APROXIMACE FUNKCÍ

Při numerickém řešení úloh matamatické analýzy se často setkáme s úkolem nahradit funkci f, která není z nějakého důvodu vhodná pro další výpočty, jinou funkcí Φ. Od funkce Φ požadujeme, aby ve vhodném smyslu napodobila funkci f, tedy aby náhrada neměla za následek velkou chybu dalšího výpočtu. Obvykle ještě chceme, aby se s funkcí Φ snadno matematicky pracovalo. Takovému nahrazení funkce f funkcí Φ říkáme aproximace původní funkce f aproximující funkcí Φ.

Úmluva: V dalším textu se budeme věnovat aproximacím **spojitých funkcí jedné reálné proměnné** . Aproximující funkcí Φ bude funkce polynomická - zkráceně polynom, tedy funkce tvaru

$$\Phi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n, \quad n \in \mathbf{N}\,,\ a_i \in \mathbf{R}\,,\ i = 0, 1, \ldots, n.$$

Zopakujme si stručně základní pojmy, spojené s polynomem:

Je-li $a_n \neq 0$, říkáme, že Φ je polynom n-tého stupně.

Číslo x_0, pro něž $\Phi(x_0) = 0$, nazýváme kořenem polynomu Φ.

Nechť n je celé číslo, $n \geq 0$, a $\Phi(x)$ je polynom n-tého stupně. Potom $\Phi(x)$ má nejvýše n různých reálných kořenů.

Jsou-li $x_1, x_2, \cdots, x_n$ všechny kořeny polynomu $\Phi(x)$, potom $\Phi(x)$ lze zapsat ve tvaru $\Phi(x) = a_n(x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_n)$. (Říkáme, že $\Phi(x)$ je zapsán ve tvaru součinu kořenových činitelů $x - x_j, j = 1, 2 \ldots, n$.)

Z teoretického hlediska je v teorii aproximací důležité nastávající tvrzení:
Je-li f spojitá funkce na intervalu $\langle a, b\rangle$, potom ke každému reálnému číslu $\varepsilon,\ \varepsilon > 0$ existuje polynom $\Phi(x)$ tak, že

$$|f(x) - \Phi(x)| < \varepsilon \quad \forall x \in \langle a, b\rangle.$$

V tomto textu se budeme věnovat dvěma aproximačním metodám, a to

- interpolační aproximaci, zkráceně interpolaci,
- aproximaci metodou nejmenších čtverců.

Protože u obou metod pracujeme s pojmy *interval a jeho dělení,* resp. *ekvidistantní dělení,* definujme je.
Nechť n je přirozené číslo a nechť platí $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$. Potom množinu $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ nazveme dělením intervalu $\langle a, b\rangle$ a body $x_0, x_1, \ldots, x_n$ uzlovými body dělení.
Jestliže $x_k = x_0 + \frac{b-a}{n}k,\ k = 0, 1, \ldots, n$, pak takové dělení nazveme ekvidistantní a číslo $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \cdots = x_n - x_{n-1}$ nazveme krokem dělení.

Příklad.

Dělením intervalu $\langle 4, 6\rangle$ pro $n = 4$ je například množina $\{4, 4.3, 5.2, 5.8, 6\}$, tedy $x_0 = 4,\ x_1 = 4.3,\ x_2 = 5.2,\ x_3 = 5.8,\ x_4 = 6$ jsou uzlové body tohoto dělení.
Ekvidistantním dělením intervalu $\langle 4, 6\rangle$ pro $n = 4$ je množina $\{4, 4.5, 5.0, 5.5, 6\}$. Uzlovými

body ekvidistantního dělení jsou $x_0 = 4$, $x_1 = 4.5$, $x_2 = 5.0$, $x_3 = 5.5$, $x_4 = 6$. Číslo $h = x_1 - x_0 = 0.5$ je krokem (diferencí) tohoto dělení.

INTERPOLACE

O funkci f víme, že je spojitá na $\langle a, b\rangle$. Označme $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ dělení intervalu $\langle a, b\rangle$. Úkolem interpolace je najít polynom $\Phi(x)$ nejvýše n-tého stupně takový, že

$$\Phi(x_i) = f(x_i) \quad \text{pro } i = 0, 1, \ldots, n.$$

Polynom $\Phi(x)$ se nazývá interpolační polynom funkce f na intervalu $\langle a, b\rangle$.

Vyvstává otázka existence a jednoznačnosti interpolačního polynomu. Lze dokázat, že takový polynom existuje nejvýše jeden. Toto tvrzení plyne snadno ze skutečnosti, že nekonstantní polynom stupně nejvýše n nemůže mít více než n různých kořenů. Otázku existence polynomu $\Phi(x)$ zodpovíme tak, že interpolační polynom zkonstruujeme. Konstruovat $\Phi(x)$ (což znamená vypočítat koeficienty $a_0, a_1, \ldots, a_n$) lze různě. Ukážeme si tři z možných způsobů konstrukce.

Přímý výpočet koeficientů interpolačního polynomu

Metodu přímého výpočtu interpolačního polynomu ukážeme na následujícím příkladu.

Příklad.

Funkce f, spojitá na intervalu $\langle 1, 3\rangle$, je dána svými hodnotami v bodech $x_0 = 1$, $x_1 = 2$, $x_2 = 3$, kde $f(1) = 0$, $f(2) = 5$, $f(3) = 14$. Říkáme, že funkce je dána tabulkou

x_i	1	2	3
$f(x_i)$	0	5	14

Hledáme interpolační polynom $\Phi(x)$,

$$\begin{aligned}
\Phi(x) &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \quad \text{takový, že}\\
\Phi(x_i) &= f(x_i), \quad \text{tedy}\\
\Phi(1) &= 0 = a_0 + a_1 1 + a_2 1^2,\\
\Phi(2) &= 5 = a_0 + a_1 2 + a_2 2^2,\\
\Phi(1) &= 14 = a_0 + a_1 3 + a_2 3^2, \quad \text{tudíž}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_0 + a_1 + a_2 &= 0,\\
a_0 + 2a_1 + 4a_2 &= 5,\\
a_0 + 3a_1 + 9a_2 &= 14.
\end{aligned}$$

Řešením této soustavy tří lineárních rovnic pro tři neznámé je $(a_0, a_1, a_2) = (-1, -1, 2)$. Interpolační polynom $\Phi(x) = -1 - x + 2x^2$.

Metoda přímého výpočtu koeficientů a_i je, zejména pro polynomy vyšších stupňů, zdlouhavá a řešení rozsáhlých soustav lineárních rovnic přináší obtíže spojené s numerickým řešením soustavy. Těmto problémům se lze vyhnout, konstruujeme-li polynom $\Phi(x)$ jako polynom např. v Lagrangeově nebo Newtonově tvaru.

Lagrangeův interpolační polynom

Funkce f, spojitá v $\langle a, b\rangle$, je dána svými hodnotami $f(x_0),\ f(x_1), \dots\ f(x_n)$ v uzlových bodech $x_0,\ x_1, \dots x_n$ dělení intervalu $\langle a, b\rangle$. Říkáme, že f je zadána tabulkou

x_i	x_0	x_1	$\dots$	x_n
$f(x_i)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$\dots$	$f(x_n)$

.

Nejprve zkonstruujme pomocné polynomy $l_i,\ i = 0, 1, \dots, n,$, po nichž chceme, aby měly následující vlastnosti: každý z polynomů l_i je n-tého stupně a $l_i(x_i) = 1, l_i(x_j) = 0$ pro $i \neq j$. Jejich konstrukce je snadná - užitím následujícího vzorce:

$$l_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)}.$$

Takto zkonstruované polynomy l_i mají opravdu požadované vlastnosti. Výraz v čitateli zlomku je součin kořenových činitelů, které odpovídají kořenům x_j pro $j \neq i$ (tedy opravdu $l_i(x_j) = 0$ pro $j \neq i$; těchto kořenových činitelů je n, takže l_i je polynom n-tého stupně). Výraz ve jmenovateli je konstanta, rovná hodnotě polynomu v čitateli v bodě $x = x_i$ (tedy $l_i(x_i) = 1$.
Je-li interpolační polynom $\Phi(x)$ v Lagrangeově tvaru, označíme jej ve shodě s tradicí $L_n(x)$. Platí:

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j(x).$$

$L_n(x)$ je interpolační polynom určený uzlovými body $x_0, x_1, \dots, x_n$ a hodnotami $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$. Pro $i = 0, 1, \dots, n$ je

$$L_n(x_i) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j(x_i) = f(x_i),$$

kde pro $i \neq j$ je $l_j(x_i) = 0$ a $l_i(x_i) = 1$. Tedy L_n je hledaný interpolační polynom.

Příklad.

Sestrojte Lagrangeův interpolační polynom pro funkci f, spojitou v $\langle 1, 3\rangle$, zadanou následující tabulkou:

x_i	1	2	3
$f(x_i)$	0	5	14

.

Sestrojme pomocné polynomy l_0, l_1, l_2:

$$l_0 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)},$$
$$l_1 = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)},$$
$$l_2 = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_1)(x_2-x_1)}, \quad \text{tedy}$$

$$l_0 = \frac{(x-2)(x-3)}{(1-2)(1-3)} = \frac{1}{2}(x^2-5x+6),$$
$$l_1 = \frac{(x-1)(x-3)}{(2-1)(2-3)} = -(x^2-4x+3),$$
$$l_2 = \frac{(x-1)(x-2)}{(3-1)(3-2)} = \frac{1}{2}(x^2-3x+2).$$

$$L_2(x) = \sum_{j=0}^{2} f(x_j) l_j = 0\frac{(x-2)(x-3)}{2} + 5\frac{(x-1)(x-3)}{-1} + 14\frac{(x-1)(x-2)}{2}.$$

Provedeme-li naznačené násobení, dostaneme $L_2(x)$ ve tvaru:

$$L_2(x) = 2x^2 - x - 1.$$

Tento výsledek jsme očekávali (viz příklad uvedený v přímé metodě), neboť víme, že interpolační polynom (pro shodná vstupní data) je jediný.

Newtonův interpolační polynom

Funkce f, spojitá v $\langle a, b\rangle$, je dána svými hodnotami $f(x_0),\ f(x_1), \dots\ f(x_n)$ v uzlových bodech $x_0,\ x_1, \dots x_n$ dělení intervalu $\langle a, b\rangle$, tedy f je dána tabulkou

x_i	x_0	x_1	$\dots$	x_n
$f(x_i)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$\dots$	$f(x_n)$

.

Interpolační polynom hledejme v tzv. Newtonově tvaru:

$$N_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}).$$

Konstanty $a_0, a_1, \dots, a_n$ vypočteme z podmínek

$$N_n(x_i) = f(x_i) \quad \text{pro } i = 0, 1, \dots, n.$$

Podmínky můžeme zapsat ve tvaru:

$$\begin{aligned} f(x_0) &= a_0, \\ f(x_1) &= a_0 + a_1(x_1 - x_0), \\ &\vdots \\ f(x_n) &= a_0 + a_1(x_n - x_0) + \cdots a_n(x_n - x_0)(x_n - x_1)\cdots(x_n - x_{n-1}). \end{aligned}$$

Tato soustava $n+1$ lineárních rovnic pro $n+1$ neznámých $a_0, a_1, \dots, a_n$ má právě jedno řešení (jedná se o soustavu s trojúhelníkovou maticí soustavy, mající na hlavní diagonále nenulové prvky).

Vypočítat koeficienty $a_i,\ i = 0, 1, \dots, n$, řešením uvedené soustavy je pracné. Snadněji lze a_i najít, definujeme-li nejprve čísla, zvaná poměrné diference, která se snadno vypočítají z tabulky funkčních hodnot funkce f.

Nazvěme funkční hodnoty $f(x_i)$ poměrnými diferencemi nultého řádu funkce f a označme je $f[x_i]$, $i = 0, 1, \dots, n$. Z diferencí nultého řádu utvořme všechny podíly $\frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}$, $i = 0, 1, \dots, n-1$, a nazvěme je poměrnými diferencemi prvního řádu a označme $f[x_i, x_{i+1}]$. Poměrné diference druhého řádu $f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$ tvoříme analogicky pomocí diferencí prvního řádu, tedy

$$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i}, \quad i = 0, 1, \dots, n-2.$$

Stejným algoritmem vytvoříme postupně pro $i + k \leq n$ poměrné diference $f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}]$ k-tého řádu pomocí rekurentního vztahu

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, \dots, x_{i+k-1}, x_{i+k}] - f[x_i, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}.$$

Pro výpočet poměrných diferencí pro tabulkou danou funkci f je výhodné použít tabulku poměrných diferencí, sestavenou po řádcích:

x_i	$f(x_i)$	$f[x_i]$	$f[x_i, x_{i+1}]$			
x_0	$f(x_0)$	$f[x_0]$	$-$			
x_1	$f(x_1)$	$f[x_1]$	$f[x_0, x_1]$	$-$		
$\vdots$			$\vdots$	$\ddots$		
x_{n-1}	$f(x_{n-1})$	$f[x_{n-1}]$	$f[x_{n-2}, x_{n-1}]$	$\cdots$	$f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]$	
x_n	$f(x_n)$	$f[x_n]$	$f[x_{n-1}, x_n]$	$\cdots$	$f[x_1, x_2, \dots, x_n]$	$f[x_0, x_1, \dots, x_n]$

Pro koeficienty a_i Newtonova interpolačního polynomu platí

$$a_i = f[x_0, x_1, \dots, x_i], \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Koeficienty Newtonova interpolačního polynomu jsou čísla na diagonále tabulky poměrných diferencí. Newtonův interpolační polynom můžeme tedy psát ve tvaru

$$\begin{aligned} N_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \\ + \cdots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}). \end{aligned}$$

Interpolační polynom zapsaný v Newtonově tvaru má oproti polynomu v Lagrangeově tvaru některé výhody. Jednou z nich je skutečnost, že koeficienty $a_0, a_1, \ldots, n$ (tj. $f[x_0], f[x_0, x_1] \ldots, f[x_0, x_1, \ldots, x_n]$) je možné (pro daná vstupní data) vypočítat užitím algoritmu. Druhou výhodou je skutečnost, že přidáme-li k uzlovým bodům interpolace $x_0, x_1, \ldots, x_n$ další bod x_{n+1} ($x_{n+1} \neq x_i, i = 0, 1, \ldots, n$), v novém interpolačním polynomu N_{n+1} se prvních $n+1$ koeficientů oproti N_n nezmění. Naproti tomu polynom v Lagrangeově tvaru bychom museli začít konstruovat celý znovu.

Příklad.

Sestrojte Newtonův interpolační polynom pro funkci f, spojitou na intervalu $\langle -1, 3 \rangle$, která je zadaná následující tabulkou:

x_i	-1	0	1	2	3
$f(x_i)$	-6	1	4	9	22

Nejprve musíme vypočítat koeficienty a_0, a_1, a_3, a_4. Jejich hodnoty určíme pomocí tabulky poměrných diferencí:

x_i	$f(x_i)$				
-1	-6				
0	1	7			
1	4	3	-2		
2	9	5	1	1	
3	22	13	4	1	0

Je tedy $a_0 = -6, a_1 = 7, a_2 = -2, a_3 = 1, a_4 = 0$.
Odtud dostáváme:

$$N(x) = -6 + 7(x+1) - 2(x+1)x + (x+1)x(x-1) + 0(x+1)x(x-1)(x-2),$$

po úpravě lze psát $N(x) = x^3 - 2x^2 + 4x + 1$.

APROXIMACE METODOU NEJMENŠÍCH ČTVERCŮ

Diskrétní případ

K sestrojení aproximačního polynomu metodou nejmenších čtverců přistupujeme zejména v případech, kdy hodnoty funkce f v uzlových bodech dělení intervalu $\langle a, b \rangle$ byly zjištěny měřením, a jsou tedy zatíženy chybou měření. Bylo by proto nerozumné hledat koeficienty a_i aproximačního polynomu $\Phi(x)$ z požadavku předchozích metod, tedy aby

$$\Phi(x_i) = f(x_i).$$

Stejně tak se metoda nejmenších čtverců užívá v případě, kdy uzlových bodů dělení je větší počet, a tedy aproximační polynom $\Phi(x)$ by byl vysokého stupně (aproximační polynom by byl příliš "rozkmitán").

Mějme funkci f, spojitou na intervalu $\langle a, b\rangle$, danou tabulkou

x_i	x_0	x_1	$\dots$	x_m
y_i	y_0	y_1	$\dots$	y_m

,

kde $x_0, x_1, \dots, x_m$ jsou navzájem různé uzlové body dělení intervalu $\langle a, b\rangle$, $y_i \doteq f(x_i)$.

Označme $\Phi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$ aproximační polynom funkce f.
Sestrojme aritmetické vektory

$$\begin{aligned} u &= (y_0, y_1, \dots, y_m), \\ v &= (\Phi(x_0), \Phi(x_1), \dots, \Phi(x_m)), \quad n \leq m. \end{aligned}$$

Metoda nejmenších čtverců koeficienty $a_0, a_1, \dots, a_n$ hledá z požadavku, aby vzdálenost vektorů u a v, tedy číslo

$$\varrho = \sqrt{\sum_{i=0}^{m} (\Phi(x_i) - y_i)^2},$$

byla minimální.

Sestrojme funkci $\tilde{\varrho} = \varrho^2$. Je zřejmé, že $\tilde{\varrho} = \tilde{\varrho}(a_0, a_1, \dots, a_n)$ je funkcí $n+1$ proměnných, která má spojité parciální derivace, tedy minimum $\tilde{\varrho}$ nastane v bodě, v němž

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\varrho}}{\partial a_0} &= 0, \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}}{\partial a_1} &= 0, \\ &\vdots \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}}{\partial a_n} &= 0. \end{aligned}$$

Obdrželi jsme soustavu $n+1$ rovnic pro $n+1$ neznámých $a_0, a_1, \dots, a_n$. Tato soustava se obvykle přepisuje užitím tzv. diskrétního skalárního součinu funkcí.

Označme g, h funkce spojité na intervalu $\langle a, b\rangle$ a $x_0, x_1, \dots, x_m$ uzlové body dělení intervalu $\langle a, b\rangle$. Číslo (g, h), pro které platí

$$(g, h) = \sum_{i=0}^{m} g(x_i) h(x_i),$$

nazveme diskrétním skalárním součinem funkcí g, h na množině $\{x_0, x_1, \dots, x_m\}$.

Pak pro výpočet koeficientů $a_0, a_1, \ldots, a_n$ máme soustavu tvaru:

$$
\begin{aligned}
(\varphi_0, \varphi_0)a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)a_1 + \cdots + (\varphi_0, \varphi_n)a_n &= (\varphi_0, y) \\
(\varphi_1, \varphi_0)a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)a_1 + \cdots + (\varphi_1, \varphi_n)a_n &= (\varphi_1, y) \\
\vdots \qquad\qquad\qquad & \qquad \vdots \\
(\varphi_n, \varphi_0)a_0 + (\varphi_n, \varphi_1)a_1 + \cdots + (\varphi_n, \varphi_n)a_n &= (\varphi_n, y)\ ,
\end{aligned}
$$

kde $\varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = x, \ldots, \varphi_n(x) = x^n$, $y = (y_0, y_1, \ldots, y_m)$, (φ_i, φ_j) je diskrétní skalární součin funkcí φ_i, φ_j na množině $\{x_0, x_1, \ldots, x_m\}$.

Příklad.

Vypočtěte diskrétní skalární součin funkcí g, h na množině X, kde
a) $g(x) = 1,\ h(x) = 1 + x,\ X = \{1, 2, 3\}$.

$$(g, h) = (1, 1, 1)(2, 3, 4) = 9.$$

b) $g(x) = x,\ h(x) = x^2 + 2,\ X = \{1, 3, 4, 5\}$.

$$(g, h) = (1, 3, 4, 5)(3, 11, 18, 27) = 243.$$

Příklad.

Nalezněte aproximační polynomy prvního, druhého a třetího stupně pro funkci $f(x)$, spojitou na intervalu $\langle -3, 4\rangle$ a zadanou následující tabulkou:

x_i	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
y_i	-22	2	10	8	2	-2	2	20

Nalezněme nejprve aproximační polynom prvního stupně $\Phi(x) = a_0 + a_1x$. Napišme soustavu rovnic, potřebnou pro výpočet koeficientů a_0, a_1:

$$
\begin{aligned}
(\varphi_0, \varphi_0)a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)a_1 &= (\varphi_0, y) \\
(\varphi_1, \varphi_0)a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)a_1 &= (\varphi_1, y).
\end{aligned}
$$

Po vypočtení příslušných diskrétních skalárních součinů a jejich dosazení dostaneme

$$
\begin{aligned}
8a_0 + \ \ 4a_1 &= \ \ 20 \\
4a_0 + 44a_1 &= 136,
\end{aligned}
$$

řešením této soustavy je $(a_0, a_1) = (1, 3)$ a tedy aproximační polynom prvního stupně $\Phi(x) = 1 + 3x$.

Aproximační polynom druhého stupně bude mít tvar $\Phi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$. Příslušná soustava rovnic

$$\begin{aligned}
(\varphi_0, \varphi_0)a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)a_1 + (\varphi_0, \varphi_2)a_2 &= (\varphi_0, y) \\
(\varphi_1, \varphi_0)a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)a_1 + (\varphi_1, \varphi_2)a_2 &= (\varphi_1, y) \\
(\varphi_2, \varphi_0)a_0 + (\varphi_2, \varphi_1)a_1 + (\varphi_2, \varphi_2)a_2 &= (\varphi_2, y)\ ,
\end{aligned}$$

po dosazení

$$\begin{aligned}
8a_0 + \ 4a_1 + \ 44a_2 &= \ 20 \\
4a_0 + 44a_1 + \ 64a_2 &= 136 \\
44a_0 + 64a_1 + 452a_2 &= 152,
\end{aligned}$$

má řešení $a_0 = 3.5$, $a_1 = 3.5$, $a_2 = -0.5$ a tedy

$$\Phi(x) = 3.5 + 3.5x - 0.5x^2.$$

Nakonec nalezneme aproximační polynom třetího stupně, který má tvar $\Phi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$. Soustava normálních rovnic je nyní

$$\begin{aligned}
8a_0 + \ 4a_1 + \ 44a_2 + \ 64a_3 &= \ 20 \\
4a_0 + \ 44a_1 + \ 64a_2 + \ 452a_3 &= 136 \\
44a_0 + \ 64a_1 + \ 452a_2 + 1024a_3 &= 152 \\
64a_0 + 452a_1 + 1024a_2 + 5684a_3 &= 1888
\end{aligned}$$

a má řešení $a_0 = 8$, $a_1 = -5$, $a_2 = -2$, $a_3 = 1$. Odtud

$$\Phi(x) = 8 - 5x - 2x^2 + x^3.$$

Spojitý případ

O aproximaci funkce metodou nejmenších čtverců pro spojitý případ mluvíme tehdy, kdy aproximovaná funkce je, jako funkce spojitá na $\langle a, b\rangle$, zadaná funkčním předpisem. (Známe tedy hodnoty $f(x)$ v každém bodě $x \in \langle a, b\rangle$.) Přitom funkční předpis aproximované funkce není z nějakých důvodů vhodný při dalších výpočtech (např. funkční předpis je příliš složitý atp.).

Označme $f(x)$ spojitou funkci na intervalu $\langle a, b\rangle$ a $\Phi(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$ aproximační polynom. Sestrojme funkci ϱ, zvanou středněkvadratická odchylka, takto:

$$\varrho(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sqrt{\int_a^b (f(x) - \Phi(x))^2 \,\mathrm{d}x}.$$

Koeficienty $a_0, a_1, \dots, a_n$ polynomu $\Phi(x)$ hledáme z požadavku, aby funkce ϱ, eventuelně funkce $\tilde{\varrho} = \varrho^2$, nabývala v bodě $(a_0, a_1, \dots, a_n)$ své nejmenší hodnoty. Je zřejmé, že minimum $\tilde{\varrho}$ nastává v bodě, v němž

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\varrho}}{\partial a_0} &= 0, \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}}{\partial a_1} &= 0, \\ &\vdots \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}}{\partial a_n} &= 0. \end{aligned}$$

Máme tedy soustavu $n+1$ lineárních rovnic pro $n+1$ neznámých $a_0, a_1, \dots, a_n$. Tato soustava, která se nazývá normální soustava rovnic, se obvykle nahrazuje ekvivalentní soustavou, zapsanou užitím skalárního součinu funkcí (v $L_2(a,b)$).

Skalárním součinem funkcí g, h (v $L_2(a,b)$) rozumíme číslo (g,h), kde

$$(g,h) = \int_a^b g(x)h(x)\,\mathrm{d}x.$$

Příklad.

Mějme $g(x) = x+2$, $h(x) = x^2 - 3x$, $\langle a,b\rangle = \langle 0,1\rangle$.
Potom

$$(g,h) = \int_0^1 (x+2)(x^2-3x)\,\mathrm{d}x = \int_0^1 (x^3 - x^2 - 6x)\,\mathrm{d}x = -\frac{37}{12}.$$

Užitím skalárního součinu funkcí lze soustavu normálních rovnic zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} (\varphi_0,\varphi_0)a_0 + (\varphi_0,\varphi_1)a_1 + \dots + (\varphi_0,\varphi_n)a_n &= (\varphi_0, y) \\ (\varphi_1,\varphi_0)a_0 + (\varphi_1,\varphi_1)a_1 + \dots + (\varphi_1,\varphi_n)a_n &= (\varphi_1, y) \\ \vdots \qquad\qquad\qquad\qquad & \quad \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0)a_0 + (\varphi_n,\varphi_1)a_1 + \dots + (\varphi_n,\varphi_n)a_n &= (\varphi_n, y)\ , \end{aligned}$$

kde $\langle \varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\rangle$ je $\langle 1, x, \dots, x^n\rangle$, $y = f(x)$.
Lze ukázat, že determinant soustavy

$$\begin{vmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & \dots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & \dots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{vmatrix}$$

je vždy číslo různé od nuly. To znamená, že soustava má jediné řešení $(a_0, a_1, \dots, a_n)$.

Příklad.

Užitím metody nejmenších čtverců pro spojitý případ aproximujte funkci $f(x) = \pi \sin \pi x$, $x \in \langle 0, 1 \rangle$ aproximačním polynomem druhého stupně.

Napišme soustavu normálních rovnic

$$\begin{aligned}
(\varphi_0, \varphi_0)a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)a_1 + (\varphi_0, \varphi_2)a_2 &= (\varphi_0, y) \\
(\varphi_1, \varphi_0)a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)a_1 + (\varphi_1, \varphi_2)a_2 &= (\varphi_1, y) \\
(\varphi_2, \varphi_0)a_0 + (\varphi_2, \varphi_1)a_1 + (\varphi_2, \varphi_2)a_2 &= (\varphi_2, y) \ .
\end{aligned}$$

Vypočítejme potřebné skalární součiny

$$\begin{aligned}
(\varphi_0, \varphi_0) &= \int_0^1 1 \cdot 1 \,\mathrm{d}x = 1 \\
(\varphi_0, \varphi_1) &= \int_0^1 1 \cdot x \,\mathrm{d}x = \frac{1}{2} \\
(\varphi_0, \varphi_2) &= \int_0^1 1 \cdot x^2 \,\mathrm{d}x = \frac{1}{3} \\
(\varphi_1, \varphi_1) &= \int_0^1 x \cdot x \,\mathrm{d}x = \frac{1}{3} \\
(\varphi_1, \varphi_2) &= \int_0^1 x \cdot x^2 \,\mathrm{d}x = \frac{1}{4} \\
(\varphi_2, \varphi_2) &= \int_0^1 x^2 \cdot x^2 \,\mathrm{d}x = \frac{1}{5} \\
(f, \varphi_0) &= \int_0^1 1 \cdot \pi \sin \pi x \,\mathrm{d}x = 2 \\
(f, \varphi_1) &= \int_0^1 x \cdot \pi \sin \pi x \,\mathrm{d}x = 1 \\
(f, \varphi_2) &= \int_0^1 x^2 \cdot \pi \sin \pi x \,\mathrm{d}x = 1 - \frac{4}{\pi^2}.
\end{aligned}$$

Soustava normálních rovnic

$$\begin{aligned}
a_0 + \frac{1}{2}a_1 + \frac{1}{3}a_2 &= 2 \\
\frac{1}{2}a_0 + \frac{1}{3}a_1 + \frac{1}{4}a_2 &= 1 \\
\frac{1}{3}a_0 + \frac{1}{4}a_1 + \frac{1}{5}a_2 &= 1 - \frac{4}{\pi^2}
\end{aligned}$$

má jediné řešení $(a_0, a_1, a_2) = (12 - \frac{120}{\pi^2}, -60 + \frac{720}{\pi^2}, 60 - \frac{720}{\pi^2})$. Aproximační polynom druhého stupně

$$\Phi(x) = 12 - \frac{120}{\pi^2} + (-60 + \frac{720}{\pi^2})x + (60 - \frac{720}{\pi^2})x^2.$$

Příklady k procvičení:

(1) Sestrojte Lagrangeův interpolační polynom pro funkci danou následující tabulkou:

x_i	-1	0	1	3
$f(x_i)$	6	1	0	10

.

[Výsledek: $\Phi(x) = 1 - 3x + 2x^2$.]

(2) Sestrojte interpolační polynom pro funkci danou následující tabulkou (užijte přímý výpočet a ověřte výsledek konstrukcí Lagrangeova interpolačního polynomu):

x_i	0	1	2
$f(x_i)$	1	0	-3

.

[Výsledek: $\Phi(x) = 1 - x^2$.]

(3) Sestrojte interpolační polynom pro funkci danou následující tabulkou (užijte Newtonův interpolační polynom a ověřte výsledek konstrukcí Lagrangeova interpolačního polynomu):

x_i	1	2	3
$f(x_i)$	0	0	2

.

[Výsledek: $\Phi(x) = 2 - 3x + x^2$.]

(4) Sestrojte Newtonův interpolační polynom pro funkci danou následující tabulkou:

x_i	-1	1	2	3
$f(x_i)$	8	-4	-4	8

.

[Výsledek: $\Phi(x) = 2 - 7x + x^3$.]

(5) Sestrojte Newtonův interpolační polynom pro funkci danou následující tabulkou:

x_i	-2	-1	0	1	2
$f(x_i)$	28	9	8	7	12

.

[Výsledek: $\Phi(x) = 8 - x^2 - x^3 + x^4$.]

(6) Metodou nejmenších čtverců sestrojte aproximační polynom 3. stupně pro funkci danou následující tabulkou:

x_i	-1	-0.5	0	0.5	1
$f(x_i)$	0	-1	0	1	0

.

[Výsledek: $\Phi(x) = \frac{8}{3}x - \frac{8}{3}x^3$.]

(7) Metodou nejmenších čtverců sestrojte aproximační polynomy 1. a 2.stupně pro funkci danou následující tabulkou (užijte program Mathematica):

x_i	-3	-2	-1	0	3	4
$f(x_i)$	-10	-1	2	3	0	-1

[Výsledky: $\Phi_1(x) = -0.699x - 1.283,\ \Phi_2(x) = -0.797x^2 + 1.695x + 3.734$.]

(8) Užitím metody nejmenších čtverců pro spojitý případ aproximujte funkci $f(x) = \sqrt{x}$, $x \in \langle 0, 1\rangle$ aproximačním polynomem prvního stupně.
[Výsledek: $\Phi(x) = \frac{4}{15} + \frac{12}{15}x$.]

Literatura:

[1] Přikryl Petr, *Numerické metody matematické analýzy*, SNTL, Praha, 1988.
[2] Vitásek Emil, *Numerické metody*, SNTL, Praha, 1987.