《数值分析》之

函数逼近

徐岩

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

https://faculty.ustc.edu.cn/yxu

多变量插值问题

- 多变量函数的光滑插值问题是相当困难的，此时会出现一些在单变量插值理论中所没有的异常特征。两变量插值与多于两变量的插值情形类似。
- 问题：给定xy平面内的插值点集合，记为

$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$$

假设这n个点不相同。每个点(x_i, y_i)指定一个实数c_i. 我们的目的是寻找一个光滑并且容易计算的函数F满足

$$F(x_i, y_i) = c_i$$

例：二元二次多项式插值

- 考虑所有总次数不超过二的二元多项式全体，它构成的线性空间维数为6，因此在用这个空间构造插值多项式时，自然是给定六个插值结点(x_i, y_i)和函数值c_i. 在幂基$1, x, y, x^2, xy, y^2$下待定系数时对应的系数矩阵为

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1^2 & x_1y_1 & y_1^2 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2^2 & x_2y_2 & y_2^2 \\ 1 & x_3 & y_3 & x_3^2 & x_3y_3 & y_3^2 \\ 1 & x_4 & y_4 & x_4^2 & x_4y_4 & y_4^2 \\ 1 & x_5 & y_5 & x_5^2 & x_5y_5 & y_5^2 \\ 1 & x_6 & y_6 & x_6^2 & x_6y_6 & y_6^2 \end{pmatrix}$$

- 这个系数矩阵的行列式为零当且仅当给定的六个插值节点在一条二次曲线上。因此这时的插值问题的存在性和唯一性不是很显然
- 特别地，如果六个结点共线，那么只有当多项式的次数达到五次时才会有解

研究问题与应用

- 讨论对给定的插值基函数，如何选择插值结点，使插值多项式存在
- 在数据处理问题中，要求对给定点的值，构造恰当的插值基函数以及插值多项式
- 在代数学中把插值问题解释为代数形式的中国剩余定理，实际解决这一问题涉及到构造性代数几何。已有人应用其中的方法解决了对给定插值结点组构造插值基的问题
- 多元插值比一元插值有更广泛的应用前景。如：二元函数插值解决的是空间中曲面构造的问题，这是CAD 中形体设计所需要的。

张量积形式

- 考察单变量多项式插值的Lagrange形式：给定结点x_1, x_2, $\ldots$, x_p以及函数f, 那么插值相当于定义了一个线性算子P:

$$(Pf)(x) = \sum_{i=1}^{p} f(x_i)u_i(x), \quad u_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{p} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

- 算子P也可以推广作用在多变量函数上。如果f是x, y的函数，那么

$$(\overline{P}f)(x, y) = \sum_{i=1}^{p} f(x_i, y)u_i(x)$$

相当于在垂直线L_i上插值f的一个二元函数，
即$(\overline{P}f)(x_i, y) = f(x_i, y)$, 其中

$$L_i := \{(x_i, y) : -\infty < y < +\infty\}$$

- 假设在y方向有另外的插值结点$y_1, y_2, \ldots, y_q$，那么可以类似定义线性算子

$$(Qf)(y) = \sum_{i=1}^{q} f(y_i)v_i(y),$$

$$(\overline{Q}f)(x,y) = \sum_{i=1}^{q} f(x,y_i)v_i(y)$$

其中$v_i(y)$为相应的Lagrange插值基函数
- 定义新的算子如下：

$$(\overline{PQ}f)(x,y) = \overline{P}(\overline{Q}f)(x,y) = \sum_{i=1}^{p} (\overline{Q}f)(x_i,y)u_i(x)$$

$$= \sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{q} f(x_i,y_j)v_j(y)u_i(x)$$

那么$(\overline{PQ}f)(x,y)$在结点(x_i,y_j)上插值于函数$f(x,y)$

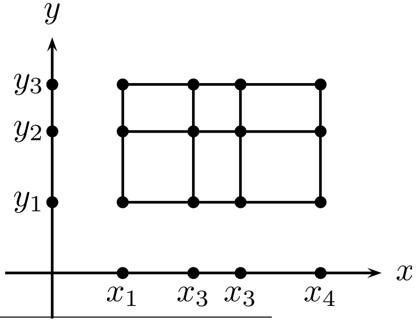
分析

- 实际上，在前面出现的基函数$u_i(x)$和$v_j(y)$可以不必是相应的Lagrange基函数，只要满足

$$u_i(x_j) = \delta_{ij}, \qquad v_i(y_j) = \delta_{ij}$$

即可，不过此时定义的结果$(\overline{PQ}f)(x,y)$并不一定是多项式

- 类似于(x_i, y_j), $i = 1, \ldots, p$, $j = 1, \ldots, q$, 形式的结点形成的阵列称为Cartesian[1]网格(grid)



[1] R. Descartes (1596–1650)的拉丁文写法为Cartesius

- 算子$(\overline{PQ}f)(x,y)$给出了在特殊结点上构造插值函数的一种方法，这个算子称为P和Q的张量积(tensor-product)：$P\otimes Q$
- 此时，如果基本算子中采用Lagrange基函数，则相当于在Cartesian网格插值结点时应用二元多项式空间

$$\mathrm{span}\{x^i y^j : 0\leqslant i\leqslant p-1, 0\leqslant j\leqslant q-1\}$$

  进行插值。这个空间的维数为pq，空间中多项式的次数可以记为(k,l)，其中x和y出现的最高次数分别为k和l
  - 如$p=2$，$q=2$，则相当于给定了矩形区域四个顶点处的高度，唯一确定一个次数(1,1)的函数（称为双线性(bilinear)函数）。它是一张二次曲面（哪一种呢？）

- 应用算子$P\otimes Q$可以定义一个新的算子如下：

$$\begin{aligned}[(P\oplus Q)f](x,y) &= (\overline{P}f)(x,y)+(\overline{Q}f)(x,y)-(\overline{PQ}f)(x,y)\\ &= \sum_{i=1}^{p} f(x_i,y)u_i(x)+\sum_{j=1}^{q} f(x,y_j)v_j(y)\\ &- \sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{q} f(x_i,y_j)u_i(x)v_j(y)\end{aligned}$$

- 这个算子称为P和Q的Boolean和，满足

$$[(P\oplus Q)f](x_i,y)=f(x_i,y),[(P\oplus Q)f](x,y_j)=f(x,y_j)$$

因此$[(P\oplus Q)f](x,y)$在所有的水平线和竖直线上插值f.

- 基于算子$P \oplus Q$可以构造在CAGD中具有重要历史地位的Coons曲面片。1964年MIT的教授Steven A. Coons提出了被后人称为超限插值(可以应用算子$P \oplus Q$进行解释)的新思想，通过插值四条任意的边界曲线来构造曲面。
- Coons方法和Bézier方法是CAGD最早的开创性工作。计算机图形学的最高奖是以Coons的名字命名的，而获得第一届（1983）和第二届(1985)Steven A. Coons 奖的，恰好是Ivan E. Sutherland和Pierre Bézier

- 由所有

$$\sum_{i=1}^{m} a_i(x)b_i(y), \qquad a_i(x) \in \Pi_k, b_i(y) \in \Pi_l$$

构成的二元多项式空间记为$\Pi_k \otimes \Pi_l$, 称为两个一元多项式空间的张量积。在这个空间中会出现总次数为$k+l$的$x^k y^l$项，但其它$k+l$次项不会出现，因此这种多项式空间并没有充分利用以总次数为限的多项式表示

- 总次数不超过k的二元多项式表示为

$$\sum_{0 \leqslant i+j \leqslant k} c_{ij}x^i y^j = \sum_{i=0}^{k}\sum_{j=0}^{k-i} c_{ij}x^i y^j$$

其全体构成的空间记为$\Pi_k(\mathbb{R}^2)$

- 空间的一组基为$x^i y^j$, $0 \leqslant i+j \leqslant k$
  1. 它们显然生成$\Pi_k(\mathbb{R}^2)$
  2. 为证线性无关，假设

$$\sum_{i=0}^{k}\sum_{j=0}^{k-i} c_{ij}x^i y^j = \sum_{i=0}^{k}\left(\sum_{j=0}^{k-i} c_{ij}y^j\right)x^i = 0$$

这里$\sum_{j=0}^{k-i} c_{ij}y^j$可以看作是$x^i$的系数，因此由$\{1, x, \ldots, x^k\}$线性无关可得

$$\sum_{j=0}^{k-i} c_{ij}y^j = 0, \qquad i = 0, \ldots, k$$

从而得出所有系数$c_{ij} = 0$

- 空间的维数为$\binom{k+2}{2} = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$

$\Pi_k(\mathbb{R}^2)$插值问题

- 本节开始的例子说明了应用$\Pi_k(\mathbb{R}^2)$中元素进行插值，插值结点的选取需要非常仔细
- 实际上，假设给定了n个函数$u_1, u_2, \ldots, u_n$，并且给定$\mathbb{R}^2$中n个结点$p_i = (x_i, y_i)$. 那么为了构造插值函数，需要求解线性方程组，对应的系数矩阵为$(u_j(p_i))_{n\times n}$. 若对给定的结点集，该矩阵非奇异，那么让前两个结点在$\mathbb{R}^2$平面中作连续移动，但从不重合，也不与其它结点重合，那么存在一种移动方式，两个结点相当于交换了位置，从而系数矩阵的行列式反号。根据上述移动过程与矩阵的行列式之间的连续性，可知存在一组结点集，对应的行列式为零
- 从而可知在$C(\mathbb{R}^2)$中根本没有n维子空间适合在任意n个结点的集合上进行插值。1918年Haar观察到了这一事实

Theorem

空间$\Pi_k(\mathbb{R}^2)$是可以对$\mathbb{R}^2$中任意$k+1$个不同结点集上的任意数据插值的。

证明：假设被插值函数为f, 插值结点是(x_i, y_i), $i = 0, 1, \ldots, k$，则存在线性函数$\ell(x, y) = ax + by + c$使得$k+1$个数$t_i = \ell(x_i, y_i)$两两不同。根据单变量多项式插值理论，存在$p \in \Pi_k(\mathbb{R})$, 使得$p(t_i) = f(x_i, y_i)$. 显然$p \circ \ell \in \Pi_k(\mathbb{R}^2)$而且满足插值条件：

$$(p \circ \ell)(x_i, y_i) = p(\ell(x_i, y_i)) = p(t_i) = f(x_i, y_i)$$

□

形如$g \circ \ell$ ($\ell \in \Pi_1(\mathbb{R}^2)$)的函数称为岭(ridge)函数，因为$g \circ \ell$在每条直线$\ell(x, y) = \lambda$上是常数，从而其图形是一张直纹面。

Newton格式

- 单变量多项式插值中的Newton格式是首先在$x_1, \ldots, x_n$上构造插值f的多项式p, 然后通过给p添加一项，使之在$x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}$上插值$f$
- 上述过程可以抽象为：设X是一个集合，f为定义在X上的实值函数。设$\mathcal{N}$为结点集。如果p是$\mathcal{N}$上任一插值f的函数，而且q是任一在$\mathcal{N}$上取值为零的函数。如果$q(\xi) \neq 0$, 则$p^* = p + cq$给出了在$\mathcal{N} \cup \{\xi\}$上插值f的函数
- 进一步地一般化：设q是X到$\mathbb{R}$的函数，Z是它的零点集。若在$\mathcal{N} \cap Z$上p插值f, 并且在$\mathcal{N} \backslash Z$上r插值$(f-p)/q$, 则在N上$p + qr$插值f

Shepard插值

- 1968年由D. Shepard给出
- 设给定的插值结点为$p_i \in \mathbb{R}^2$, $i = 1, 2, \ldots, n$. 选取$\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$上的一个实值函数$\phi$满足唯一性条件：

$$\phi(p, q) = 0 \text{ 当且仅当 } p = q$$

  - 如$\phi(p, q) = \|p - q\|^{\mu}$, $\mu > 0$
- 类似于单变量Lagrange插值基函数的构造方式，定义

$$u_i(p) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{\phi(p, p_j)}{\phi(p_i, p_j)}, \qquad j = 1, 2, \ldots, n$$

  这些函数具有"基性质"：$u_i(p_j) = \delta_{ij}$
- 在结点集上插值f的函数为

$$F = \sum_{i=1}^{n} f(p_i) u_i$$

Shepard插值的变体

- 此时要求ϕ是一个非负函数，并设

$$v_i(p)=\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}\phi(p,p_j),\quad v(p)=\sum_{i=1}^{n}v_i(p),\quad w_i(p)=\frac{v_i(p)}{v(p)}$$

- 当$i\neq j$时$v_i(p_j)=0$, 在其它除$p_1,\ldots,p_{i-1},p_{i+1},\ldots,p_n$之外的所有点$p$上$v_i(p)>0$。从而$v(p)>0$，这样$w_i$有定义。根据函数的定义方式，我们有$w_i(p_j)=\delta_{ij}$, $0\leqslant w_i(p)\leqslant 1$, $\sum_{i=1}^{n}w_i(p)=1$. 所以下述方程定义了插值函数：

$$F=\sum_{i=1}^{n}f(p_i)w_i=\sum_{i=1}^{n}f(p_i)\frac{v_i}{v}$$

- $n=1$的情形如何?

Shepard变体的特点

- 以下两条性质表明插值函数F继承了被插值函数的某些特征：
  - 如果数据是非负的，那么插值函数F也是非负的。
  - 如果f是常值函数，那么$F \equiv f$
- 如果ϕ可微，那么F在每个结点上都呈现出一个平坦点
  - 每个结点都是w_i的极值点，从而偏导数等于零。这样F在结点处的偏导数也等于零

例

令

$$\phi(x,y) = \|x-y\|^{\mu}, \qquad \mu > 0$$

- 当$\mu > 1$时该函数可微，当$0 < \mu \leqslant 1$时不可微

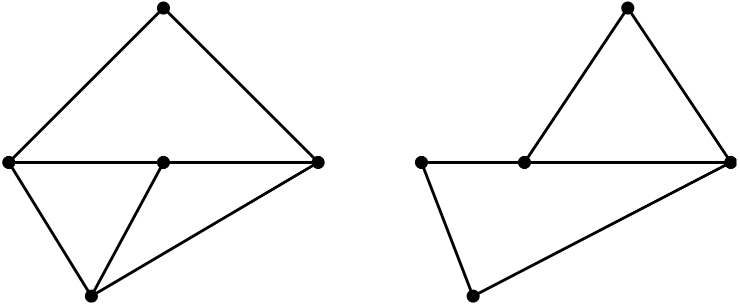
此时w_i的定义有下列等价形式：

$$w_i(x) = \frac{\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \|x-x_j\|^{\mu}}{\sum\limits_{k=1}^{n} \prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n} \|x-x_j\|^{\mu}} = \frac{\|x-x_i\|^{-\mu}}{\sum\limits_{j=1}^{n} \|x-x_j\|^{-\mu}}$$

后一等式中会出现∞/∞情形，需要小心应用

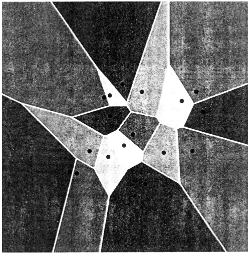
三角剖分

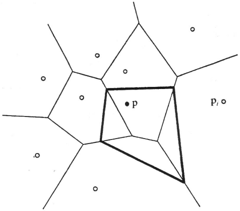
- 基于给定结点，另外一种构造插值函数的方法就是三角剖分(triangulation)，即连接结点，形成一族三角形T_1，T_2，...，T_m. 这些三角形满足下述规则：
  1. 每个插值结点必须是某个三角形T_i的顶点
  2. 每个三角形的顶点必须是结点
  3. 如果某个结点在某个三角形内，那么它一定是这个三角形的顶点
- 两个不符合规则的三角剖分

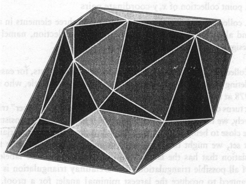


Dirichlet镶嵌与Delaunay三角剖分

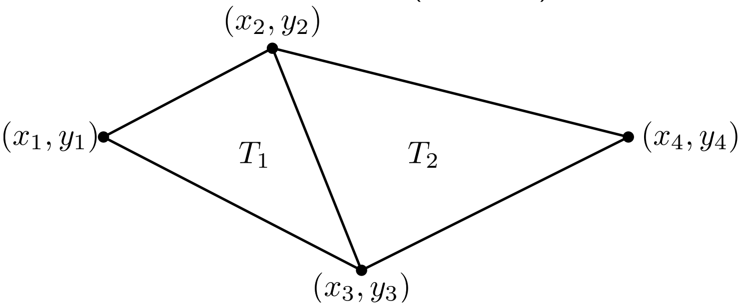
为了获得给定点集的三角剖分，可以采用下述方法：







- 对于三角剖分上最简单的插值函数就是分片线性函数，它在所有三角形的所有顶点上插值函数f, 在任意三角形T_i上为一个线性函数$\ell_i(x,y)=a_ix+b_iy+c_i$，这个函数由它在三角形三个顶点的函数值唯一确定(为什么？).



- 在两个三角形的公共边界上，由于此时每个三角形中的线性函数限制在公共边上为一个单变量线性函数，由其在两个顶点的值唯一确定，因此两个线性函数沿公共边界连续拼接。从而所有三角形上的线性函数组合在一起是连续的。

三角形网格

- 三角网格在许多计算机图形应用领域中是最通用的曲面表示方式。由于它的简单和灵活，在一些注重处理性能的领域，三角网格甚至取代了传统的CAD曲面表示，如NURBS曲面
- CPU和图形硬件性能的稳定增长，廉价的内存，以及三维扫描仪的广泛使用，导致了产生大量的高精度的几何数据，其中包含几百万三角片的模型在当今已经很多

经典的最小二乘方法

- 问题：给定一个集合X作为插值函数和被插值函数f的定义域，以及其中的一组结点$x_1,\ldots,x_n$. 插值函数所在空间由$u_1,\ldots,u_m$生成，其中m相对于n很小，因此可能无法构造出插值函数。取而代之，我们希望找到系数$c_1,\ldots,c_m$, 极小化下述表达式：

$$\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i)-\sum_{j=1}^{m}c_j u_j(x_i)\right)^2 w_i$$

其中$w_i\geqslant 0$为权因子

- 如果记$\langle f,g\rangle=\sum_{i=1}^{n}f(x_i)g(x_i)w_i$, 那么根据内积空间中的逼近理论，$f-\sum_{i=1}^{m}c_j u_j\perp u_i$, $i=1,2,\ldots,m$刻划了极小化问题解的特征，从而导出方程：

$$\sum_{j=1}^{m}c_j\langle u_j,u_i\rangle=\langle f,u_i\rangle,\qquad i=1,2,\ldots,m$$

移动最小二乘的定义

- 移动最小二乘与经典最小二乘的区别在于允许权因子w_i是x的函数。记

$$\langle f, g\rangle_x = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)g(x_i)w_i(x)$$

则相应的方程为

$$\sum_{j=1}^{m} c_j\langle u_j, u_i\rangle_x = \langle f, u_i\rangle_x, \qquad i = 1, 2, \ldots, m$$

最终的逼近函数为

$$g(x) = \sum_{j=1}^{m} c_j(x)u_j(x)$$

- 因为方程随x一起变化，因此当m较大时，方程难以求解。通常$m \leqslant 10$

权函数的选择

- 如果$w_i(x)$在x_i处相当很大，那么g在x_i处几乎插值。如果当x离x_i很远时$w_i(x)$很快减少为零，那么远离x_i的结点对$g(x_i)$几乎没有影响
  - $w_i(x) = \|x - x_i\|^{-2}$, 其中$\|\cdot\|$为任何范数，但欧氏范数是常用的
- 若$m = 1$, 而且$u_1(x) \equiv 1$, 那么导致Shepard 方法。此时，记$c_1(x) = c(x)$, $u(x) = u_1(x)$, 那么由$c(x)\langle u, u\rangle_x = \langle f, u\rangle_x$可解出$c$, 从而逼近函数为

$$g(x) = c(x)u(x) = c(x) = \frac{\langle f, u\rangle_x}{\langle u, u\rangle_x} = \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i)w_i(x)}{\sum_{j=1}^n w_j(x)}$$