Методы интерполирования и экстраполяции функций

Приближением (аппроксимацией) функции $f(x)$ называется отыскание функции $g(x)$, близкой в некотором смысле к $f(x)$. Аппроксимирующая функция $g(x)$ должная быть «проще» исходной. Как понимается близость функций и в чем критерий простоты, об этом речь пойдет ниже.

Аппроксимация может потребоваться в следующих случаях:

1) известны, например из эксперимента, значения функции $f(x_1)=y_1$, $f(x_2)=y_2$,.., $f(x_n)=y_n$ (итак, функция $y=f(x)$ задана таблично). Требуется найти значение $f(x)$ при таком значении аргумента x^*, которого нет среди узлов $x_1, x_2, \ldots x_n$, но сделать это по каким-либо причинам затруднительно [1]. В таком случае можно найти аппроксимирующую функцию $g(x)$; если она «близка» к $f(x)$ на множестве узлов $X=\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$, то и в нужной точке x^*, вероятно, $f(x^*)\approx g(x^*)$;

2) функция $f(x)$ задана аналитически, т.е. формулой, но эта формула слишком сложна [2] для регулярного использования. И в этом случае выгодно аппроксимировать $f(x)$ более простой функцией $g(x)$ и все расчеты выполнять с ней.

---

[1] Например, экспериментальная установка, на которой выполнены измерения, уже разобрана.

[2] Известно, например, что интеграл вида $\int \frac{P_n(x)}{Q_m(x)}\mathrm{d}x$ от любой дробно-рациональной функции ($P_n(x)$ и $Q_m(x)$ — полиномы) всегда берущийся, т. е. первообразная выражается в конечном виде через элементарные функции, но формула для первообразной может быть очень громоздкой: $\int \frac{dx}{x^3\left(x^3+a^3\right)^2} = -\frac{1}{3a^3x^2\left(x^3+a^3\right)} - \frac{5}{6a^6x^2} - \frac{5}{18a^8}\ln\frac{(x+a)^2}{x^2-ax+a^2} - \frac{5}{3a^8\sqrt{3}}\operatorname{arctg}\frac{2x-a}{a\sqrt{3}}$. Это отнюдь не предел сложности!

Какие функции наиболее «просты» и в силу этого удобны в качестве аппроксимирующих? Чаще всего используются полиномы (многочлены)

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n . \qquad (2)$$

Действительно, полиномы легко складывать, умножать и делить; их можно элементарно дифференцировать и интегрировать.

Иногда (но не в данном курсе) применяют обобщенные полиномы вида

$$a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \ldots + a_n\varphi_n(x),$$

где функции $\varphi_i(x)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, предполагаются линейно независимыми. Например, функции $\{1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x, \ldots, \sin nx, \cos nx\}$ тоже обладают удобными свойствами и используются для разложения произвольных $f(x)$ при весьма общих условиях в тригонометрические ряды Фурье.

Рассмотрим теперь некоторые подходы к понятию близости функций.

1. Интерполяция. Требуется найти полином $P_n(x)$, принимающий те же значения, что и аппроксимируемая функция $f(x)$, в $(n+1)$ узле

$$P_n(x_i) = f(x_i),\ i = 0, 1, \ldots, n.$$

В таком случае полином $P_n(x)$ называется интерполяционным, а точки $x_0, x_1, \ldots, x_n$ — узлами интерполяции.

Если число узлов велико, то отыскание интерполяционного полинома, как мы увидим далее, будет трудоемким. Кроме того, точное равенство $P_n(x_i) = f(x_i)$ может оказаться бессмысленным требованием, если сами значения $f(x_i)$ аппроксимируемой функции в узлах получены из эксперимента и потому заведомо неточно.

2. Наилучшее приближение. Пусть функция $f(x)$ задана таблично в узлах $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Подберем полином $P_n(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n$ так, чтобы сумма квадратов разностей значения аппроксимируемой функции и полинома по всем узлам минимизировалась

$$\sum_{i=0}^{n} \left(f(x_i) - P_n(x_i) \right)^2 \to \min .$$

Из данного условия определяются коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_n$ искомого полинома.

На этом пути мы пришли бы к знаменитому методу наименьших квадратов, но рассматривать его здесь мы не будем.

Займемся интерполяцией. Итак, пусть функция $f(x)$ задана таблично в $(n+1)$ узле

$$f(x_0) = y_0,\ f(x_1) = y_1,\ \ldots,\ f(x_n) = y_n.$$

Требуется найти интерполяционный полином, такой, что

$$P_n(x_i) = f(x_i),\ i = 0, 1, \ldots, n. \tag{3}$$

Геометрически это означает, что график полинома проходит через точки $M_i(x_i, y_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$ (рис. 1).

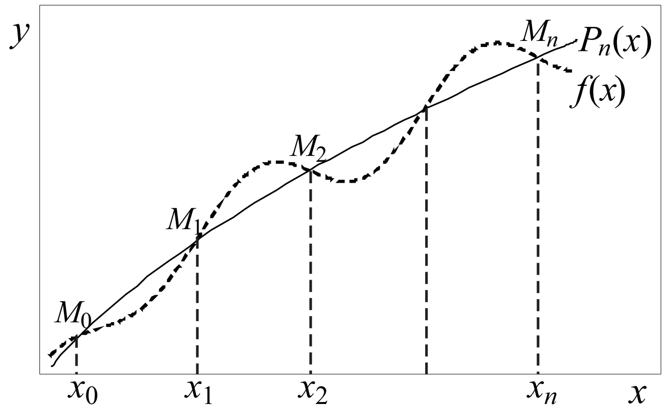

Рис. 1. Графики аппроксимируемой функции и ее интерполяционного полинома

Интерполяционный полином используется для приближенного вычисления значений функции $f(x)$ в точке, отличной от узлов интерполяции, $f(x) \approx P_n(x)$. Если значение x лежит между узлами интерполяции, то приближенное отыскание значения $f(x)$ называется **интерполированием** (в узком смысле); если же значение x лежит левее или правее всех узлов, то говорят об интерполировании в широком смысле (или **экстраполировании**).

Степень интерполяционного полинома, построенного по $(n+1)$ точке, в исключительных случаях может оказаться меньше n. Например, если все точки $M_i(x_i, y_i)$ лежат на одной прямой (наклонной или горизонтальной), то полином будет иметь первую (соответственно нулевую) степень. Понятно, что такие случаи крайне редки.

В общем случае по заданным значениям $f(x)$ в $(n+1)$ узле конструируется полином степени *n*, притом единственным образом. Покажем это. Подставляя в общий вид полинома (2) условия (3), получим систему из $(n+1)$ линейного уравнения

$$\begin{cases} a_0 & + & a_1x_0 & +\ldots+ & a_nx_0^n & = & y_0, \\ a_0 & + & a_1x_1 & +\ldots+ & a_nx_1^n & = & y_1, \\ . & . & . & . & . & . & . \\ a_0 & + & a_1x_n & +\ldots+ & a_nx_n^n & = & y_n \end{cases}$$

с $(n+1)$ неизвестными — коэффициентами полинома $a_0, a_1, \ldots, a_n$. Решать эту систему можно, например, по правилу Крамера. Если главный определитель системы (составленный из коэффициентов при неизвестных) отличен от нуля, то система имеет решение и притом единственное. В нашем случае главный определитель имеет специальный вид (так называемый определитель Вандермонда):

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \ldots & x_1^n \\ . & . & . & . \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^n \end{vmatrix}.$$

Доказывается, что $\Delta \neq 0$, поскольку узлы интерполяции $x_0, x_1, \ldots, x_n$ — различные числа. Итак, решение системы — коэффициенты интерполяционного полинома $a_0, a_1, \ldots, a_n$ — существует и единственно. Поэтому по данным значениям $f(x)$ в $(n+1)$ узле можно построить полином $P_n(x)$ степени *n*, притом единственным образом. Есть несколько способов построения, приводящих к одинаковому результату. Мы рассмотрим простейший способ, предложенный Лагранжем (1736–1813).

Интерполяционный полином Лагранжа

Для системы узлов $x_0, x_1, \ldots, x_n$ введем коэффициенты Лагранжа вида

$$L_n^i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdot\ldots\cdot(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdot\ldots\cdot(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdot\ldots\cdot(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdot\ldots\cdot(x_i-x_n)}.$$

Здесь индекс i может принимать значения $0,1,\ldots,n$. В числителе каждый сомножитель представляет собой разность переменного x и значения одного из узлов (за исключением i-го узла, что отмечено верхним индексом в обозначении функции L_n^i). Знаменатель формально отличается от числителя тем, что вместо переменного x подставлено значение пропущенного, i-го, узла интерполяции x_i. После упрощений становится понятно, что коэффициент Лагранжа L_n^i (x) является полиномом n-й степени (что отмечено нижним индексом в обозначении L_n^i).

При подстановке значения j-го узла в качестве аргумента коэффициента Лагранжа получится

$$L_n^i\left(x_j\right)=\begin{cases}1, & j=i,\\ 0, & j\neq i.\end{cases}$$

В таком случае полином Лагранжа

$$L_n\left(x\right)=\sum_{i=0}^{n} f\left(x_i\right)L_n^i\left(x\right)=f\left(x_0\right)L_n^0\left(x\right)+f\left(x_1\right)L_n^1\left(x\right)+\ldots+f\left(x_n\right)L_n^n\left(x\right) \quad (4)$$

удовлетворяет условиям (3)

$$L_n\left(x_i\right)=f\left(x_i\right),\ i=0,1,\ldots,n,$$

и имеет степень n, т. е. является искомым интерполяционным полиномом.

Пример. Функция $y=f\left(x\right)$ задана таблично своими значениями в четырех узлах:

i	0	1	2	3
узлы x_i	–1	0	2	5
$y_i=f\left(x_i\right)$	1	–3	2	4

Построить для $y=f\left(x\right)$ интерполяционный полином Лагранжа и, пользуясь им, приближенно найти значение y в точке $x=1$, которой нет среди узлов.

Решение. Применяя формулу (4), получим

$$L_3(x)=y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}+y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)}+$$

$$+y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}+y_3\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}=$$

$$=1\frac{(x-0)(x-2)(x-5)}{(-1-0)(-1-2)(-1-5)}-3\frac{(x+1)(x-2)(x-5)}{(0+1)(0-2)(0-5)}+$$

$$+2\frac{(x+1)(x-0)(x-5)}{(2+1)(2-0)(2-5)}+4\frac{(x+1)(x-0)(x-2)}{(5+1)(5-0)(5-2)}=-\frac{19}{45}x^3+\frac{233}{90}x^2-\frac{89}{90}x-3.$$

Тогда

$$f(1)\approx L_3(1)=-\frac{19}{45}+\frac{233}{90}-\frac{89}{90}-3=-82/45=-1.82.$$

Итак, ответ получен, но вопрос о его точности пока остается открытым. Заметим, что имела место интерполяция в узком смысле, поскольку точка $x=1$ лежит между узлами интерполяции.

Погрешность интерполяционного полинома Лагранжа

Погрешностью интерполяции называется модуль разности значений аппроксимируемой функции и ее интерполяционного полинома

$$R_n(x)=\left| f(x)-L_n(x)\right|. \tag{5}$$

Применимость этой формулы ограничена. Действительно, если значение $f(x)$ известно точно, то необходимость в аппроксимации отпадает и вопрос о погрешности интерполяции беспредметен.

По определению формула (5) дает точное значение погрешности интерполяции. Для практики удобнее оказывается приближенная формула, оценивающая погрешность сверху. Пусть узлы интерполяции $x_0, x_1, \ldots, x_n$ все принадлежат отрезку $[a, b]$. Предположим, что аппроксимируемая функция имеет производную $(n+1)$-го порядка на этом отрезке. Без доказательства

$$R_n(x)=\frac{\left|f^{(n+1)}(\xi)\right|}{(n+1)!}\left|(x-x_0)(x-x_1)\cdot\ldots\cdot(x-x_n)\right|, \tag{6}$$

где ξ — некоторая (вообще говоря н е и з в е с т н а я) точка, лежащая между узлами интерполяции, $\xi\in[a,b]$; в ней вычисляется $(n+1)$-я производная аппроксимируемой функции. Вычисление промежуточной точки ξ и производной (высокого порядка!) настолько трудны, что делают (точную) формулу (6) фактически неприменимой. Ее можно упростить: если каким-либо способом оценить сверху $(n+1)$-ю производную

$$\max_{x\in[a,b]}\left|f^{(n+1)}(x)\right|=M_{n+1}$$

$(M_{n+1}-\text{число})$, то получим следующую оценку погрешности интерполяции

$$R_n(x)\le\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\left|(x-x_0)(x-x_1)\cdot\ldots\cdot(x-x_n)\right|. \tag{7}$$

Пример. Функция $f(x)=\ln x$ задана таблично своими значениями в узлах $x_0=100$, $x_1=101$, $x_2=102$, $x_3=103$, и по табличным данным построен интерполяционный полином Лагранжа $L_3(x)$, который применен для приближенного вычисления $\ln 100{,}5$. Оценить, с какой точностью получается это значение.

Решение. Требуется оценить погрешность интерполяции $R_3(100.5)$. Согласно формуле (7)

$$R_3(x)\le\frac{M_4}{4!}\left|(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)\right|,$$

где $M_4=\max\limits_{x\in[a,b]}\left|f^{(n+1)}(x)\right|=\max\limits_{x\in[100,103]}\left|\ln^{(4)}(x)\right|$ (минимальный отрезок, содержащий все четыре узла, есть отрезок $[100,103]$). Четвертая производная логарифма $\ln^{(4)}(x)=-6/x^4$, поэтому $M_4=\max\limits_{x\in[100,103]}\left|-\frac{6}{x^4}\right|=\frac{6}{100^4}$.

Оценка погрешности интерполяции

$$R_3(100.5)=\left|\ln 100.5-L_3(100.5)\right|\le$$

$$\le\frac{6}{100^4 4!}\left|(100.5-100)\cdot(100.5-101)\cdot(100.5-102)\cdot(100.5-103)\right|<10^{-8}.$$

Итак, вычисление $\ln 100.5$ с помощью интерполяционного полинома Лагранжа $L_3(x)$ даст ответ с восемью верными десятичными знаками, т. е. очень точный ответ.