Interpoláció és extrapoláció

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Áttekintés

- alapfogalmak, alapvető tulajdonságok
- egydimenziós interpoláció
  - interpoláció polinommal
  - interpoláció racionális függvénnyel
  - köbös spline használata
- kétdimenziós interpoláció
  - bilineáris interpoláció
  - interpoláció folytonos deriváltakkal
  - szétszórt pontok esete

Alapkérdés

A függvény (jel) értéke bizonyos pontokban ismert, de köztes pontokban vagy az eredeti pontok által kijelölt intervallumon kívül is meg akarjuk becsülni

Ismert:

- $\{x_1, x_2, ..., x_N\}$ és $\{y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), ..., y_N = f(x_N)\}$
- Az x_i-k közötti távolság tetszőleges, változhat is
- x_i lehet több dimenziós is

Keressük:

- $f(x)$ közelítő értékét tetszőleges x helyen
- $f(x)$ analitikus alakja nem ismert, és nem is érdekes

Alapkérdés

Fontos: ez nem függvényillesztés !

- $f(x)$ alakját általában lokálisan, x körüli néhány x_i-ből becsüljük, nem pedig az egész mérési tartományon
- nem törődünk az esetleges mérési hibákkal, az interpoláló görbe mindig egzaktul átmegy az ismert pontokon

Interpoláció

Ha a keresett x-re igaz, hogy $x_k \leq x \leq x_l$.

Az interpoláció rendje: hány x_i pontot használunk az interpolációs módszerben

Példák:

- nem egyenletes mintavételezésről áttérünk egyenletesre
- képek átméretezése és forgatása
- hibás pixelek kipótolása képen

Extrapoláció

A függvény értékére nem köztes pontban vagyunk kíváncsiak, azaz $x < x_1$ vagy $x_N < x$

Példák:

- folyamat (áramfogyasztás, időjárás) jövőbeli becslése
- elméleti eredmény egy mennyiség $T = 0$ hőmérsékleten felvett értékére, mérni viszont csak véges T esetén lehet

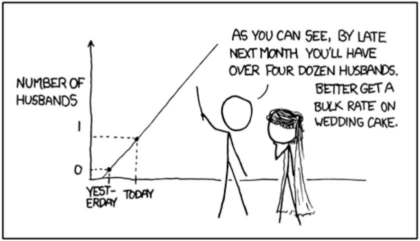
Extrapoláció

A függvény értékére nem köztes pontban vagyunk kíváncsiak, azaz $x < x_1$ vagy $x_N < x$

Példák:

- folyamat (áramfogyasztás, időjárás) jövőbeli becslése
- elméleti eredmény egy mennyiség $T = 0$ hőmérsékleten felvett értékére, mérni viszont csak véges T esetén lehet

Figyelem! Az extrapoláció veszélyes tud lenni!



(Source: www.quora.com)

Alapfeltevések

Az interpolálandó függvény *jól viselkedik*

- legyen folytonos, nincs ugrása két ismert pont között
- legyen sima: legyen differenciálható, és a deriváltjai is legyenek folytonosak

Ekkor valamilyen egyszerű függvény segítségével interpolálunk

- legegyszerűbb: lineáris
- általában: valamilyen alacsony rendű polinom

Vannak nehezen vagy egyáltalán nem interpolálható függvények

- pl. lökéshullámok hidrodinamikai szimulációkban (ugrásszerű változás a nyomásban, sűrűségben stb)

Lokális és globális interpoláció

Lokális interpoláció

- csak az x körüli k számú x_i pontot használjuk
- az interpoláció rendje $k-1$

Globális interpoláció

- az összes ismert pontot felhasználjuk
- ez tulajdonképpen függvényillesztés
- a globális interpoláció rendje $N-1$, ahol N az összes ismert pont száma

Egyszerű példa: lineáris interpoláció (egyenes illesztés)

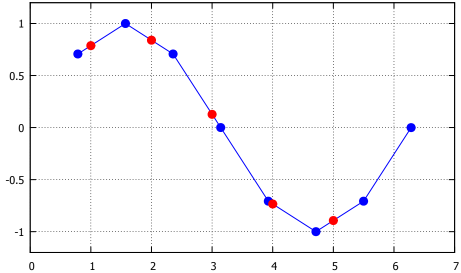


Figure: Kék pontok: eredeti adatok, piros pontok: kék pontok között lineáris interpolációval kapott értékek.

Lokális vagy globális interpoláció?

Ha a függvény $f(x)$ ismeretlen értékét csak *néhány* x helyen kell meghatározni

- lokálisan illesztünk egy függvény x körüli k darab pontra
- nagyobb numerikus pontosság érhető el

Ha a függvény ismeretlen értékét *sok* x helyen kell meghatározni

- az összes N pontra illesztünk, kiszámoljuk $f(x)$-et közelítő polinom együtthatóit
- magas fokszámú polinomok használata egyéb problémákra vezethet

Interpoláció és extrapoláció polinommal: Lagrange-formula

Leghatékonyabb megoldás:

- a $P(x)$ polinom x helyen felvett értékét közvetlenül állítjuk elő, a polinom együtthatóinak meghatározása nélkül
- fejezzük ki $P(x)$-et az ismert x_i és $y_i = f(x_i)$ értékekkel

Interpoláció és extrapoláció polinommal: Lagrange-formula

Leghatékonyabb megoldás:

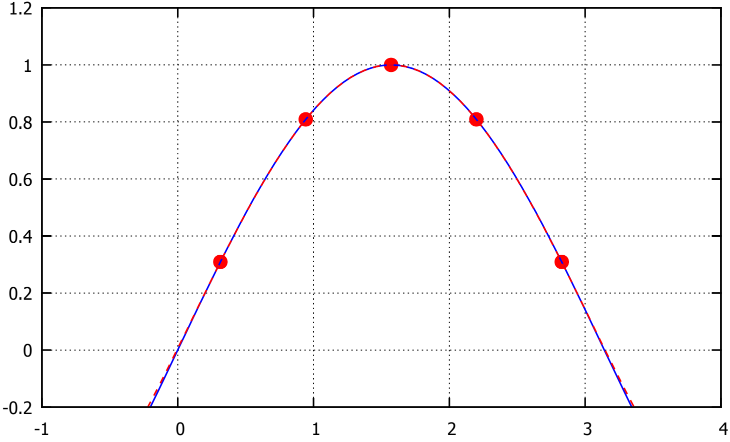
- a $P(x)$ polinom x helyen felvett értékét közvetlenül állítjuk elő, a polinom együtthatóinak meghatározása nélkül
- fejezzük ki $P(x)$-et az ismert x_i és $y_i = f(x_i)$ értékekkel

$$
\begin{aligned}
P(x) = \quad & \frac{(x-x_2)(x-x_3)\cdot\ldots\cdot(x-x_k)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)\cdot\ldots\cdot(x_1-x_k)}\cdot y_0 + \\
& + \frac{(x-x_1)(x-x_3)\cdot\ldots\cdot(x-x_k)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)\cdot\ldots\cdot(x_2-x_k)}\cdot y_1 + \ldots \\
& + \frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdot\ldots\cdot(x-x_{k-1})}{(x_k-x_1)(x_k-x_2)\cdot(x_k-x_{k-1})}\cdot y_k
\end{aligned}
$$

- Kielégíti a $P(x_i) = y_i$ egyenlőséget, hiszen
- az i. tagban a számláló és nevező azonos
- a többi tagban a számláló 0

Példa: sin(x) interpolálása lokálisan

Negyedrendű polinomot használva



Interpolációs polinom együtthatói

Ha sok x pontban keressük az interpolálandó $f(x)$ függvény értékét:

- akkor jobb kiszámolni az interpolációs polinom együtthatóit
- majd behelyettesíteni a polinomba

Feladat:

- adottak az $x_1, x_2, ..., x_N$ pontok és $y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), ..., y_N = f(x_N)$ értékek
- az interpoláló polinomnak az összes (x_i, y_i) ponton át kell mennie
- Polinom fokszáma: $N - 1$, ahol N a pontok száma.

Egyenletrendszer a polinom c_i együtthatóira

$$y_1 = c_1 + c_2 x_1 + c_3 x_1^2 + \dots + c_N x_1^{N-1}$$

$$y_2 = c_1 + c_2 x_2 + c_3 x_2^2 + \dots + c_N x_2^{N-1}$$

$$\vdots$$

$$y_N = c_1 + c_2 x_N + c_3 x_N^2 + \dots + c_N x_N^{N-1}$$

Ezt kell megoldani a c_i polinom-együtthatókra. x_i-k ismertek.

Egyenletrendszer a polinom c_i együtthatóira

$$y_1 = c_1 + c_2 x_1 + c_3 x_1^2 + \ldots + c_N x_1^{N-1}$$

$$y_2 = c_1 + c_2 x_2 + c_3 x_2^2 + \ldots + c_N x_2^{N-1}$$

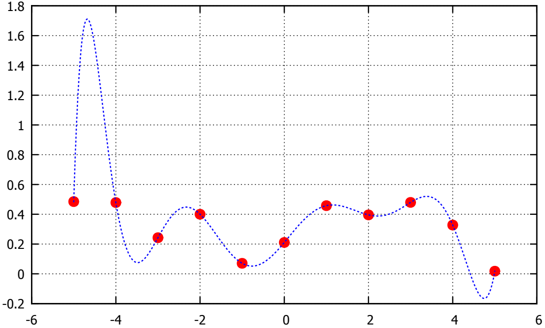
$$\vdots$$

$$y_N = c_1 + c_2 x_N + c_3 x_N^2 + \ldots + c_N x_N^{N-1}$$

Ezt kell megoldani a c_i polinom-együtthatókra. x_i-k ismertek.

- az x_i-k hatványaiból alkotott mátrix speciális (Vandermonde-mátrix)! Erre létezik speciális megoldó módszer
- de a Vandermonde-mátrixok többnyire numerikusan rosszul kondicionáltak

Magasfokú polinomok egy másik problémája



Együtthatók:

$$
\begin{aligned}
c_0 &= 0.0000\\
c_1 &= 0.0000\\
c_2 &= 0.0002\\
c_3 &= -0.0017\\
c_4 &= -0.0023\\
c_5 &= 0.0278\\
c_6 &= 0.0060\\
c_7 &= -0.1713\\
c_8 &= 0.0497\\
c_9 &= 0.3386\\
c_{10} &= 0.2109
\end{aligned}
$$

- több együttható is közel nulla
- a polinom egyes helyeken vadul oszcillál

Interpoláció és extrapoláció racionális függvényekkel

Racionális függvény: két polinom hányadosa.

Az $(x_i, y_i) \ldots (x_{i+m}, y_{i+m})$ pontokon áthaladó racionális függvény

$$R_{(i)(i+1)\ldots(i+m)} = \frac{P_\mu(x)}{Q_\nu(x)} = \frac{p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + \ldots + p_\mu x^\mu}{q_0 + q_1 x + q_2 x^2 + \ldots + q_\nu x^\nu}$$

- összesen $\mu + \nu + 1$ ismeretlen (q_0 tetszőleges)
- összesen $m + 1$ pont
- a vonatkozó egyenletrendszer megoldása $m + 1 = \mu + \nu + 1$ feltétel teljesítését jelenti

Rekurziós formulák $R_{(i)(i+1)\ldots(i+m)}$ szómolására (Numerical Recipies)

Mikor jobbak a racionális függvények a polinomoknál?

Ha az interpolálandó függvénynek pólusai vannak

- adott x_i értékeknél a függvény divergál, ekkor $Q_\nu(x)$ ott zérus lesz
- a polinom interpoláció ilyet nem tud

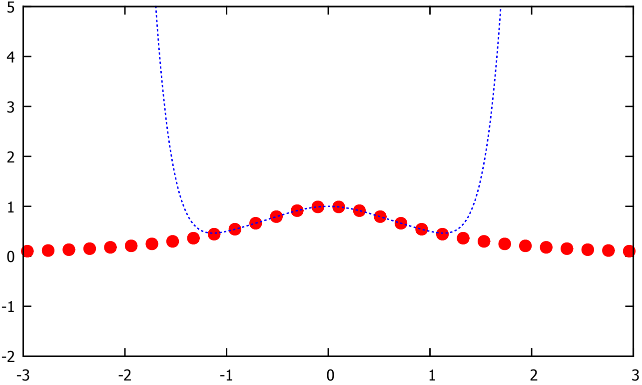
Vagy ha a függvénynek nincs is pólusa a valós tengely mentén, de

- a komplex síkon, közel a valós tengelyhez van pólusa
- a polinomok ilyenkor is rosszul viselkednek

Ezek nem feltétlen különleges függvények!

Példa komplex pólussal rendelkező függvényre

$$f(x) = \frac{1}{x^2 + 1}$$



Lineáris interpoláció még egyszer

Két pont között a legegyszerűbb interpolációs függvény az egyenes:

$$y = Ay_j + By_{j+1},$$

ahol

$$A = \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j} \qquad B = 1 - A = \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}$$

Ez kijön a Lagrange-formulából

Lineáris interpoláció még egyszer

Két pont között a legegyszerűbb interpolációs függvény az egyenes:

$$y = Ay_j + By_{j+1},$$

ahol

$$A = \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j} \qquad B = 1 - A = \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}$$

Ez kijön a Lagrange-formulából

Probléma:

- A második deriváltja ugyan két pont között nulla, de az x_j pontokban nem meghatározott (vagy végtelen)

Köbös spline (cubic spline)

Előírjuk, hogy az ismert x_j pontokban az interpoláló f függvény sima legyen, azaz

- létezzen a második deriváltja, és az legyen folytonos
- ebből következik, hogy az első deriváltja is folytonos.

Az egyértelmű megoldás kedvéért még általában határfeltételeket is előírunk az x_1 és x_N pontokban, pl:

- az interpoláció második deriváltja nulla az interpolációs intervallum két végén, vagy
- az interpoláció első deriváltja meghatározott értéket vesz az interpolációs intervallum végén

Köbös spline

A harmadfokú spline formulája:

$$y = Ay_j + By_{j+1} + Cy_j'' + Dy_{j+1}'',$$

ahol

$$A = \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j} \qquad B = 1 - A = \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}$$

a korábbiak, továbbá

$$C = \tfrac{1}{6}(A^3 - A)(x_{j+1} - x_j)^2$$

$$D = \tfrac{1}{6}(B^3 - B)(x_{j+1} - x_j)^2$$

Köbös spline

Ellenőrzés:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = Ay_j'' + By_{j+1}''$$

Az $A \equiv A(x)$ és $B \equiv B(x)$ konkrét alakját felhasználva könnyen belátható:

- $x = x_j$ esetén $\frac{d^2y}{dx^2} = y_j''$ és $x = x_{j+1}$ esetén $\frac{d^2y}{dx^2} = y_{j+1}''$
- a második derivált folytonos a két intervallum, pl (x_{j-1}, x_j) és (x_j, x_{j+1}) határán

Köbös spline

Ellenőrzés:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = Ay_j'' + By_{j+1}''$$

Az $A \equiv A(x)$ és $B \equiv B(x)$ konkrét alakját felhasználva könnyen belátható:

- $x = x_j$ esetén $\frac{d^2y}{dx^2} = y_j''$ és $x = x_{j+1}$ esetén $\frac{d^2y}{dx^2} = y_{j+1}''$
- a második derivált folytonos a két intervallum, pl (x_{j-1}, x_j) és (x_j, x_{j+1}) határán

Hogyan tudjuk meghatározni az y_j'' értékét?

Köbös spline

Ellenőrzés:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = Ay_j'' + By_{j+1}''$$

Az $A \equiv A(x)$ és $B \equiv B(x)$ konkrét alakját felhasználva könnyen belátható:

- $x = x_j$ esetén $\frac{d^2y}{dx^2} = y_j''$ és $x = x_{j+1}$ esetén $\frac{d^2y}{dx^2} = y_{j+1}''$
- a második derivált folytonos a két intervallum, pl (x_{j-1}, x_j) és (x_j, x_{j+1}) határán

Hogyan tudjuk meghatározni az y_j'' értékét?

- az (x_{j-1}, x_j) és (x_j, x_{j+1}) intervallumok határán a $\frac{dy}{dx}$ első derivált legyen folytonos!

$$\frac{x_j - x_{j-1}}{6} y_{j-1}'' + \frac{x_{j+1} - x_{j-1}}{3} y_j'' + \frac{x_{j+1} - x_j}{6} y_{j+1}'' = \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}$$

- ez összesen $N-2$ egyenlet az N db ismeretlen y_j''-re
- határfeltétel: $y_1'' = y_N'' = 0$ vagy az első deriváltra feltétel

y_j'' számolása: tridiagonális egyenletrendszer

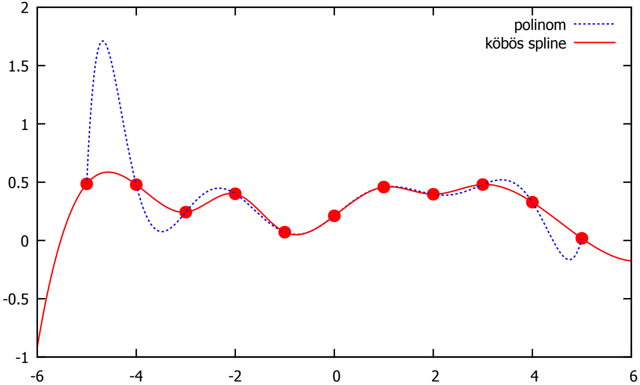
A probléma egy **tridiagonális** egyenletrendszerre vezet:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \dots & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots & & & \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \dots & & & \\ & & & & \dots & & & \\ & & & & \dots & a_{M-1} & b_{M-1} & c_{M-1} \\ & & & & \dots & 0 & a_N & b_M \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1'' \\ y_2'' \\ y_3'' \\ \dots \\ y_{M-1}'' \\ y_M'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \dots \\ d_{M-1} \\ d_M \end{pmatrix}$$

Megoldási pl: LU dekompozíció

- a speciális alak miatt összesen $O(M)$ műveletet igényel
- nem kell az egész $M \times M$ mátrixot tárolni, elég a három átlót pl három vektorban

A spline-ok jobbak, mint a polinomok



- A pontok között a köbös spline jól viselkedik
- Extrapolációra ez sem sokkal jobb

Interpoláció több dimenzióban, rácson, rács nélkül

Kétdimenziós esetet tárgyaljuk, magasabb dimenziókra általánosítható.

Szabályos rácson:

- a rácspontok indexelhetők x_i, y_j módon, $1 \leq i \leq M$, $1 \leq j \leq N$
- a függvényértékek: $z(x_i, y_j)$
- szabályos rács: két rácsvektor definiálja, de nem muszáj, hogy négyzetrács legyen.

Ha az ismert pontok elszórtan helyezkednek el:

- bonyolultabb az interpoláció, pl. Delaunay-háromszögelés

Interpolálás kétdimenziós rácson

Keressük az $z(x, y)$ függvényértéket, ahol

- $x_i < x < x_{i+1}$ és $y_i < y < y_{i+1}$
- az (x, y) pont tehát négy rácspont által definiált cellába esik

Visszavezetjük a problémát a lineáris esetre:

- Interpoláljunk először az egyik index szerint:
  $z(x, y_i)$-t becsüljük $z(x_i, y_i)$ és $z(x_{i+1}, y_i)$-ből, és
  $z(x, y_{i+1})$-t becsüljük $z(x_i, y_{i+1})$ és $z(x_{i+1}, y_{i+1})$-ből.
- Majd a másik irányban:
  $z(x, y)$-t becsüljük $z(x, y_i)$ és $z(x, y_{i+1})$-ből
- újrahasznosíthatók az egy dimenziós módszerek

Interpoláció rácson, koordináták mentén

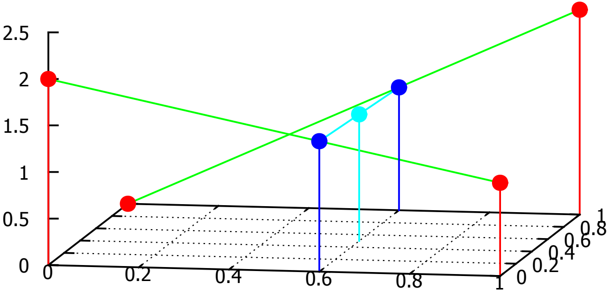


Figure: $z(0.6, 0.5)$ érték meghatározása egydimenziós interpolálások segítségével.

Bilineáris interpoláció

Jelölés

$$t = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, \qquad u = \frac{y - y_j}{y_{j+1} - y_j}$$

Ebből a függvény interpolált $z(x, y)$ értéke:

$$\begin{aligned} z(x,y) &= (1-t)(1-u)z_{i,j} + t(1-u)z_{i+1,j} + \\ &+ (1-t)uz_{i,j+1} + tuz_{i+1,j+1} \end{aligned}$$

- ez lineáris kifejezés, de nem egyszerűen egy sík (ahhoz 3 pont is elég)
- síknál általánosabb, “nyeregfelület” is lehet

Bilineáris interpoláció

Jelölés

$$t = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, \qquad u = \frac{y - y_j}{y_{j+1} - y_j}$$

Ebből a függvény interpolált $z(x, y)$ értéke:

$$\begin{aligned} z(x,y) &= (1-t)(1-u)z_{i,j} + t(1-u)z_{i+1,j} + \\ &+ (1-t)uz_{i,j+1} + tuz_{i+1,j+1} \end{aligned}$$

- ez lineáris kifejezés, de nem egyszerűen egy sík (ahhoz 3 pont is elég)
- síknál általánosabb, "nyeregfelület" is lehet

Fontos tulajdonságok:

- négy rácspont által meghatározott cellák között az interpolált függvény folytonosan változik
- de a gradiense nem folytonos a cellák határán

Bilineáris interpoláció

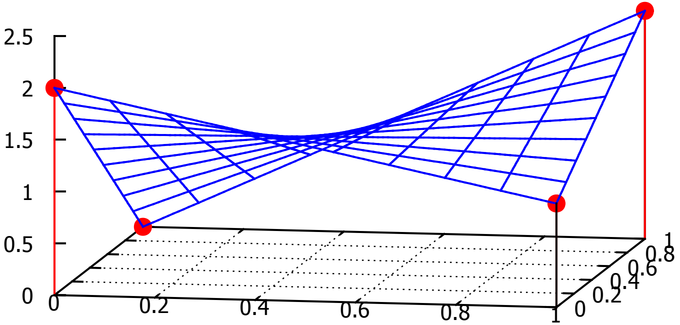


Figure: Bilineáris interpolációval kapható felület

Interpoláció két dimenzióban folytonos deriváltakkal

Két módszer, melyek nem függetlenek egymástól

- bi-köbös interpoláció
- köbös spline-ok 2D-ben

Bi-köbös interpoláció

- ki kell róni feltételeket az első deriváltakra és a vegyes deriváltakra is
- minden pontban szükséges a deriváltak értékének explicit megadása:

$$\frac{\partial z}{\partial x}, \frac{\partial z}{\partial y}, \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y}$$

- honnan vegyük a deriváltak értékét? analitikus alak v. numerikus differenciálás
- a deriváltak értékétől függetlenül a felület sima lesz, de nem garantált, hogy jól közelíti a függvényt
- csak akkor lesz jó az interpoláció, ha a deriváltakat is jól tudjuk számolni

Interpoláció szétszórt pontok esetén

Most a pontok már nem rácson helyezkednek el

- korábban egy (x, y) pont körül éppen négy környező pont volt
- nem egyértelmű, mi a legjobb választás a "környező pontok"-ra
- a korábbbi módszerek nem működnek

Egy lehetséges megoldás:

- minden pontból húzzunk szakaszokat a környező pontokba úgy, hogy háromszögeket kapjunk
- van olyan "háromszögelés" (trianguláció), ami egyértelmű
- interpoláljuk a függvényt a háromszög csúcsain felvett értékek segítségével

$\Rightarrow$ *Delaunay trianguláció, Voronoi csempézés*