Interpolace a aproximace pomocí polynomů

Teorie (stručný výběr z přednášek)

Interpolace pomocí polynomů

Jsou dány hodnoty nějaké funkce $y(x)$ v konečném počtu bodů; chceme je interpolovat polynomem $p(x)$, abychom mohli odhadnout hodnoty funkce $y(x)$ i mimo dané body.

Označme jako x_i, $i = 0, 1, 2, \dots n$, zadané hodnoty nezávisle proměnné x a jako y_i předepsané hodnoty funkce $y(x)$ v bodech x_i. Zapišme dané hodnoty do tabulky:

x	x_0	x_1	x_2	...	x_n
y	y_0	y_1	y_2	...	y_n

Je-li dáno $n+1$ bodů, existuje právě jeden polynom $p_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$ stupně nejvýše n, který prochází všemi zadanými body. Jeho koeficienty $a_0, a_1, \dots a_n$ jsou určeny $n+1$ lineárními rovnicemi

$$\begin{aligned}
a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \dots + a_n x_0^n &= y_0 \\
a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \dots + a_n x_1^n &= y_1 \\
a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 + \dots + a_n x_2^n &= y_2 \\
&\dots \\
a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \dots + a_n x_n^n &= y_n
\end{aligned}$$

– každá z nich představuje požadavek, aby polynom procházel jedním z bodů $[x_i, y_i]$, neboli $p(x_i) = y_i$, $i = 1, 2, \dots n$.

Maticově lze tuto soustavu zapsat jako $\mathbf{Q}\,\mathbf{a} = \mathbf{y}$

$$\mathbf{Q}\,\mathbf{a} \equiv \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} \equiv \mathbf{y}\ , \tag{1}$$

jejím řešením je vektor $\mathbf{a} = [a_0, a_1, \dots a_n]^T$.

Matice $\mathbf{Q}$ se nazývá Vandermondova, pro hodnoty x_i navzájem různé je regulární, takže soustava (1) má právě jedno řešení. (Tato matice je však s roztoucím n čím dál hůř podmíněná, proto je vhodnější použít *Lagrangeovy interpolační polynomy.*)

Příklad 1

V tabulce jsou dány 3 body. Najděte interpolační polynom a použijte jej pro odhad hodnoty $y(x)$ v bodě $x = 0.5$.

x	-1	1	2
y	8	4	5

Řešení

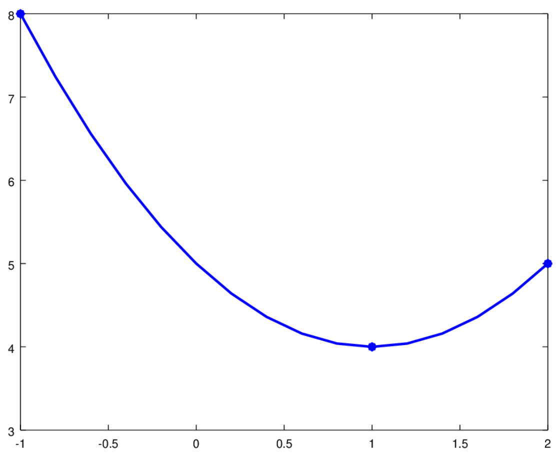
Jsou dány 3 body, interpolační polynom bude tedy mít 3 neznámé koeficienty, takže bude druhého stupně: $p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$. Zapišme rovnice (1):

$$\begin{aligned} a_0 + a_1 \cdot (-1) + a_2 \cdot (-1)^2 &= 8 \\ a_0 + a_1 \cdot 1 + a_2 \cdot 1^2 &= 4 \\ a_0 + a_1 \cdot 2 + a_2 \cdot 2^2 &= 5 \end{aligned}$$

nebo maticově

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix} \quad .$$

Řešení je $a_0 = 5$, $a_1 = -2$ a $a_2 = 1$, takže interpolační polynom je $p_2(x) = 5 - 2x + x^2$.
Hodnotu v $x = 0.5$ lze odhadnout jako $p_2(0.5) = 5 - 2 \cdot 0.5 + 0.5^2 = 4.25$.



Obr. 1: Řešení příkladu 1 – dané body (vyznačené tečkami) jsou interpolovány polynomem 2. stupně.

Aproximace pomocí polynomů

Opět předpokládáme, že známe $n+1$ hodnot nějaké funkce $y(x)$, a chceme je *aproximovat* pomocí polynomu $p(x)$, abychom mohli odhadnout hodnoty funkce $y(x)$ i mimo dané body. Nyní slevíme z požadavku, aby graf polynomu *procházel* danými body, spokojíme se s tím, že bude ležet jen *blízko* nich. Zato však budeme požadovat, aby stupeň m tohoto polynomu byl hodně nízký, často m je menší než 3.

Poznámka: při aproximace již není nutné předpokládat, že x_i jsou navzájem různé.

Metoda nejmenších čtverců

V rámci této metody termín *blízko* vyjadřuje nalezení minima kvadratické odchylky δ (nebo její druhé mocnicny δ^2), což představuje minimalizaci součtu druhých mocnin vzdáleností (ve směru y) daných bodů od grafu aproximačního polynomu, $r_i = p(x_i) - y_i$:

$$\delta^2 \equiv \|\mathbf{r}\|_2^2 = \sum_{i=0}^{n} r_i^2 = \sum_{i=0}^{n} (p(x_i) - y_i)^2 \quad \rightarrow \quad min\ .$$

Funkci $\delta^2 \equiv S(a_0, a_1, \dots a_m)$ minimalizujeme vzhledem k proměnným $a_0, a_1, \dots a_m$ představujícím koeficienty hledaného polynomu $p(x)$. Minimum najdeme tak, že položíme parciální derivace funkce S rovny nule. Protože má $m+1$ proměnných, dostaneme $m+1$ rovnic

$$\begin{aligned}
0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} &= \sum_{i=0}^{n} 2r_i \frac{\partial r_i}{\partial a_0} = \sum_{i=0}^{n} 2r_i \\
0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} &= \sum_{i=0}^{n} 2r_i \frac{\partial r_i}{\partial a_1} = \sum_{i=0}^{n} 2r_i x_i \\
0 = \frac{\partial S}{\partial a_2} &= \sum_{i=0}^{n} 2r_i \frac{\partial r_i}{\partial a_2} = \sum_{i=0}^{n} 2r_i x_i^2 \\
& \dots \\
0 = \frac{\partial S}{\partial a_m} &= \sum_{i=0}^{n} 2r_i \frac{\partial r_i}{\partial a_m} = \sum_{i=0}^{n} 2r_i x_i^m
\end{aligned}$$

Po úpravách tuto soustavu rovnic můžeme vyjádřit maticově jako soustavu tzv. *normálních rovnic* $\mathbf{A}\,\mathbf{a} = \mathbf{b}$, kde $\mathbf{a} = [a_0, a_1, \dots a_m]^T$ je hledaný vektor řešení,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^n x_i & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^m \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x_i^3 & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{m+2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=0}^n x_i^m & \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{2m} \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 y_i \\ \dots \\ \sum_{i=0}^n x_i^m y_i \end{bmatrix} \qquad (2)$$

Poznámka: levý horní prvek $n+1$ matice $\mathbf{A}$ představuje počet daných bodů.

Jiné odvození soustavy normálních rovnic

Zkusme znovu zapsat požadavek, že polynom prochází všemi danými body,
$p(x_i) = y_i,\ i = 0, 1, \dots n$:

$$\mathbf{Q}\,\mathbf{a} \equiv \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^m \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^m \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} \equiv \mathbf{y} \quad . \tag{3}$$

Výsledná soustava se teď liší od soustavy (1) tím, že její matice $\mathbf{Q}$ už není čtvercová – má m sloupců a n řádků, přičemž m je mnohem menší než n, takže soustava je "přeurčená" a řešení obecně neexistuje.

Přesné řešení by existovalo jen v případě, že pravá strana y je nějakou lin. kombinací sloupců matice $\mathbf{Q}$, neboli že leží ve vektorovém prostoru generovaném sloupci této matice.

Spokojíme se tedy s přibližným řešením $\mathbf{a}$, po kterém budeme požadovat, aby se vektor $\mathbf{Q}\,\mathbf{a}$, ležící ve vektorovém prostoru generovaném sloupci $\mathbf{Q}$, "co nejmíň" odchyloval od pravé strany $\mathbf{y}$. Tedy aby rozdíl $\mathbf{r} = \mathbf{Q}\,\mathbf{a} - \mathbf{y}$ byl kolmý k vektorovému prostoru generovanému sloupci matice $\mathbf{Q}$.

To nastane, právě když $\mathbf{r}$ bude kolmý ke všem sloupcům matice $\mathbf{Q}$, neboli $\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{r} = 0$,
tj. $\mathbf{Q}^T \cdot (\mathbf{Q}\,\mathbf{a} - \mathbf{y}) = 0$.

Tento požadavek vede k soustavě normálních rovnic

$$\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\,\mathbf{a} \equiv \begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^n x_i & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^m \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x_i^3 & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{m+2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=0}^n x_i^m & \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 y_i \\ \dots \\ \sum_{i=0}^n x_i^m y_i \end{bmatrix} \equiv \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \tag{4}$$

Matice $\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}$ je symetrická pozitivně semidefinitní, a jsou-li sloupce $\mathbf{Q}$ lineárně nezávislé, je pozitivně definitní (a tedy regulární).

Příklad 2 – pokračování příkladu 1

Do tabulky z př. 1 přidáme další 3 body:

x	-1	1	2	-1	0	2
y	8	4	5	7	4	6

a chceme je aproximovat polynomem 2. stupně.

Řešení

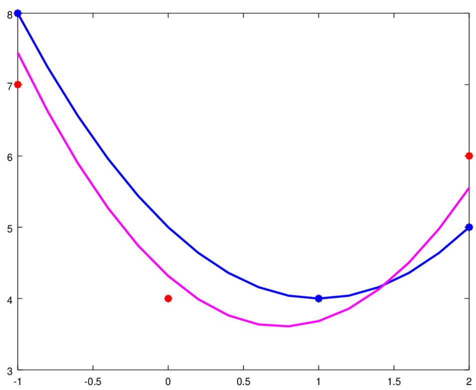
Soustava (1) by teď měla více rovnic než neznámých a obecně by neměla řešení:

$$\mathbf{Q}\,\mathbf{a} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \\ 5 \\ 7 \\ 4 \\ 6 \end{bmatrix} = \mathbf{y} \quad .$$

Soustava normálních rovnic (4):

$$\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\,\mathbf{a} = \begin{bmatrix} 6 & 3 & 11 \\ 3 & 11 & 15 \\ 11 & 15 & 35 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 34 \\ 11 \\ 63 \end{bmatrix} = \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \quad .$$

Řešení je $a_0 = 4.3158$, $a_1 = -1.8816$ a $a_2 = 1.25$,
aproximační polynom je $p_2(x) = 4.3158 - 1.8816x + 1.25x^2$.



Obr. 2: Řešení př. 2. původní body (modré tečky) a přidané body (červené tečky). Růžová křivka – aproximace všech 6 bodů polynomem 2. stupně. Modrá – původní interpolační polynom.

Příklad 3

Následující tabulkou je dáno 7 bodů:

x	-1	0	0	1	1	2	4
y	5	6	5	7	6	8	11

Najděte aproximační polynomy prvního a druhého stupně.

Řešení

Polynom **prvního** stupně je přímka $p_1(x) = a_0 + a_1 x$, jejíž koeficienty jsou určeny soustavou rovnic (2), kde $m = 1$, $n = 6$:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^n x_i \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \end{bmatrix}$$

Rozšíříme danou tabulku o dva řádky a jeden sloupec, které použijeme pro výpočet hodnot prvků matice a pravé strany:

								suma
x	-1	0	0	1	1	2	4	7
y	5	6	5	7	6	8	11	48
xy	-5	0	0	7	6	16	44	68
$\mathbf{x^2}$	1	0	0	1	1	4	16	23

Takto získáme soustavu pro dvě neznámé a_0 a a_1:

$$\begin{bmatrix} 7 & 7 \\ 7 & 23 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 48 \\ 68 \end{bmatrix}.$$

Řešení je $a_0 = 5.6071$, $a_1 = 1.25$,
lineární aproximace daných dat je $p_1(x) = 5.6071 + 1.25\,x$.

Polynom **druhého** stupně je parabola $p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$, jejíž koeficienty jsou určeny soustavou rovnic (2), kde $m = 2$, $n = 6$:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x_i^3 \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x_i^3 & \sum_{i=0}^n x_i^4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

Rozšíříme tabulku o další tři řádky:

								suma
x	-1	0	0	1	1	2	4	7
y	5	6	5	7	6	8	11	48
xy	-5	0	0	7	6	16	44	68
$\mathbf{x^2}$	1	0	0	1	1	4	16	23
$\mathbf{x^2y}$	5	0	0	7	6	32	176	226
$\mathbf{x^3}$	-1	0	0	1	1	8	64	73
$\mathbf{x^4}$	1	0	0	1	1	16	256	275

Získáme sousatvu tří lineárních rovnic pro tři neznámé a_0, a_1 a a_2:

$$\begin{bmatrix} 7 & 7 & 23 \\ 7 & 23 & 73 \\ 23 & 73 & 275 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 48 \\ 68 \\ 226 \end{bmatrix}.$$

Řešení je $a_0 = 5.5856$, $a_1 = 0.8313$, $a_2 = 0.1340$; kvadratický polynom aproximující daná data je $p_1(x) = 5.5856 + 0.8313\,x + 0.1340\,x^2$.