Luento 6

Kirsi Valjus

Jyväskylän yliopisto

Luennon 6 sisältö

Interpolointi ja approksimointi

Polynomi-interpolaatio:

- Vandermonden ja Lagrangen interpolaatiopolynomi
- Newtonin muoto interpolaatiopolynomille
- Interpolaatiovirheestä

Luku 5: Interpolointi ja approksimointi

Oletetaan, että emme tunne funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ analyyttistä lauseketta, vaan funktion arvoja on "taulukoituna" tietyissä pisteissä.

$\Rightarrow$ Haluttaessa funktion arvo pisteessä jota ei ole taulukoitu, korvataan alkuperäinen funktio jollakin yksinkertaisemmalla funktiolla ja approksimoidaan tämän avulla funktion f arvoa halutussa pisteessä.

Interpolointi

Interpoloinnissa halutaan approksimoivan funktion p kuvaajan kulkevan "taulukoitujen" pisteiden (x_i, y_i), $y_i := f(x_i)$ kautta, ts.

$$p(x_i) = y_i, \quad i = 0, ..., n.$$

Tällöin interpolointi tuottaa funktion (interpolantin) p, joka approksimoi funktiota f muissa pisteissä $x \neq x_i$.

- Interpolointi: piste x, jossa approksimaatio halutaan, on havaintopisteiden x_i ja x_j välissä.

- Ekstrapolointi: piste x on havaintojen ulkopuolella ($x < \min\{x_i\}$ tai $x > \max\{x_i\}$).

Interpolointi

- Useat numeeriset menetelmät perustuvat interpoloinnin käyttöön (numeerinen integrointi, differentiaaliyhtälöiden numeeriset ratkaisumenetelmät, tietokonegeometria,...)
- Interpolantti valitaan yleensä jostakin yksinkertaisesta funktioluokasta, jotta se olisi helppo konstruoida.
- Yleisesti käytettyjä ovat polynomit, rationaalifunktiot ja paloittaiset polynomit.
- Tässä esityksessä rajoitutaan tapauksiin, joissa interpolantit ovat polynomeja tai paloittain polynomeja.

Approksimointi (yleinen käyränsovitus)

- Ei vaadita pisteittäistä osuvuutta vaan
- tarkastellaan yleisemmin osuvuutta koko tarkasteluvälillä, ja
- etsitään funktiota p siten, että $p \approx f$ jollakin sopivalla normilla mitattuna (esim. PNS-sovitus).

5.1 Polynomi-interpolaatio

Olkoon annettu $n+1$ kappaletta datapisteitä

$$(x_i, y_i),\ i = 0, \dots, n \quad \text{siten, että} \quad x_i \neq x_j, \quad \text{kun} \quad i \neq j.$$

Etsitään interpolanttia p lineaarikombinaationa annetuista kantafunktioista $\varphi_0, \dots, \varphi_n$, jolloin funktio p on muotoa

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x),$$

missä kertoimet $a_0, \dots, a_n$ ovat vapaita parametreja.

Polynomi-interpolaatio jatkuu

Koska funktion p tulee toteuttaa interpolaatioehto

$$p(x_i) = y_i, \quad i = 0, ..., n,$$

saadaan kertoimet $a_0, \ldots, a_n$ lineaarisesta yhtälöryhmästä

$$\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) = y_i, \quad i = 0, ..., n.$$

Yhtälöryhmä voidaan kirjoittaa matriisimuodossa

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{y},$$

missä $\boldsymbol{X} = (\varphi_j(x_i))_{i,j=0}^{n}, \quad \boldsymbol{a} = [a_0, a_1, \ldots, a_n]^{\mathrm{T}}$
ja $\quad \boldsymbol{y} = [y_0, y_1, \ldots, y_n]^{\mathrm{T}}$.

Vandermonden interpolaatiopolynomi

Suoraviivainen valinta kantafunktioiksi φ_j on monomit

$$\varphi_j(x) = x^j,\ j = 0, \ldots, n,$$

jolloin funktio p on n-asteinen polynomi. Matriisi $\boldsymbol{X}$ on tässä tapauksessa muotoa

$$\boldsymbol{X} = (\varphi_j(x_i))_{i,j=0}^n = ((x_i)^j)_{i,j=0}^n = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & x_0^3 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 & \ldots & x_1^n \\ & \vdots & & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^3 & \ldots & x_n^n \end{bmatrix}$$

ja sitä sanotaan Vandermonden matriisiksi.

Vandermonden interpolaatiopolynomi jatkuu

Olkoon $x_0, x_1, \ldots, x_n$ erisuuria reaali- (tai kompleksi-) lukuja ja $y_0, y_1, \ldots, y_n$ vastaavat funktion arvot. Tutkitaan sellaisen polynomin olemassaoloa, jolle on voimassa interp.ehto

$$p(x_i) = y_i, \quad i = 0, ..., n.$$

Lause 5.1 Olkoon annettu $n + 1$ datapistettä $(x_0, y_0) \ldots, (x_n, y_n)$, missä $x_i \neq x_j$, kun $i \neq j$.
Tällöin on olemassa enintään astetta n oleva polynomi p, joka toteuttaa interp.ehdon $p(x_i) = y_i, \quad i = 0, ..., n$.
Tämä polynomi p on yksikäsitteinen korkeintaan astetta n olevien polynomien joukossa.

Lauseen 5.1. todistus: Olemassaolo

Olemassaolo Olkoon $\boldsymbol{X}$ pisteistöön liittyvä Vandermonden matriisi. Jos $\boldsymbol{Xz} = \mathbf{0}$ jollekin $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^{n+1}$, niin

$\boldsymbol{Xz} =$

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & x_0^3 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 & \dots & x_1^n \\ & \vdots & & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^3 & \dots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_0 \\ z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} = \begin{cases} z_0 + z_1 x_0 + z_2 x_0^2 + \cdots + z_n x_0^n = 0 \\ z_0 + z_1 x_1 + z_2 x_1^2 + \cdots + z_n x_1^n = 0 \\ \vdots \\ z_0 + z_1 x_n + z_2 x_n^2 + \cdots + z_n x_n^n = 0 \end{cases}$$

eli polynomi, jonka kertoimet ovat $z_i,\ i = 0, ..., n$, on korkeintaan astetta n ja sillä on ainakin $n+1$ nollakohtaa $x_i,\ i = 0, \dots n$.

Lauseen 5.1. todistus: Olemassaolo

- n.:n asteen polynomilla on täsmälleen n nollakohtaa
- Edellä saatiin, että polynomi, jonka kertoimet ovat z_i, on korkeintaan astetta n ja sillä on ainakin $n+1$ nollakohtaa.

$\Rightarrow$ vektoria $\boldsymbol{z}$ vastaavan polynomin täytyy olla identtisesti nolla $\Rightarrow$ $\boldsymbol{z} = \mathbf{0}$.

- Koska $\boldsymbol{Xz} = 0 \Rightarrow \boldsymbol{z} = \mathbf{0}$, on $\boldsymbol{X}$ kääntyvä.

$\Rightarrow$ Yhtälöryhmällä $\boldsymbol{Xa} = \boldsymbol{y}$ on yksikäsitteinen ratkaisu.
$\Rightarrow$ väite (interp.polynomin olemassaolo).

Lauseen 5.1. todistus: Yksikäsitteisyys

Yksikäsitteisyys Olkoon q mielivaltainen korkeintaan n-asteinen polynomi, joka myös toteuttaa interp.ehdon
$(q(x_i) = y_i,\ i = 0, ..., n\ )$.

Olkoon $r := p - q$, jolloin r on enintään n-asteinen polynomi ja

$$r(x_i) = p(x_i) - q(x_i) = y_i - y_i = 0, \qquad i = 0, \ldots, n.$$

Koska polynomilla r on $n + 1$ nollakohtaa, niin $r(x) \equiv 0$.
Siis on oltava $p = q$.

Vandermonden interpolaatiopolynomi jatkuu

Vandermonden matriisi on häiriöaltis

$\Rightarrow$ Interpolaatiopolynomia ei yleensä muodosteta Vandermonden matriisia käyttäen.

- Käyttämällä muita polynomikantoja monomien sijaan, voidaan interpolaatiopolynomi muodostaa suoraan ilman lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisemista.
- Lauseen 5.1 mukaan päädytään aina samaan polynomiin kannasta riippumatta.

Lagrangen interpolaatiopolynomi

Interpolaatiopolynomin Lagrangen muoto saadaan valitsemalla kantafunktioiksi *n*-asteiset polynomit

$$\ell_j(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{n} \left(\frac{x - x_k}{x_j - x_k} \right), \qquad j = 0, \dots, n.$$

Nyt saadaan

$$\ell_0(x) = \left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \right) \left(\frac{x - x_2}{x_0 - x_2} \right) \dots \left(\frac{x - x_n}{x_0 - x_n} \right) = 0 \quad \forall x_i,\ i > 0.$$

$$\ell_0(x_0) = \left(\frac{x_0 - x_1}{x_0 - x_1} \right) \left(\frac{x_0 - x_2}{x_0 - x_2} \right) \dots \left(\frac{x_0 - x_n}{x_0 - x_n} \right) = 1$$

Sama pätee kaikille ℓ_j.

Lagrangen interpolaatiopolynomi jatkuu

Saadaan siis

$$\ell_j(x_i) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} ,$$

eli

$$\boldsymbol{X} = (\ell_j(x_i))_{i,j=0}^{n} = \boldsymbol{I}$$

ja yhtälöryhmän $\boldsymbol{Xa} = \boldsymbol{y}$ ratkaisu on triviaalisti $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{y}$, joten interpolaatiopolynomi saa muodon

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j \ell_j(x).$$

Esimerkki 5.1.

$$\ell_j(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \left(\frac{x - x_k}{x_j - x_k}\right), \qquad j = 0, \ldots, n.$$

1. asteen yleinen Lagrangen interp.polynomi ($n = 1$):

$$\ell_0(x) = \left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right), \quad \ell_1(x) = \left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)$$

$$\Rightarrow p_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

Esimerkki 5.1. jatkuu

2. asteen yleinen Lagrangen interpolaatiopolynomi ($n = 2$):

$$p_2(x) = y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}.$$

2. asteen interpolaatiopolynomi, joka kulkee pisteiden

$(x_0, y_0) = (0, 1)$, $(x_1, y_1) = (-1, 2)$ ja $(x_2, y_2) = (1, 3)$ kautta:

$$\begin{aligned} p_2(x) &= 1 \cdot \frac{(x - (-1))(x - 1)}{(0 - (-1))(0 - 1)} + 2 \cdot \frac{(x - 0)(x - 1)}{(-1 - 0)(-1 - 1)} + 3 \cdot \frac{(x - 0)(x - (-1))}{(1 - 0)(1 - (-1))} \\ &= 1 + \frac{1}{2}x + \frac{3}{2}x^2. \end{aligned}$$

Huomautus 5.1.

- Interpolaatiopolynomin olemassaolo tai muodostaminen edellä esitetyillä menetelmillä ei vaadi datapisteiden järjestämistä siten, että $x_i < x_j$, kun $i < j$.
- Tätä voidaan hyödyntää esimerkiksi silloin, kun datapisteitä lisätään myöhemmin interpolaation tarkkuuden parantamiseksi.
- Toisaalta tarpeeton epäjärjestys voi hämätä esimerkiksi dataa visualisoitaessa tai ohjelmaa debugattaessa.

Newtonin muoto interpolaatiopolynomille

- Lagrangen interpolaatiopolynomin tapauksessa kertoimien a_j laskeminen oli triviaalia, mutta kantafunktioiden ℓ_j lausekkeet olivat melko monimutkaisia.
- Parempi tasapaino kertoimien ja kantafunktioiden vaatiman laskennan välillä saadaan käyttämällä Newtonin kantafunktiota

$$\pi_j(x) = \begin{cases} 1, & j = 0, \\ \prod_{k=0}^{j-1}(x - x_k), & j = 1, \dots, n. \end{cases}$$

Selvästi

$$\pi_j(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{j-1}) = 0, \text{ kun } x = x_i, \ i < j.$$

Newtonin muoto interp.polynomille jatkuu

Esimerkiksi tapauksessa $n = 2$, matriisi $\boldsymbol{X}$ on muotoa

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X} = (\pi_j(x_i))_{i,j=0}^{2} &= \begin{bmatrix} \pi_0(x_0) & \pi_1(x_0) & \pi_2(x_0) \\ \pi_0(x_1) & \pi_1(x_1) & \pi_2(x_1) \\ \pi_0(x_2) & \pi_1(x_2) & \pi_2(x_2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & x_1 - x_0 & 0 \\ 1 & x_2 - x_0 & (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

Eli $\boldsymbol{X}$ on alakolmiomatriisi.

Newtonin muoto interp.polynomille jatkuu

Interpolaatiopolynomi voidaan nyt esittää muodossa

$$\begin{aligned} p_n(x) &= \sum_{j=0}^{n} a_j \pi_j(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \\ &+ \quad a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n(x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_{n-1}). \end{aligned}$$

Johdetaan seuraavaksi Newtonin muoto interpolaatiopolynomille.

Newtonin muoto interp.polynomille jatkuu

Muodostetaan n-asteinen interpolaatiopolynomi lisäämällä korjaustermi $n-1$-asteiseen interpolaatiopolynomiin:

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + C(x). \tag{1}$$

Nyt $C(x)$ on enintään n-asteinen polynomi. Koska sekä p_n että p_{n-1} interpoloivat dataa n:ssä ensimmäisessä pisteessä,

$$C(x_i) = p_n(x_i) - p_{n-1}(x_i) = y_i - y_i = 0, \qquad i = 0, \ldots, n-1.$$

$\Rightarrow$ polynomi C on muotoa

$$C(x) = a_n(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1}).$$

Newtonin muoto interp.polynomille jatkuu

Nyt (1) $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} p_n(x) &= p_{n-1}(x) + C(x) \\ &= p_{n-1}(x) + a_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}). \end{aligned}$$

Koska $p_n(x_n) = y_n$, saadaan ratkaistua a_n:

$$a_n = \frac{y_n - p_{n-1}(x_n)}{(x_n - x_0)\dots(x_n - x_{n-1})}.$$

Tätä kerrointa a_n sanotaan funktion f kertalukua n olevaksi Newtonin jaetuksi differenssiksi ja merkitään

$$f[x_0] := a_0 = f(x_0), \quad f[x_0, x_1, \dots, x_n] := a_n, \ n \geq 1.$$

Newtonin muoto interp.polynomille jatkuu

Interpolaatiopolynomille saadaan siten muoto

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + (x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) f[x_0, \dots, x_n].$$

Tästä saadaan Newtonin muoto interpolaatiopolynomille:

$$\begin{cases} p_0(x) = f[x_0] \quad (= a_0 = f(x_0)\ ) \\ p_1(x) = p_0(x) + (x - x_0) f[x_0, x_1], \\ \qquad\ \ = f[x_0] + (x - x_0) f[x_0, x_1], \\ \qquad \vdots \\ p_n(x) = f[x_0] + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2] \\ \qquad\ \ + \dots + (x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) f[x_0, \dots, x_n]. \end{cases}$$

Newtonin muoto interp.polynomille jatkuu

Aikaisemmin:

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \pi_j(x) = a_0 + a_1(x - x_0) +$$
$$+ \quad a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})$$

Edellisellä kalvolla:

$$p_n(x) = \overbrace{f[x_0]}^{a_0} + (x - x_0)\overbrace{f[x_0, x_1]}^{a_1} + (x - x_0)(x - x_1)\overbrace{f[x_0, x_1, x_2]}^{a_2}$$
$$+ \cdots + (x - x_0)\ldots(x - x_{n-1})\underbrace{f[x_0, \ldots, x_n]}_{a_n}.$$

Ts. jaetut differenssit antavat kertoimet a_j.

Lause 5.2.

Jaetuille differensseille on voimassa ($j \geq 1, i = 0, .., j-1$):

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

Taulukkoesitys havainnollistaa jaettujen differenssien konstruointia (tässä $f[x_i] = f(x_i), i = 0, \ldots, n$):

$$\begin{array}{cc|ccc}
x_0 & f[x_0] & f[x_0, x_1] & f[x_0, x_1, x_2] & f[x_0, x_1, x_2, x_3] \\
x_1 & f[x_1] & f[x_1, x_2] & f[x_1, x_2, x_3] & \\
x_2 & f[x_2] & f[x_2, x_3] & & \\
x_3 & f[x_3] & & &
\end{array}$$

Etenevät differenssit

Olkoon funktio f taulukoitu välillä $[a, b]$ tasavälisessä pisteistössä

$$x_j = a + jh, \quad j = 0, \ldots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

Määritelmä Olkoon annettu tasavälinen pisteistö x_j ja olkoon $f_j = f(x_j)$. Etenevä differenssi $\Delta^i f_j$ on luku

$$\Delta^i f_j = \begin{cases} f_j, & i = 0 \\ \Delta^{i-1} f_{j+1} - \Delta^{i-1} f_j, & i > 0. \end{cases}$$

Etenevät ja takenevat differenssit jatkuu

Nyt Newtonin muoto interpolaatiopolynomille voidaan muodostaa seuraavasti:

$$p_n(x_0 + sh) = p_{n-1}(x_0 + sh) + \Delta^n f_0 \binom{s}{n}$$

missä $s = (x - x_0)/h \in \mathbb{R}$ ja $\binom{s}{i}$ on "binomifunktio"

$$\binom{s}{i} = \begin{cases} 1, & i = 0, \\ \displaystyle\prod_{\ell=0}^{i-1} \frac{s-\ell}{\ell+1}, & i > 0. \end{cases}$$

Interpolaatiovirheestä

Jos funktio f korvataan interpolaatiopolynomilla p_n, niin yleensä $f(t) \neq p(t)$, jos t ei ole interpolaatiopiste. Interpolaatiovirhettä voidaan arvioida seuraavan lauseen avulla.

Lause 5.3 Olkoon $f \in C^{(n+1)}([a,b])$ ja olkoon $p \in \mathcal{P}_n$ interpolaatiopolynomi siten, että $p(x_i) = f(x_i),\ i = 0, ..., n$, missä $a \leq x_0 < x_1 < \ldots < x_n \leq b$.

Tällöin jokaiselle $x \in]a,b[$ on olemassa $\xi_x \in]a,b[$ siten, että

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

Interpolaatiovirheestä jatkuu

Tasaväliselle pisteistölle edellinen lause voidaan esittää myös seuraavassa muodossa.

Lause 5.4 Olkoon $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ tasavälinen pisteistö, $h = x_{i+1} - x_i$ ja $f \in C^{(n+1)}([a, b])$. Silloin

$$|f(t) - p_n(t)| \leq \frac{M_n}{4(n+1)} h^{n+1}, \quad t \in [a, b],$$

missä

$$M_n = \max_{x \in [x_0, x_n]} |f^{(n+1)}(x)|.$$

Esimerkki 5.5

Lause 5.4.:

$$|f(t) - p_n(t)| \leq \frac{M_n}{4(n+1)} h^{n+1}, \quad M_n = \max_{x \in [x_0, x_n]} |f^{(n+1)}(x)|.$$

Olkoon $f(x) = \sin x$, $x_0 = 0$ ja $x_n = \pi$. Tällöin

$$\max_{t \in [x_0, x_n]} |f(t) - p_n(t)| \leq 1 \cdot h^{n+1},$$

joten polynomi p_n suppenee tasaisesti kohti funktiota f välillä $[0, \pi]$, kun interpolaatiopisteiden lukumäärää n kasvatetaan rajatta.

Interpolaatiovirheestä jatkuu

- Lauseen 5.4. epäyhtälöä on käytettävä varoen, sillä vakio M_n yleensä riippuu myös interp.polynomin asteesta n.
- Lisäksi vakion M_n laskeminen mielivaltaiselle funktiolle f on käytännössä aivan liian työlästä.
- Funktion f sileys ja datapisteiden paljous ei takaa pientä interpolaatiovirhettä, kuten seuraava klassinen Rungen esimerkki osoittaa.