

Модифицированный барицентрический метод

Голубев Г. К.

*CNRS, Университет Прованса, Франция,
Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича РАН.*

Крымова Е. А.

*Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича РАН,
Московский физико-технический институт,
компания DATADVANCE.
ekaterina.krymova@datadvance.net*

Аннотация

Рассматривается задача восстановления одномерной функции, заданной значениями на дискретном множестве точек. Хорошо известно, что интерполяция дробно-рациональными функциями может обеспечить потенциально очень высокую точность как для гладких функций, так и для функций "склеенных" из гладких кусков. К сожалению, практическое вычисление хороших дробно-рациональных интерполяций связано с необходимостью контролировать отсутствие полюсов у интерполатора на действительной оси. Эта задача является довольно сложной с вычислительной точки зрения и поэтому на практике довольно часто используется барицентрический метод построения дробно-рациональных интерполяций. Однако, часто оказывается, что точность этого метода при нерегулярном расположении точек может быть неудовлетворительна. При интерполяции же функций с разрывами наблюдается, как правило, настолько большой эффект Гиббса, что использование метода теряет смысл. В работе предлагается модификация барицентрического метода, позволяющая существенно уменьшить возникающие в классическом случае артефакты. Приводятся также результаты сравнения модифицированного барицентрического метода с классическими методами одномерной аппроксимации.

1. Введение

В данной работе рассматривается задача интерполяции функции $f(x)$, $x \in [a, b]$, по значениям $f(x_i)$ в точках

$$a \leq x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n \leq b.$$

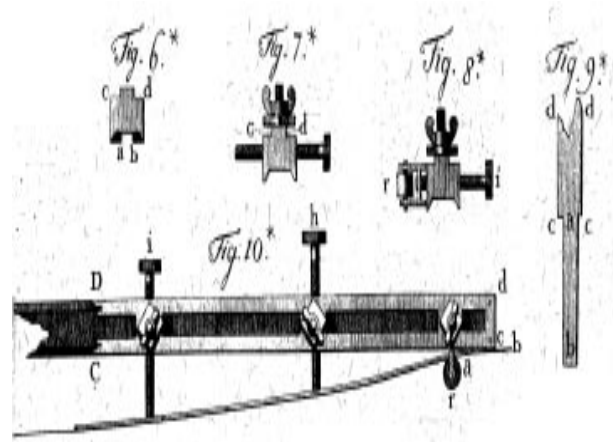


Рис. 1. Кубический сплайн из [1] (1752 год).

Спектр методов, применяемых для решения этой задачи, очень широк, и перечислять все возможные подходы в короткой заметке вряд ли целесообразно. Поэтому кратко остановимся на методах, которые чаще всего используются на практике.

Безусловно, первое место по популярности занимают сплайны благодаря своей робастности и существованию исключительно быстрых алгоритмов вычисления. У кубического сплайна имеется очень простая физическая интерпретация: он описывается формой тонкой гибкой линейки, проходящей через точки на плоскости с координатами $(x_i, f(x_i))$. Видимому, первое упоминание о сплайнах содержится в [1] (см. Рис. 1). Поскольку энергия гибкой линейки, имеющей форму $f(x)$, $x \in [a, b]$, пропорциональна $\int_a^b [f''(x)]^2 dx$, то с математической точки зрения кубический сплайн $S_3(x)$ является решением следу-

ющей оптимизационной задачи:

$$S_3(x) = \arg \min_{g: g(x_i)=f(x_i)} \int_a^b [g''(x)]^2 dx.$$

Это определение непосредственно обобщается на сплайны порядка q [2, 3]:

$$S_{2q-1}(x) = \arg \min_{g: g(x_i)=f(x_i)} \int_a^b [g^{(q)}(x)]^2 dx; \quad (1)$$

здесь $g^{(q)}(x)$ обозначает производную порядка q функции $g(x)$. Нетрудно проверить, что решение задачи (1) удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$S_{2q-1}^{(2q)}(x) = 0, \quad x \in [x_k, x_{k+1}],$$

то есть является полиномом порядка $2q-1$. Также просто проверить, что $S_{2q-1}(x)$ - полином степени $q-1$ на $[a, x_1]$ и $(x_n, b]$ и что эта функция имеет непрерывные производные до $2q-2$ -го порядка включительно. На практике, как правило, неизвестно, какой гладкостью обладает интерполируемая функция. Если она имеет сингулярности, такие как разрывы, то чем выше порядок сплайна, тем хуже будут интерполироваться данные в окрестности сингулярности. Удивительно то, что этот эффект, часто называемый эффектом Гиббса, для сплайнов имеет довольно умеренный характер по сравнению с интерполяцией тригонометрическими полиномами. Тем не менее, задача улучшения качества интерполяции вблизи сингулярностей безусловно является важной с практической точки зрения.

Один из возможных подходов к её решению основан на так называемых сплайнах с натяжением. Эвристическая идея состоит в том, чтобы использовать сплайны высокого порядка вдали от сингулярностей, а вблизи их сплайны низкого порядка. Формально кубический сплайн с натяжением [4, 5] определяется как решение следующей минимизационной задачи:

$$T_3(x) = \arg \min_{g: g(x_i)=f(x_i)} \left\{ \sum_k \left[\int_{x_k}^{x_{k+1}} [g''(x)]^2 dx + \frac{\sigma_k^2}{(x_{k+1} - x_k)^2} \int_{x_k}^{x_{k+1}} [g'(x)]^2 dx \right] \right\}. \quad (2)$$

Заметим, что если все σ_k^2 равны нулю, то $T_3(x)$ является кубическим сплайном, а если все σ_k^2 велики, то $T_3(x)$ приближается к линейному сплайну, для которого нет гиббсовского эффекта. Решение оптимизационной задачи (2) легко находится: на отрезке $[x_k, x_{k+1}]$ кубический сплайн с натяжением является решением дифференциального уравнения

$$T_3^{(4)}(x) - \frac{\sigma_k^2}{(x_{k+1} - x_k)^2} T_3^{(2)}(x) = 0.$$

Поэтому в отличие от обычного кубического сплайнов, сплайн с натяжением уже не является локальным полиномом третьей степени, а содержит гиперболические синусы. Для выбора коэффициентов натяжения σ_k применяется метод, обеспечивающий их минимальные значения при сохранении гладкости решения $T_3(x)$. Он заключается (см. [6]) в нахождении коэффициентов σ_k , при которых начинается выполняться условие выпуклости и монотонности функции $T_3(x)$ на интервале $[x_k, x_{k+1}]$.

Несколько иной подход к задаче интерполяции основан на использовании вероятностных моделей для $f(\cdot)$. Хорошо известно [7], что если $f(x)$ - гауссовский случайный процесс со средним $\mu(x) = \mathbf{E}f(x)$ и корреляционной функцией $R(u, v) = \mathbf{E}(f(u) - \mu(u))(f(v) - \mu(v))$, то наилучшая интерполяция является линейной

$$F(x) = \mu(x) + \sum_{k=1}^n \lambda_k(x) f(x_k)$$

и веса $\lambda_k(x)$ находятся как решения уравнения Винера-Хопфа-Колмогорова

$$\sum_{k=1}^n \lambda_k(x) R(x_k, x_s) = R(x, x_s), \quad s = 1, \dots, n. \quad (3)$$

В геостатистике этот метод известен под именем кригинга [8, 9]. Практическое применение этого метода осложняется тем, что, как правило, ни среднее $\mu(\cdot)$, ни корреляционная функция $R(\cdot, \cdot)$ точно не известны. Поэтому довольно часто для этих функций используются конечномерные параметрические модели, параметры которых оцениваются по данным $f(x_k)$ с помощью метода максимального правдоподобия. Например, для среднего можно использовать линейную модель $\mu(x) = \mu_0 + \mu_1 x$, а для корреляционной функции - $R_\theta(u, v) = \exp[-(u-v)^2 / (2\theta^2)]$. Таким образом, для того чтобы найти $\lambda_k(x)$ из (3) надо оценить три параметра μ_0, μ_1, θ . К сожалению, кригинг оказывается довольно чувствительным к выбору вероятностной модели. Например, если воспользоваться описанной выше моделью для интерполяции функций с разрывами, то результат может быть несравнимо хуже, чем при использовании кубических сплайнов. Если же функция будет гладкой, то метод сработает, как правило, очень хорошо.

2. Барицентрический метод

С математической точки зрения, идея использовать дробно-рациональные функции для интерполяции основана на их способности хорошо приближать как очень гладкие функции, так и функции являющиеся кусочно-полиномиальными. В частности, справедлив следующий факт (см. [10]). Пусть

\mathcal{D}_m множество дробно-рациональных функций

$$D_m(x) = \frac{a_0 + a_1x + \dots + a_mx^m}{1 + b_1x + \dots + b_mx^m}$$

порядка m . Тогда

$$\inf_{D \in \mathcal{D}_m} \sup_{x \in [-1,1]} |x| - D(x) \leq \exp(-\sqrt{m}).$$

Поэтому на первый взгляд кажется, что для интерполяции можно было бы использовать

$$\hat{D}_n(x) = \arg \min_{D \in \mathcal{D}_{n/2-1}} \sum_{k=1}^n |D(x_k) - f(x_k)|.$$

Однако $\hat{D}_n(x)$ может иметь сингулярности типа $(x - x_s)^{-1}$, где x_s некоторая точка из интервала (x_1, x_n) , и поэтому использовать данный метод не целесообразно.

Один из подходов, позволяющий избавиться от полюсов в дробно-рациональной интерполяции, связан с барицентрическим методом. Его идея - построить дробно-рациональную аппроксимацию на основе локальных интерполяционных полиномов степени $p_k(x)$, $k = 1, \dots, n-d$ степени d таких, что

$$p_k(x_i) = f(x_i), \quad i = k, \dots, k+d.$$

В работе [11] был предложен следующий метод гладкой склейки этих полиномов :

$$r(x) = \frac{\sum_{i=1}^{n-d} \pi_i(x) p_i(x)}{\sum_{i=1}^{n-d} \pi_i(x)}, \quad (4)$$

где

$$\pi_i(x) = \frac{(-1)^i}{(x-x_i)(x-x_{i+1}) \dots (x-x_{i+d})}.$$

Легко проверить, что

$$r(x_i) = f(x_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Менее тривиальны два следующие результата [11].

Теорема 1. *Функция $r(x)$ не имеет полюсов на действительной оси.*

Обозначим $h = \max_i |x_{i-1} - x_i|$ и определим норму функции $u(x)$, $x \in [a, b]$ как $\|u\|_C = \sup_{x \in [a,b]} |u(x)|$.

Теорема 2. *Пусть $d \geq 1$, $f \in C^{d+2}[a, b]$. Если число $n-d$ нечетное, то*

$$\|r - f\|_C \leq h^{d+1} \frac{(b-a) \|f^{(d+2)}\|_C}{d+2}.$$

При четном $n-d$

$$\|r - f\|_C \leq h^{d+1} \left(\frac{(b-a) \|f^{(d+2)}\|_C}{d+2} + \frac{\|f^{(d+1)}\|_C}{d+1} \right).$$

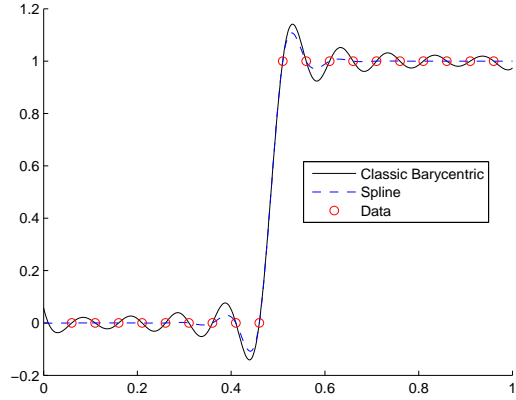


Рис. 2. Гиббсовский эффект для барицентрической интерполяции и кубических сплайнов $f(x) = \{x \geq 0.5\}$.

Описанный выше барицентрический метод обеспечивает хорошую точность интерполяции в случае равномерной сетки $x_{i+1} - x_i = const$ и высокой гладкости интерполируемой функции. Если же сетка неравномерна или функция f имеет разрывы, то его точность может быть невысока. Это явление объясняется наличием "глубокой памяти" у данного метода, когда $|\pi_k(x) p_k(x)|$ убывает очень медленно при удалении точки x от отрезка $[x_k, x_{k+d}]$. Этим также объясняется присущий этому методу ярко выраженный гиббсовский эффект (см. рис. 2).

3. Модифицированный барицентрический метод

В настоящей работе предлагается модифицировать барицентрический метод с помощью дополнительных весов $W_k(x) \geq C > 0$, демпфирующих величины $\pi_k(x) p_k(x)$ в случаях когда $p_k(x)$ очень далеко отклоняется от линейной интерполяции. Рассматривается следующая интерполяция :

$$r_{\text{mod}}(x) = \frac{\sum_{i=1}^{n-d} \frac{\pi_i(x) p_i(x)}{W_i(x)}}{\sum_{i=1}^{n-d} \frac{\pi_i(x)}{W_i(x)}}. \quad (5)$$

Легко проверить, что

$$r_{\text{mod}}(x_k) = f(x_k),$$

но, в отличие от стандартного барицентрического метода, в случае произвольных строго положительных весов, мы уже не можем утверждать, что функция $r_{\text{mod}}(x)$ ограничена при всех x .

В следующей теореме приводятся условия на веса, гарантирующие ограниченность $r_{\text{mod}}(x)$.

Теорема 3. *Предположим, что при любом $i = 1, \dots, n$ и при любом $x \in [x_i, x_{i+1}]$ выполнены условия:*

$$1. W_{k+1}(x) \geq W_k(x) \text{ при } k \geq i+1,$$

$$2. W_{k-1}(x) \geq W_k(x) \text{ при } k \leq i-d.$$

Тогда

$$\sup_x |r_{mod}(x)| < \infty.$$

Доказательство этого результата аналогично доказательству теоремы 1 и здесь опущено.

Практическое вычисление весов $W_k(x)$ осуществляется следующим образом. Пусть $l(x)$ линейная интерполяция на интервале $[x_1, x_n]$, построенная по данным $\{x_k, f(x_k)\}$, $k = 1, \dots, n$.

- Вычислим среднее отклонение полинома $p_i(x)$ от $l(x)$ на интервале $[x_k, x_{k+1}]$

$$d_i(x) = \frac{1}{x_{k+1} - x_k} \int_{x_k}^{x_{k+1}} [p_i(u) - l(u)]^2 du,$$

$$x \in (x_k, x_{k+1}).$$

Очевидно, что $d_i(x)$ постоянны на $(x_k, x_{k+1}]$.

- Поскольку функции $d_i(x)$ могут не удовлетворять условиям теоремы 3, вычислим огибающую этих функций ($x \in [x_k, x_{k+1}]$)

$$D_i(x) = \begin{cases} \max_{i \leq s < k-d} d_s(x), & i < k-d, \\ d_i(x), & i = k-d, \dots, k+1, \\ \max_{k+1 < s < i} d_s(x), & i > k+1. \end{cases}$$

- Окончательно, веса $W_i(x)$ вычисляются следующим образом:

$$W_i(x) = D_i(x) + D, \quad (6)$$

где

$$D = \frac{1}{x_n - x_1} \int_{x_1}^{x_n} [f_0(u) - l(u)]^2 du;$$

здесь

$$f_0(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i)(x-x_i)^{-4} / \sum_{i=1}^n (x-x_i)^{-4}$$

– гладкая аппроксимация кусочно-постоянной интерполяции.

Смысл коррекции весов с помощью (6) в том, чтобы подавлять слагаемые $\pi_i(x)p_i(x)$ (5) только тогда, когда полином $p_i(x)$ сильно отклоняется линейной интерполяции при $x \in [x_k, x_{k+1}]$. Постоянная D — это по сути среднее отклонение кусочно-постоянной интерполяции от линейной. Как правило, эта величина велика, поскольку кусочно-постоянная интерполяция плоха. Поэтому, в силу (6), существенное демпфирование осуществляется если $d_i(x) \gg D$.

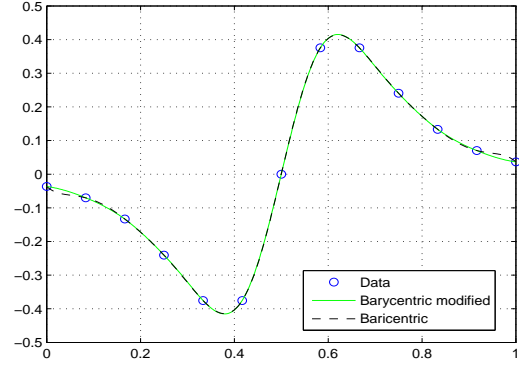


Рис. 3. Барицентрическая и модифицированная барицентрическая интерполяции гладкой функции.

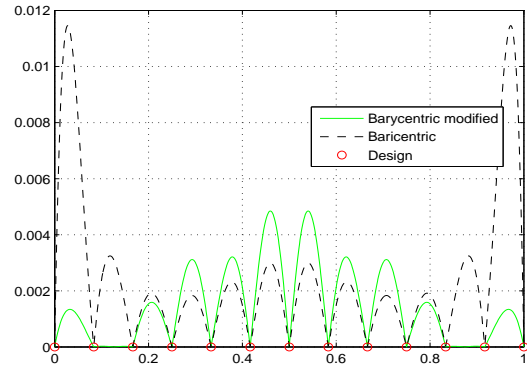


Рис. 4. Ошибки барицентрической и модифицированной барицентрической интерполяции гладкой функции.

4. Вычислительный эксперимент

Наш основная цель в этом разделе состоит в том, чтобы убедиться, что введение дополнительных весов

- существенно не ухудшает точность классического барицентрического метода в ситуации, когда функция является гладкой;
- существенно уменьшает гиббсовский эффект.

На рис. 3 и рис. 4 сравниваются барицентрический метод и его модификация при интерполяции гладкой функции $f(x) = \text{th}[6(x-0.5)] / \text{ch}[8(x-0.5)]$. На рис. 3 представлены исходные данные и полученные интерполяции, а рис. 4 – ошибки интерполяции. Как видно, для этих данных точности интерполяции методов близки. Хотя в среднем, стандартный барицентрический метод работает на гладких функциях несколько лучше, чем его модификация.

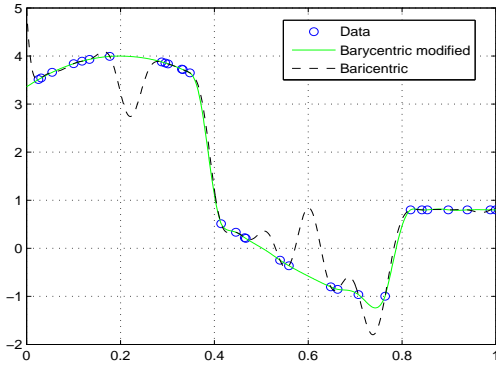


Рис. 5. Барицентрическая и модифицированная барицентрическая интерполяции функции с разрывами.

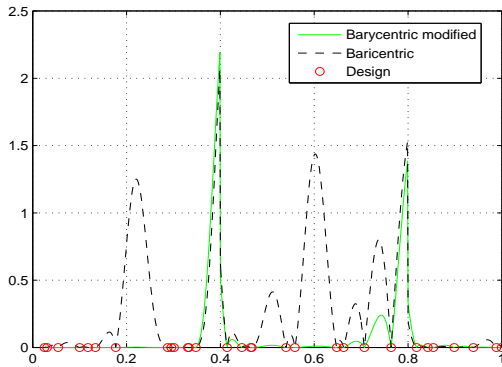


Рис. 6. Ошибки барицентрической и модифицированной барицентрической интерполяции разрывной функции.

Картина существенно меняется, когда интерполируемая функция имеет разрывы. Рис. 5 и 6 иллюстрируют эту ситуацию. В качестве функции была выбрана

$$f(x) = [-16(x-0.2)^2 + 4] \times \mathbf{1}\{x < 0.4\} + \sin(2\pi x) \times \mathbf{1}\{x \geq 0.4\} \times \mathbf{1}\{x < 0.8\} + 0.8 \times \mathbf{1}\{x \geq 0.8\}.$$

Как мы видим, стандартный барицентрический метод создает артефакты, существенно искажающие характер функции.

4.1. Сравнение с известными методами.

В этом разделе проводится численное сравнение предложенного метода со следующими алгоритмами одномерной интерполяции: со стандартным барицентрическим методом, сплайнами, сплайнами с натяжением, кригингом (пакет DACE

<http://www2.imm.dtu.dk/~hbn/dace>) с гауссовской и экспоненциальной ковариационной функциями. Все тестовые функции заданы на отрезке $[0, 1]$. В ка-

Таблица 1. Средне-квадратичные ошибки интерполяции

методы	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6
n=20						
Бар. мод.	1e-3	6e-3	0.68	0.04	0.12	2e-3
Бар. стан.	8e-4	1e-4	1.01	0.09	0.45	6e-3
Сплайн	1e-3	5e-3	0.67	0.05	0.19	3e-3
Спл. нат.	7e-3	5e-3	0.74	0.04	0.11	6e-4
Криг. эксп.	4e-2	3e-2	0.83	0.04	0.13	3e-3
Криг. гаус.	4e-7	2e-4	0.52	0.08	0.32	1e-2
n=40						
Бар. мод.	2e-5	5e-6	0.34	2e-2	0.05	8e-4
Бар. стан.	5e-5	7e-6	0.25	5e-2	0.19	2e-3
Сплайн	4e-5	1e-4	0.47	2e-2	0.07	1e-3
Спл. нат.	5e-5	4e-4	0.47	2e-2	0.04	5e-4
Криг. эксп.	6e-3	2e-3	0.92	2e-2	0.07	2e-3
Криг. гаус.	4e-9	1e-5	0.19	5e-2	0.18	6e-3
n=80						
Бар. мод.	6e-6	9e-6	2e-3	8e-3	0.03	7e-5
Бар. стан.	1e-5	3e-7	2e-4	8e-2	0.21	9e-4
Сплайн	1e-5	4e-6	8e-3	1e-2	0.04	1e-4
Спл. нат.	3e-5	5e-6	1e-3	7e-3	0.03	3e-5
Криг. эксп.	4e-3	1e-3	8e-2	9e-3	0.03	1e-4
Криг. гаус.	7e-9	1e-8	1e-4	6e-2	0.14	4e-3
n=160						
Бар. мод.	9e-7	1e-7	1e-4	4e-3	2e-2	2e-5
Бар. стан.	1e-6	3e-6	3e-5	2e-2	6e-2	4e-4
Сплайн	4e-7	7e-7	6e-4	4e-3	2e-2	7e-5
Спл. нат.	5e-7	7e-7	7e-4	4e-3	2e-2	1e-5
Криг. эксп.	6e-4	3e-4	2e-2	4e-3	2e-2	4e-5
Криг. гаус.	3e-9	1e-9	1e-8	6e-2	6e-2	5e-3

честве гладких функций были выбраны

$$f_1(x) = \sin(2\pi x),$$

$$f_2(x) = (1 + 25x^2)^{-1},$$

$$f_3(x) = \text{sh}[2 \exp(-60(x-0.8)^2) - 3 \exp(-70(x-0.5)^2) + 4 \exp(-80(x-0.3)^2)].$$

Функции $f_4(\cdot)$, $f_5(\cdot)$, $f_6(\cdot)$ имеют особенности и определяются следующим образом :

$$f_4(x) = \mathbf{1}\{x \geq 0.5\},$$

$$f_5(x) = -4 \sin(3x) \times \mathbf{1}\{x < 0.36\}$$

$$- (1.5 - 4x)^2 \times \mathbf{1}\{x > 0.36\},$$

$$f_6(x) = 1 - |2x - 0.5|.$$

5. Заключение

В задаче одномерной интерполяции предлагается модификация барицентрического метода, суще-

ственно уменьшающая гиббсовский эффект, присущий этому методу. Из результатов моделирования следует, что эта модификация позволяет существенно улучшить качество интерполяции разрывных функций и при этом несущественно ухудшает ошибку интерполяции на гладких функциях. Проведено также сравнение предложенного метода со стандартным барицентрическим методом, сплайнами, сплайнами с натяжением, кригингом.

Список литературы

- [1] H.-L. Duhamel du Monceau, *Eléments de l'Architecture Navale ou Traité de la Construction des Vaissaux*, Paris, 1752.
- [2] П.-Ж. Лоран *Аппроксимация и оптимизация*, МИР, Москва, 1975.
- [3] C. De Boor *A practical guide to splines*, Springer, 1978.
- [4] D. G. Schweikert, *An interpolation curve using a spline in tension*, J. Math. Phys., Vol. 45, No. 3, 1966, pp. 312–317.
- [5] K. Spath, *Exponential Spline Interpolation*, Computing Volume 4, Number 3, 1969, pp. 225–233.
- [6] R. J. Renka, *Interpolatory tension splines with automatic selection of tension factors*, SIAM J. Sci. STAT. COMPUT., Vol. 8, No. 3, May 1987, pp. 396–415.
- [7] А. Н. Колмогоров, *Интерполирование и экстраполирование стационарных случайных последовательностей*, Изв. АН СССР. Сер. матем., 1941, с. 3–14.
- [8] J. Sacks, W. J. Welch, T. J. Mitchell, H. P. Wynn, *Design and Analysis of Computer Experiments*, Statistical Science, 1989, pp. 409–435.
- [9] M. Kanevski, *Advanced mapping of environmental data: geostatistics, machine learning and Bayesian maximum entropy*, John Wiley and Sons, 2008 .
- [10] В. К. Дзядык *Введение в теорию равномерного приближения функций полиномами*. Наука, М., 1977, 512 с.
- [11] M. S. Floater, K. Hormann, *Barycentric rational interpolation with no poles and high rates of approximation*, Numerische Mathematik, August 2007, pp. 315–331.