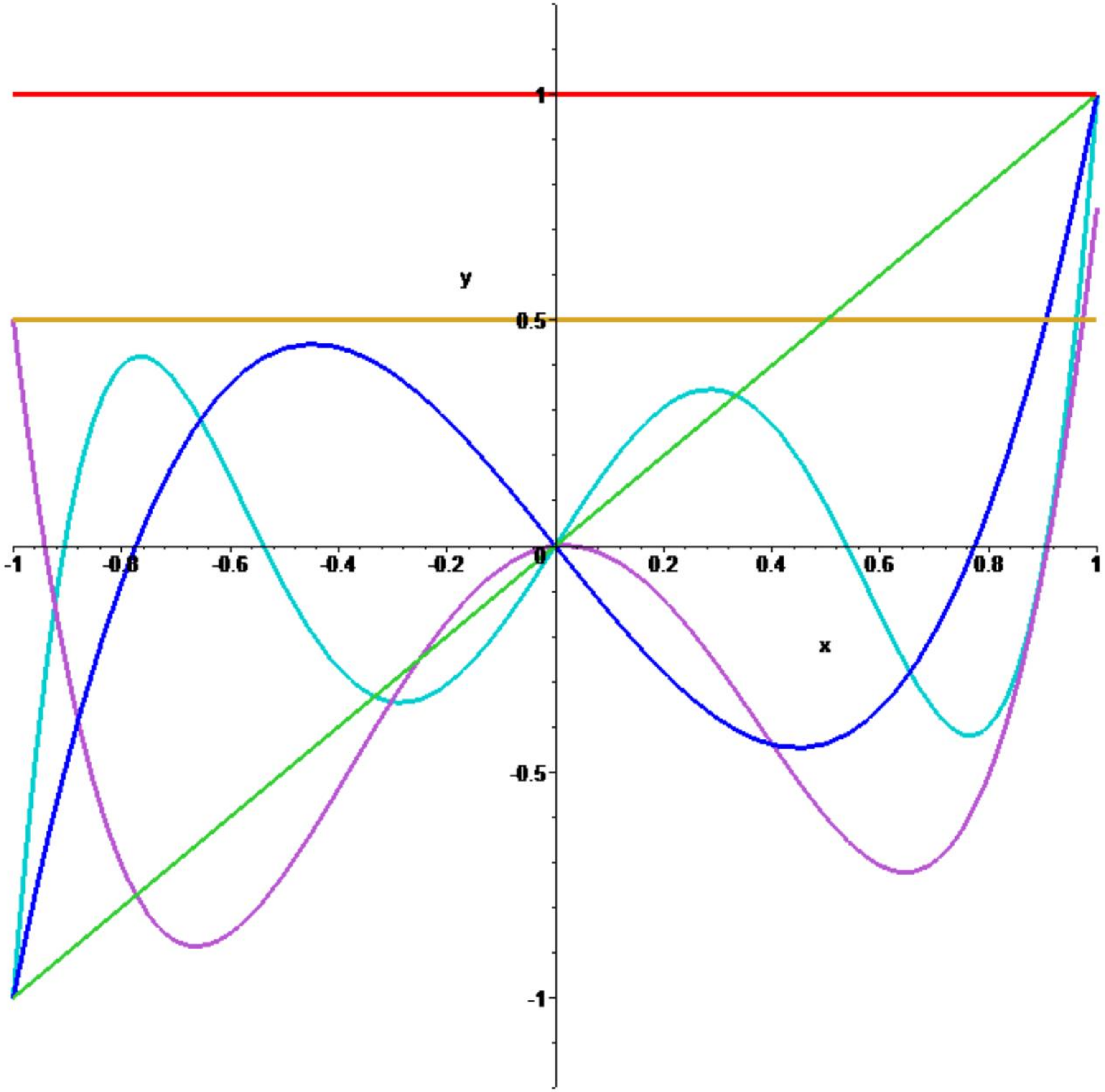
函数互相抵消

- 单项式:
  - 从左往右
  - 首先常函数1主宰
  - 接着x增长最快
  - 接着x^2增长最快
  - 接着x^3增长最快
  - …
- 趋势
  - 好的基函数一般需要系数交替
  - 互相抵消问题



解决方法

- 使用正交多项式基
- 如何获得?
  - Gram-Schmidt正交化



另一方法

- 能否避免求解线性方程组?

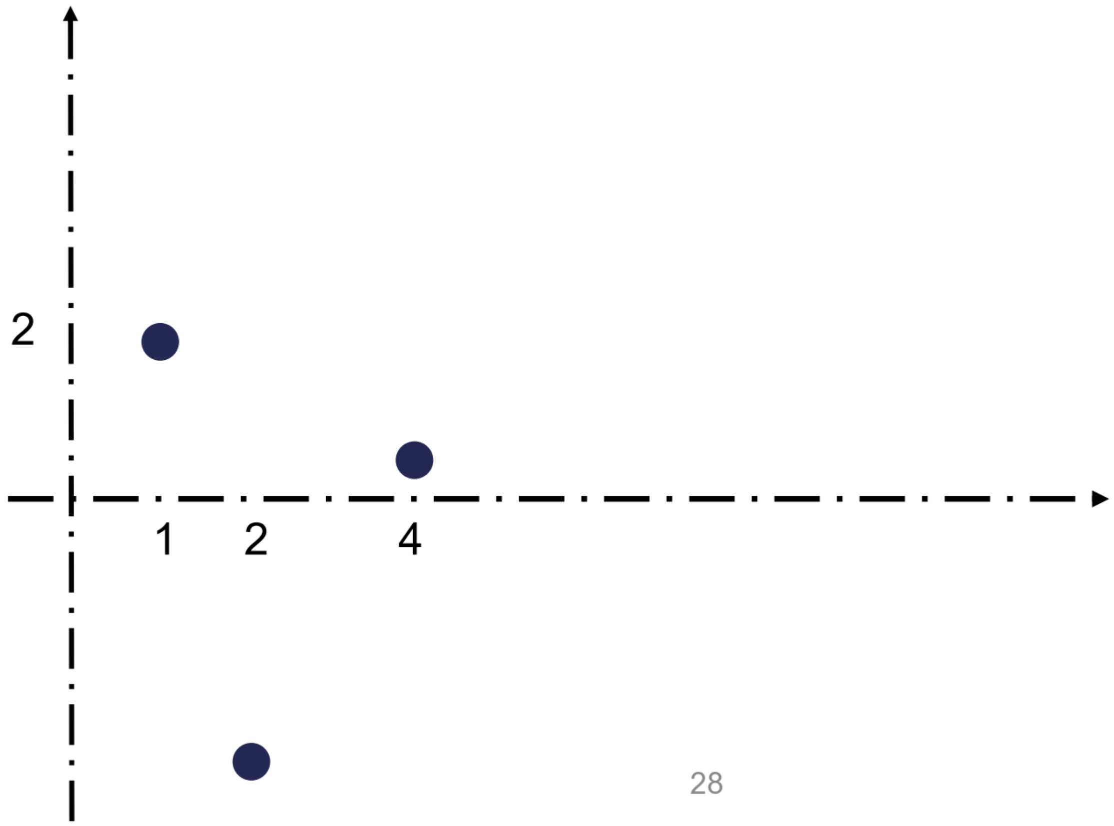
另一方法

- 能否避免求解线性方程组？

从不同基函数着手…

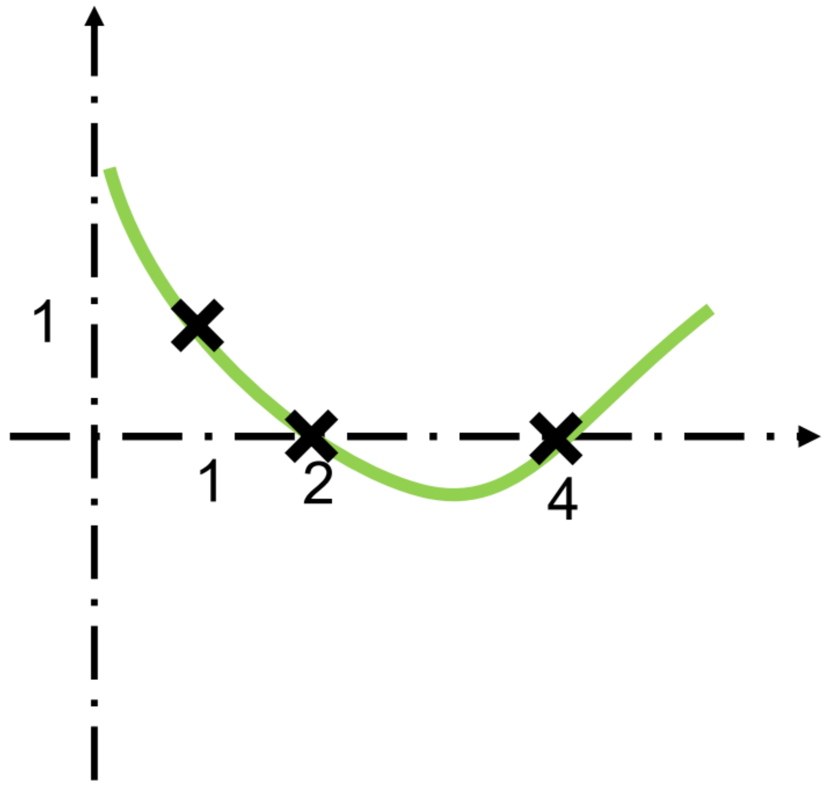
示例

- 通过$(1,2)$, $(2,-3)$, $(4,0.5)$三点的二次多项式



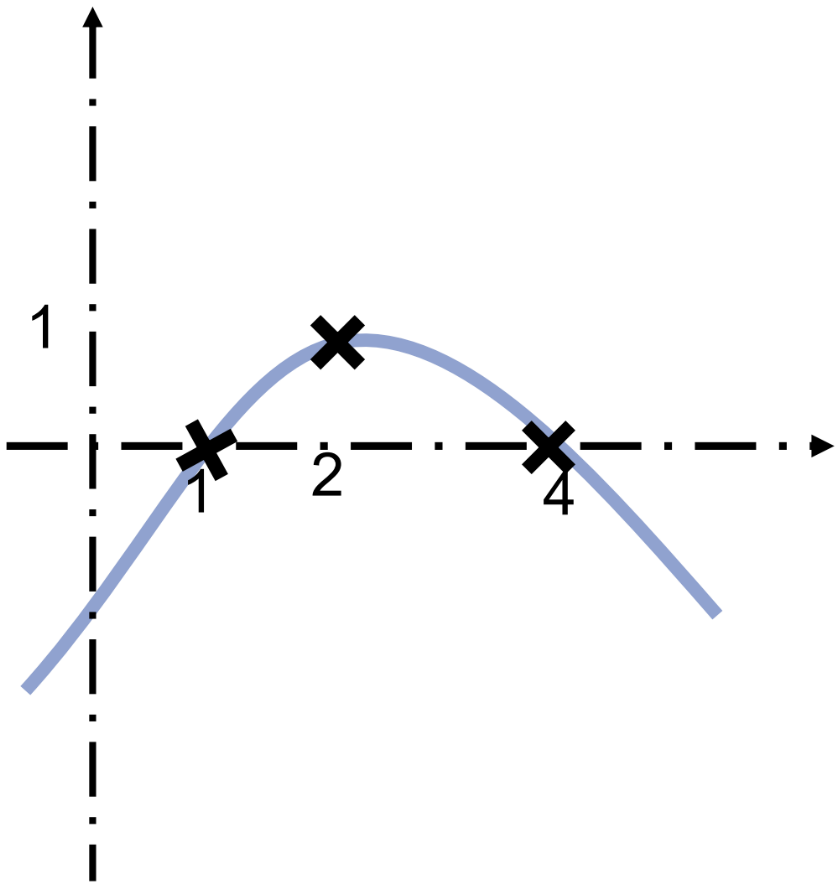
示例

- 假设可以构造二次多项式$P_0(x)$，使其在x_0处取值为1，而另两点x_1, x_2处取值为0



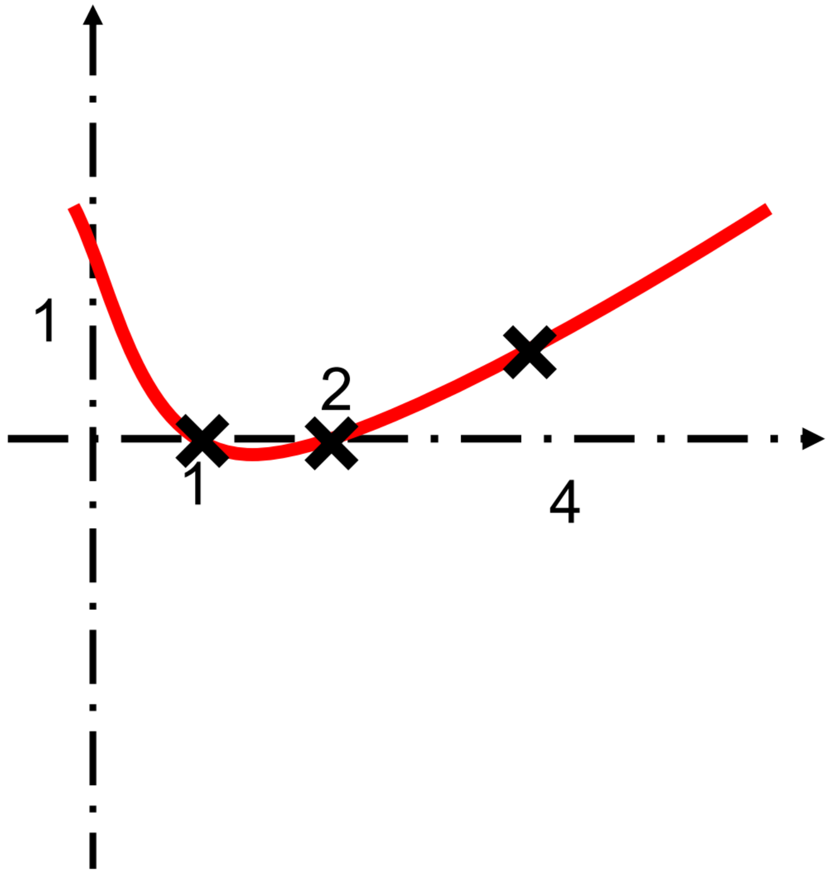
示例

- 类似地，构造$P_1(x)$，在x_1处取值为1，在x_0, x_2处取值为0



示例

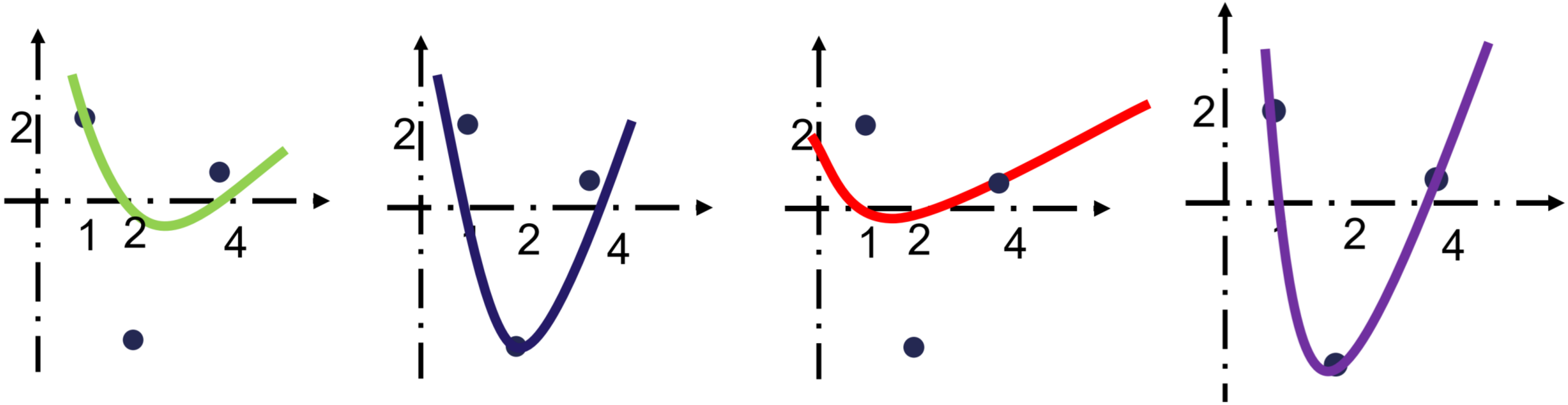
- 构造$P_2(x)$，在x_2处取值为1，在x_0, x_1处取值为0



示例

- 对$P_i(x)$进行缩放使得$P_i(x_i) = y_i$,
- 然后求和

$$P(x) = y_0P_0(x) + y_1P_1(x) + y_2P_2(x)$$



$$2P_0(x) \quad + \quad -3P_1(x) \quad + \quad 0.5P_2(x) \quad = \quad P(x)$$

一般形式

- 构造插值问题的通用解
  - 给定$n+1$个点$\{(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)\}$，寻找一组次数为$n$的多项式基函数$l_i$使得
$$l_i(x_j) = \begin{cases} 1, 若 i = j \\ 0, 若 i \neq j \end{cases}$$
  - 插值问题的解为：
$$P(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + \cdots + y_n l_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x)$$

一般形式

- 怎么计算多项式$l_i(x)$?
  - n阶多项式，且有以下n个根

    $$x_0, x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$$

  - 故可表示为

    $$l_i(x) = C_i(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n)$$

    $$= C_i \prod_{j \neq i} (x - x_j)$$

  - 由$l_i(x_i) = 1$可得

    $$1 = C_i \prod_{j \neq i} (x_i - x_j) \Rightarrow C_i = \frac{1}{\prod_{j \neq i}(x_i - x_j)}$$

一般形式

- 最终多项式基函数为

$$l_i(x) = \frac{\prod_{j \neq i}(x - x_j)}{\prod_{j \neq i}(x_i - x_j)}$$

- 多项式$l_i(x)$被称为拉格朗日多项式

问题

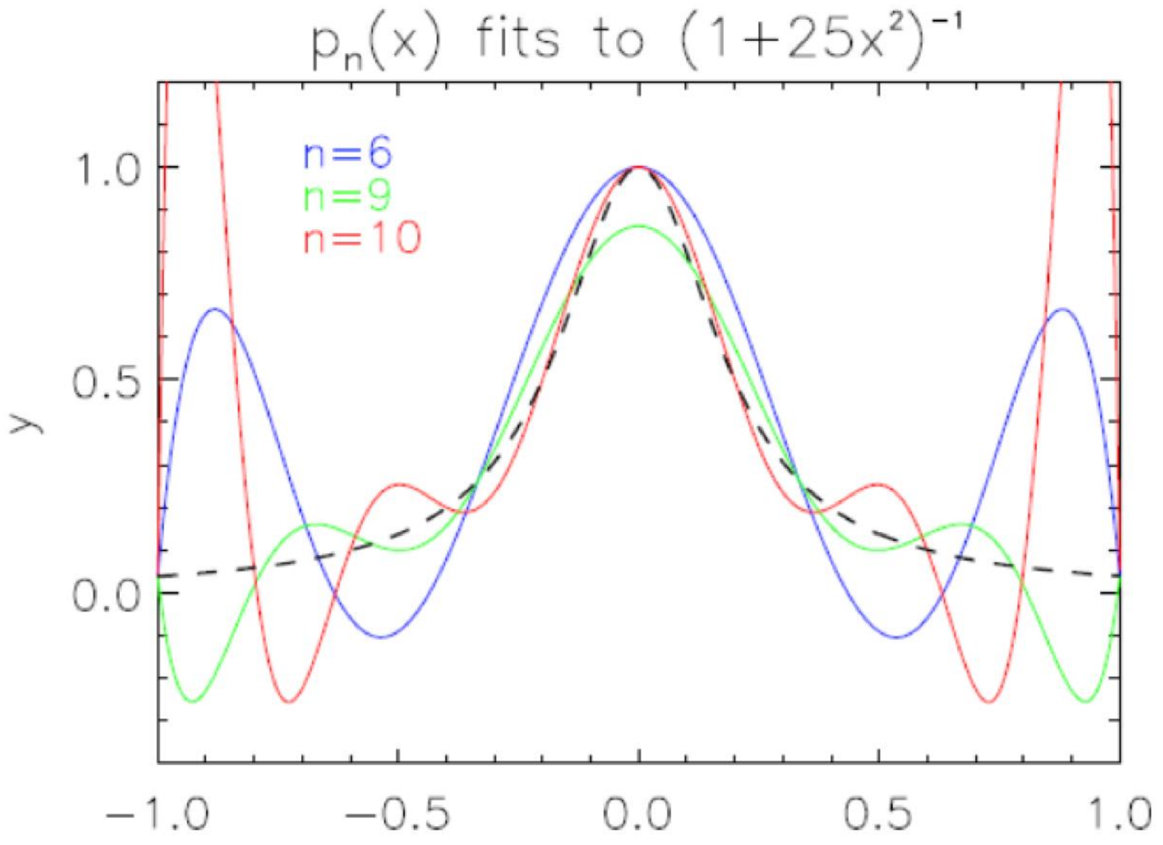
- 给定同一组输入点，用拉格朗日多项式和利用范德蒙矩阵（单项式基）进行插值，得到的解是否不同?

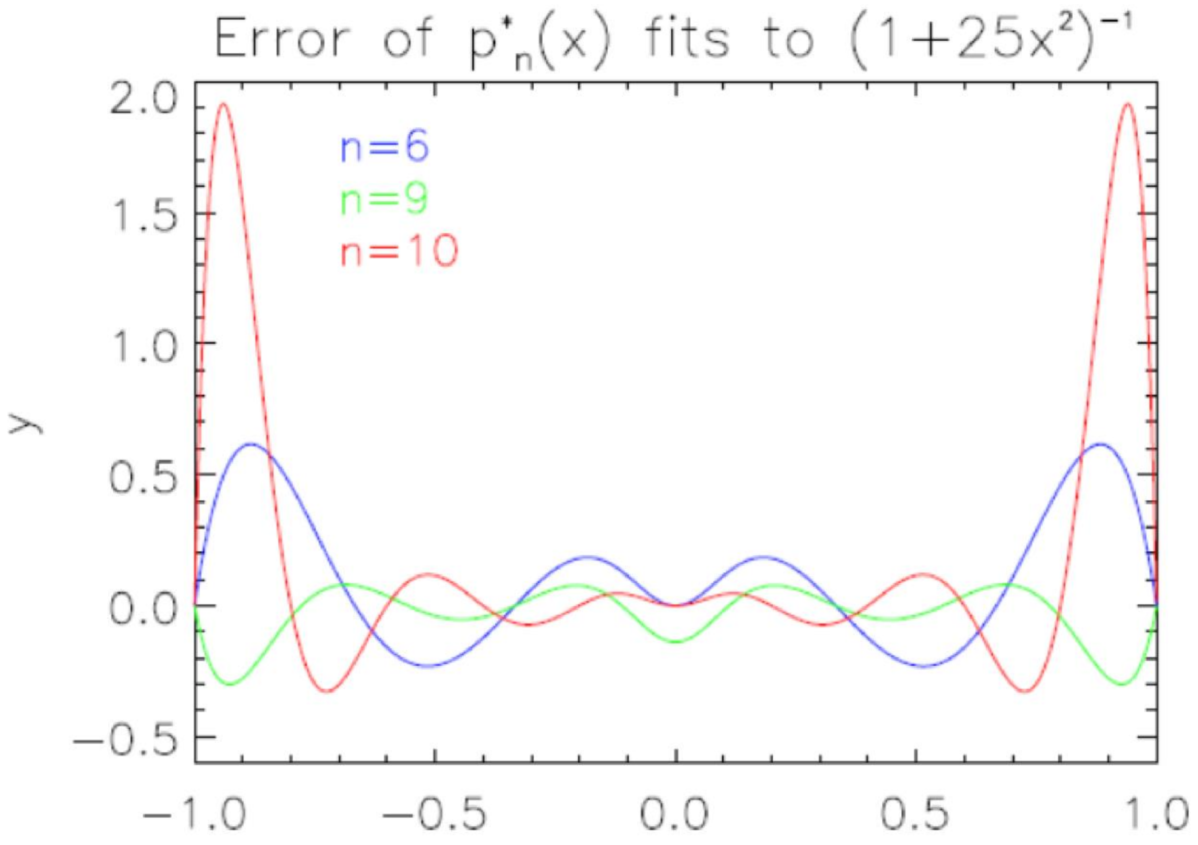
问题

- 给定同一组输入点，用拉格朗日多项式和利用范德蒙矩阵（单项式基）进行插值，得到的解是否不同？

- 答案：两个解完全相同！
  - 假设解不同。记两个解的差别多项式为R_n，R_n阶数至多为n
  - 那么$R_n(x_i) = 0, i = 0 \dots n$，$x_i$为不同插值点。因此$R_n$是有$n + 1$个根的$n$阶为多项式$\Rightarrow R_n = 0$

多项式插值结果好吗?





振荡(龙格Runge)现象和对插值点数的高度敏感性

观察$n = 9$(10个数据点)和$n = 10$(11个数据点)的差别

结论

- 多项式插值不稳定
- 控制点的微小变化可导致完全不同的结果

- 振荡(Runge)现象
- 多项式随着插值点数(可以是细微)增加而摆动

➡ 需要更好的基函数来做插值
  - 例如：分片多项式的结果会好很多

逼近

多项式和最小二乘逼近

动机Motivation

- 为什么逼近?
  - 数据点含噪声(采样)
  - 更紧凑的表示
  - 计算简单
- 常用逼近函数
  - **多项式**
  - 有理函数(多项式商)
  - 三角函数

为什么用多项式?

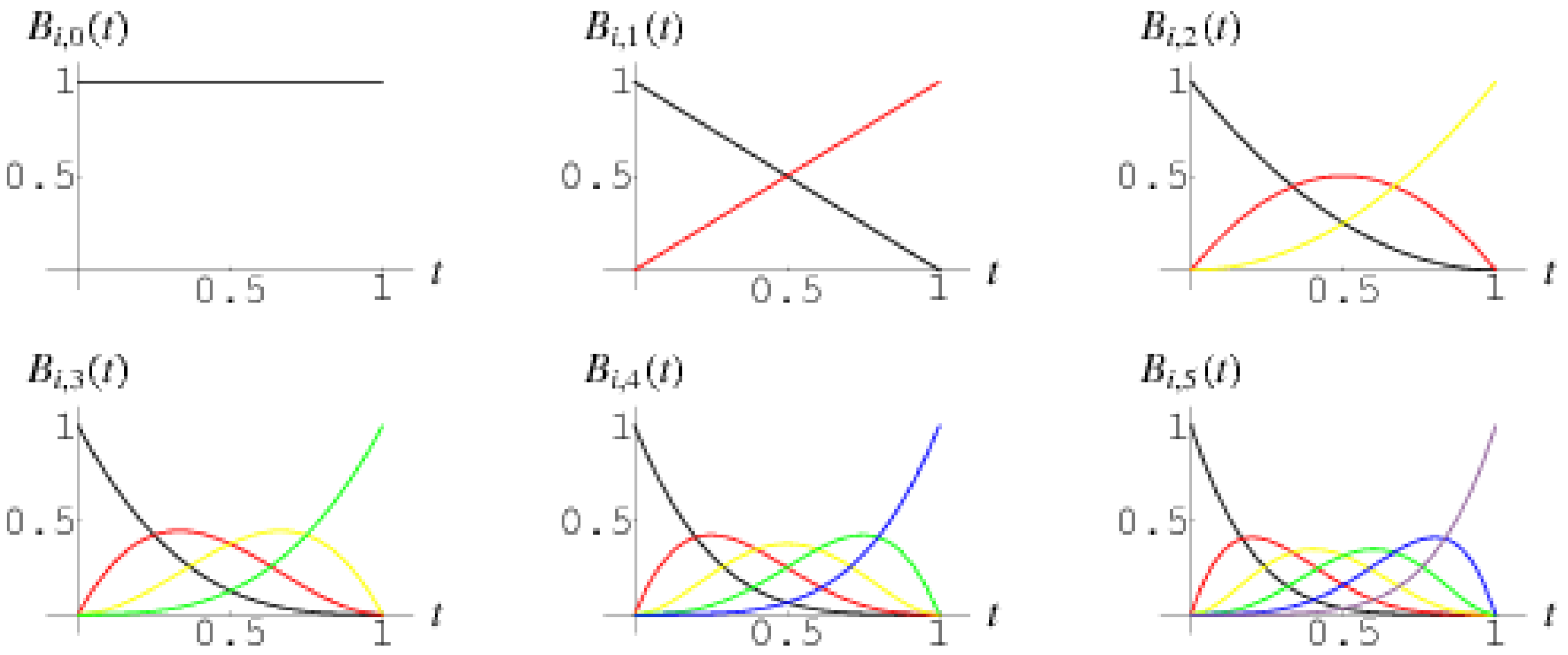
- 易于计算，表现良好，光滑，…
- 更正式理由：
  - 魏尔斯特拉斯Weierstrass定理：令f为闭区间$[a, b]$上任意连续函数，则对任意给定ε，存在n和多项式P_n使得
$$|f(x) - P_n(x)| < \varepsilon, \forall x \in [a, b]$$

  - Weierstrass只证明了存在性，未给出多项式

用Bernstein多项式做逼近

- 伯恩斯坦Bernstein给出了构造性证明（强大!）
  - 对$[\mathbf{0}, \mathbf{1}]$区间上任意连续函数$f(x)$和任意正整数n，以下不等式对所有$x \in [0,1]$成立
    $$|f(x) - B_n(f, x)| < \frac{9}{4} m_{f,n}$$
  - $m_{f,n} = \underset{y_1, y_2 \in [0,1]\text{且}|y_1 - y_2| < \frac{1}{\sqrt{n}}}{\text{lower upper bound}} |f(y_1) - f(y_2)|$
  - $B_n(f, x) = \sum_{j=0}^{n} f\left(x_j\right) b_{n,j}(x)$，其中$x_j$为[0,1]上等距采样点
  - $b_{n,j} = \binom{n}{j} x^j (1 - x)^{n-j}$为Bernstein多项式

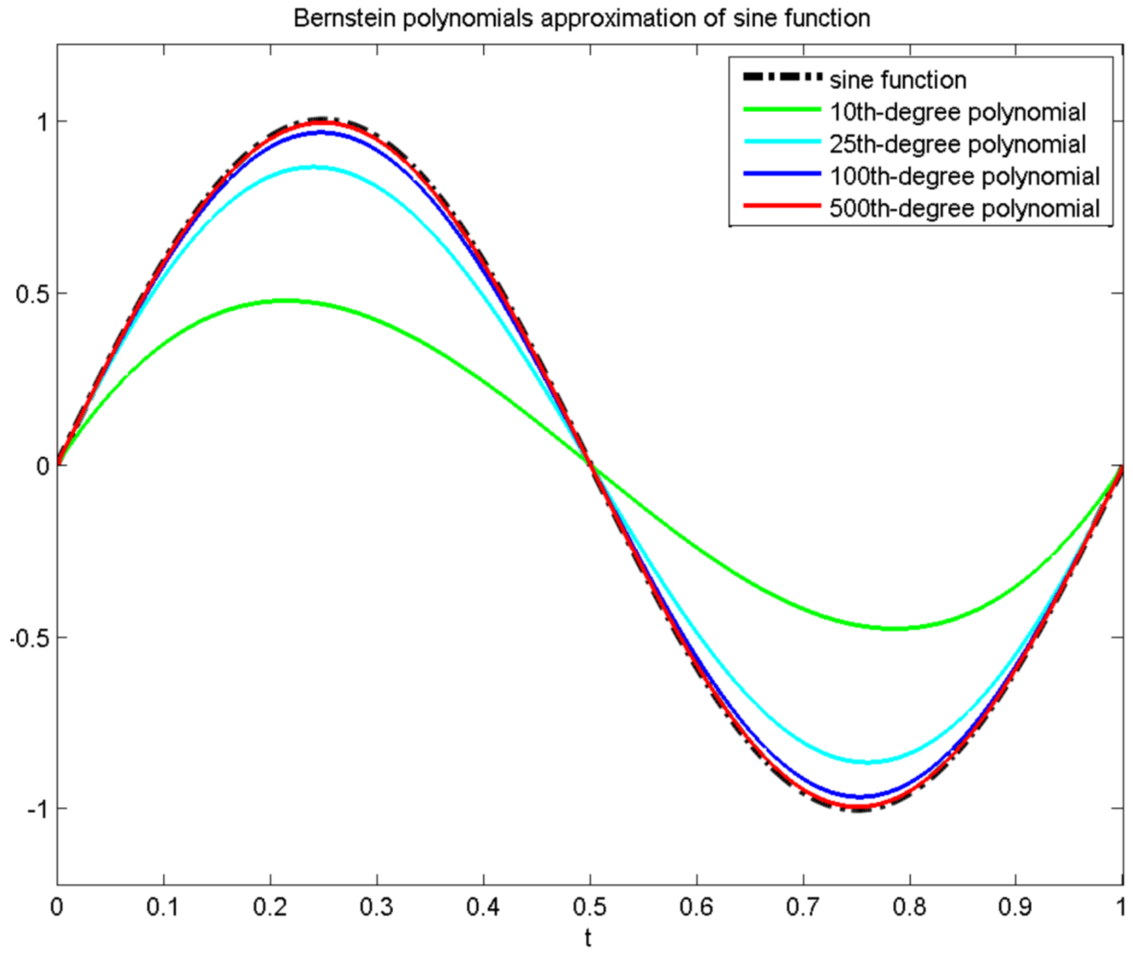
Bernstein多项式



- $b_{0,0}(x) = 1$
- $b_{0,1}(x) = 1 - x, \quad b_{1,1} = x$
- $b_{0,2}(x) = (1-x)^2, \; b_{1,2} = 2x(1-x), \quad b_{2,2} = x^2$
- $b_{0,3}(x) = (1-x)^3, \; b_{1,3} = 3x(1-x)^2, \; b_{2,3} = 3x^2(1-x), \quad b_{3,3} = x^3$
- $b_{0,4}(x) = (1-x)^4, \; b_{1,4} = 4x(1-x)^3, \; b_{2,4} = 6x^2(1-x)^2, \; b_{3,4} = 4x^3(1-x), \quad b_{4,4} = x^4$

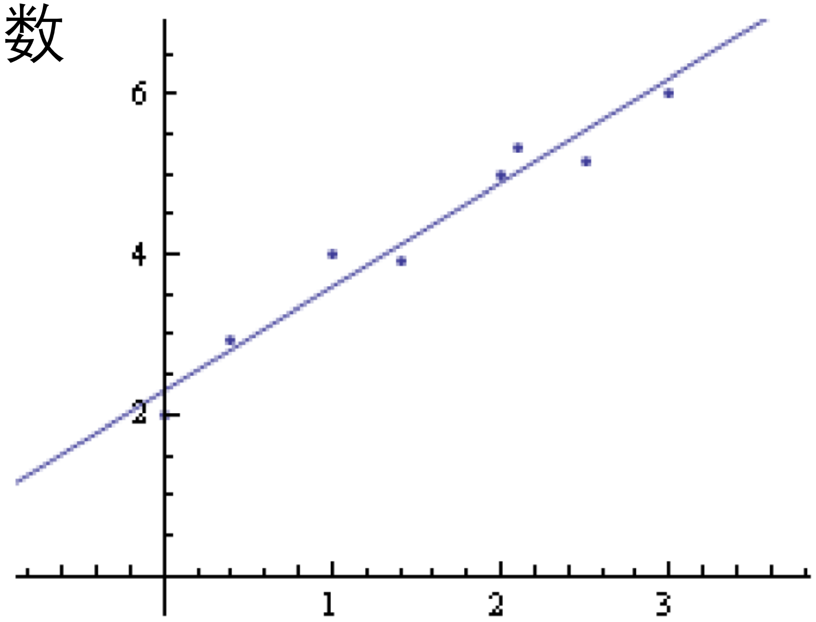
用Bernstein多项式做逼近

- Bernstein多项式逼近示例
  - 逼近结果优秀，但需要高阶
  - 计算昂贵
  - 容易带来误差



最小二乘逼近

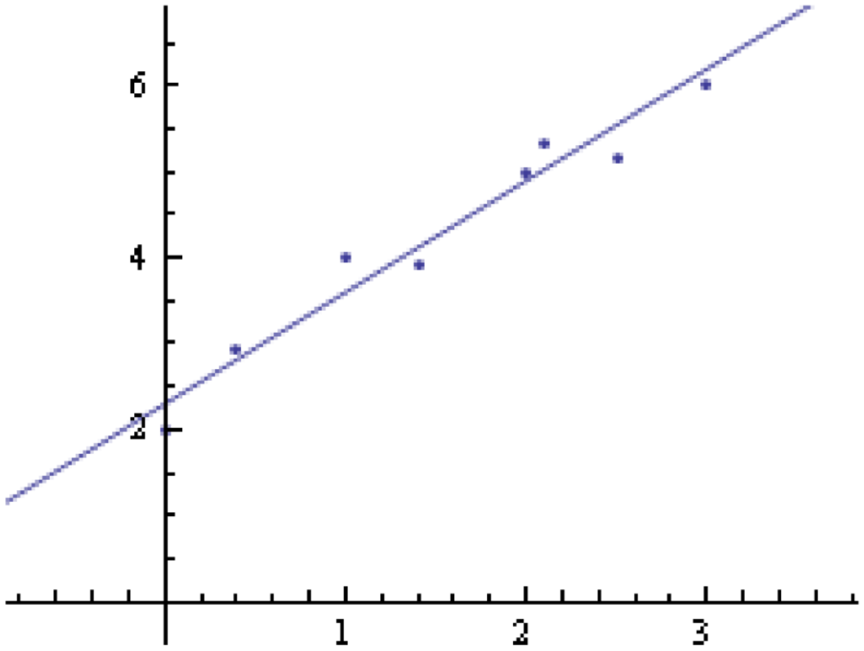
- 逼近问题
  - 给定一组线性无关的连续函数集合$B = \{b_1, \dots b_n\}$和一组结点$\{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$，其中$m > n$
  - 在B张成空间中哪个函数$f \in span(B)$对结点逼近最好？
  - 示例：给定一组点，找到最佳逼近的线性函数
  - 怎么定义“最佳逼近”？



最佳逼近的定义

- 最小二乘逼近

$$\underset{f\in span(B)}{\operatorname{argmin}} \sum_{j=1}^{m} \left(f(x_j) - y_j\right)^2$$



$$\sum_{j=1}^{m}\left(f(x_j)-y_j\right)^2 = \sum_{j=1}^{m}\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i b_i(x_j)-y_j\right)^2$$

$$= (M\lambda - y)^T(M\lambda - y)$$

$$= \lambda^T M^T M\lambda - y^T M\lambda - \lambda^T M^T y + y^T y$$

$$= \lambda^T M^T M\lambda - 2y^T M\lambda + y^T y$$

$$M = \begin{pmatrix} b_1(x_1) & \dots & b_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ b_1(x_m) & \dots & b_n(x_m) \end{pmatrix}$$

求解

- 关于λ的二次多项式

$$\lambda^T M^T M\lambda - 2y^T M\lambda + y^T y$$

- 法方程
  - 最小解满足

$$M^T M\lambda = M^T \mathrm{y}$$

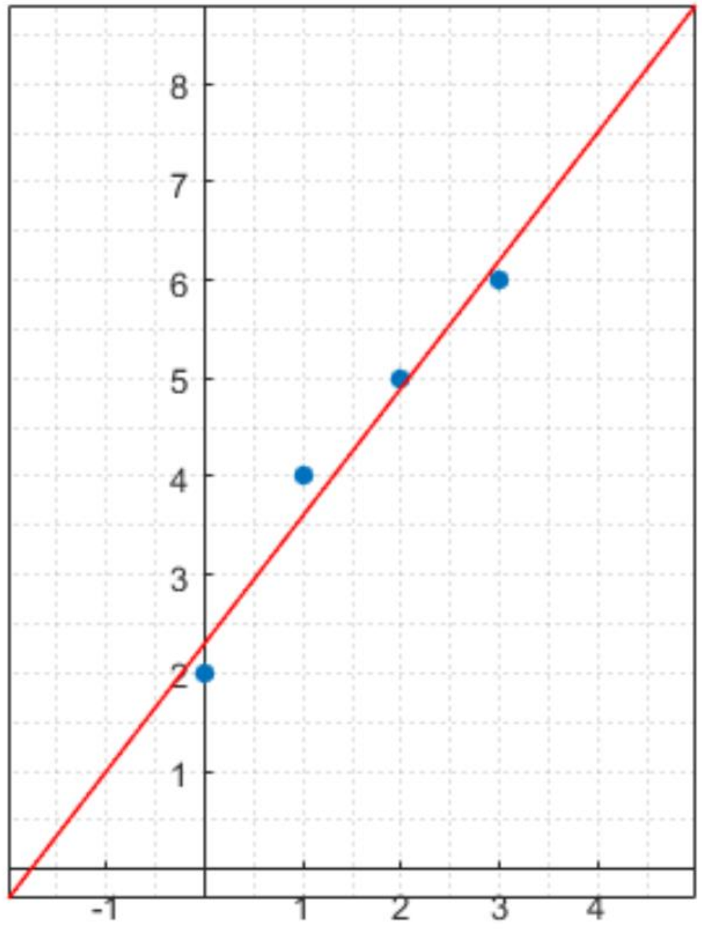
- 提示
  - 最小化二次目标函数 $x^T Ax + b^T x + c$
  - 充分必要条件: $2Ax = -b$

示例：线性逼近

```
%input
x=[0 1 2 3]';
y=[2 4 5 6]';

%setup the matrix
M=[zeros(4,1) x];

%solve the least square
c=(M'*M)\(M'*y);
```

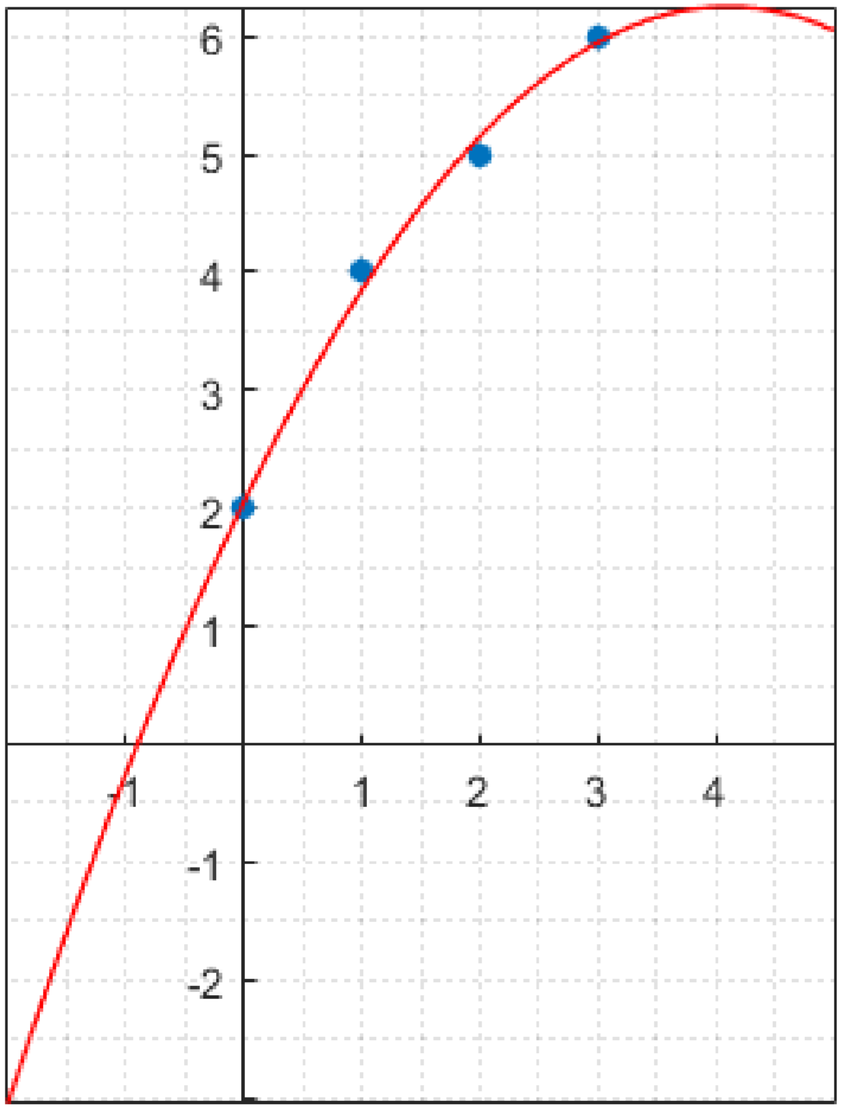


示例：二阶逼近

```
%input
x=[0 1 2 3]';
y=[2 4 5 6]';

%setup the matrix
M=[zeros(4,1) x x.^2];

%solve the least square
c=(M'*M)\(M'*y);
```



Questions?