Numerické metody a statistika

Radek Kučera

VŠB-TU Ostrava

2016-2017

Interpolace a aproximace

Jsou předepsány body (x_i, f_i) pro $i = 0, 1, \ldots, n$ (uzly, fuknční hodnoty).

Interpolační úloha

Hledáme funkci φ vhodného typu tak, aby platilo:

$$\varphi(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

Aproximační úloha

Hledáme funkci φ vhodného typu tak, aby platilo:

$$\varphi(x_i) \approx f_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

- polynom
- splajn (spline-funkce) – počástech polynom
- kombinace obecných funkcí

Interpolační polynom

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$$

Dosazením $\varphi(x) = p_n(x)$ do interpolačních rovností dostaneme soustavu lineárních rovnic:

$$a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \cdots + a_n x_i^n = f_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

nebo-li

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \ldots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \ldots \\ f_n \end{pmatrix}$$

Příklad: $x_i : \; -2, -1, 1, 2; \quad f_i : \; 10, 4, 6, 3$

$p_3(x) = 4.5 + 1.917x + 0.5x^2 - 0.917x^3$

Věta

Pro vzájemně různé uzly x_i a funkční hodnoty f_i, $i = 0, 1, \ldots, n$ existuje jediný interpolační polynom stupně nejvýše n.

Důkaz: Determinant matice soustavy (Vandermonde) je nenulový.

Výhody a nevýhody postupu

- snadná analýza
- potřebujem řešit soustavu, matice je špatně podmíněna

Lagrangeův tvar interpolačního polynomu

Polynom sestavujeme v následujícím tvaru:

$$p_n(x) = f_0 l_0(x) + f_1 l_1(x) + \cdots + f_n l_n(x),$$

kde $l_i(x)$, $i = 0, 1, \ldots, n$ je Lagrangeova báze interpolační úlohy.

- $l_i(x)$ je polynom stupně nejvýše n
- $l_i(x_i) = 1$
- $l_i(x_j) = 0$, $i \neq j$

Vzorec:

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

Příklad

Pro naše data dostaneme:

$$
\begin{aligned}
p_3(x) \quad = \quad & -\frac{5}{6}(x+1)(x-1)(x-2) + \frac{2}{3}(x+2)(x-1)(x-2) - \\
& -(x+2)(x+1)(x-2) + \frac{1}{4}(x+2)(x+1)(x-1)
\end{aligned}
$$

Výhody a nevýhody

- při sestavení není třeba řešit soustavu
- poměrně složitý zápis výsledku

Newtonův tvar interpolačního polynomu

Polynom hledáme v následujícím tvaru:

$$p_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-$$

Dosazením do interpolačních rovností dostaneme soustavu lineárních rovnic:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots \\ 1 & x_1 - x_0 & 0 & \ldots \\ 1 & x_2 - x_0 & (x_2-x_0)(x_2-x_1) & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \ldots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \ldots \end{pmatrix}$$

a odtud

$$a_0 = f_0, \quad a_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}, \quad a_2 = \frac{\frac{f_2-f_1}{x_2-x_1} - \frac{f_1-f_0}{x_1-x_0}}{x_2 - x_0}, \quad \text{atd.}$$

Definice

Nechť x_i jsou vzájemně různé uzly a f_i odpovídající funkční hodnoty, $i = 0, 1, \ldots, n$. Poměrnou diferenci k-tého řádu definujeme rekurentně takto:

$$
\begin{aligned}
k = 0: \quad & f[x_i] &= f_i \\
k = 1: \quad & f[x_i, x_{i+1}] &= \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i} \\
k \leq n: \quad & f[x_i, \ldots, x_{i+k}] &= \frac{f[x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}] - f[x_i, \ldots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}
\end{aligned}
$$

Finální podoba Newtonova interpolačního polynomu:

$$
\begin{aligned}
p_n(x) = \; & f_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \ldots \\
& \cdots + f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0) \ldots (x - x_{n-1})
\end{aligned}
$$

Příklad

Vypočítáme poměrné diference a dostaneme:

$$p_3(x) \quad = \quad 10 - 6(x+2) + \frac{7}{3}(x+2)(x+1) - \frac{11}{12}(x+2)(x+1)(x-1)$$

Výhody a nevýhody

- relativně snadné sestavení
- relativně jednoduchý výsledný tvar
- postup je adaptivní, stavebnice

Interpolační chyba

- nechť $f_i = f(x_i)$, kde f je funkce na $\langle a, b\rangle$ a $x_i \in \langle a, b\rangle$
- interpolační chyba pro interpolační polynom p_n je rozdíl:

$$f(x) - p_n(x)$$

- $f(x_i) - p_n(x_i) = 0$

Věta (o interpolační chybě)

Nechť uzly x_i jsou vzájemně různé a nechť funkce f má $n+1$ spojitých derivací na $\langle a, b\rangle$. Pro každé $x \in \langle a, b\rangle$ existuje $\xi \in (a, b)$ tak, že platí:

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x),$$

kde $\pi_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)$.

Důkaz: pro $x \neq x_i$ definujme funkci

$$g(t) = f(t) - p_n(t) - \frac{\pi_{n+1}(t)}{\pi_{n+1}(x)}\,(f(x) - p_n(x))$$

Pozorování:

- $g(t)$ má aspoň $n+2$ kořenů
- $g'(t)$ má aspoň $n+1$ kořenů
- atd.
- $g^{(n+1)}(t)$ má aspoň jeden kořen, $\xi \in (a, b)$:

$$0 = g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - 0 - \frac{(n+1)!}{\pi_{n+1}(x)}\,(f(x) - p_n(x))$$

Odtud plyne tvrzení.

Poznámky

- tvar polynomu $\pi_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)$ určuje jak vypadá rozložení interpolační chyby
- Rungeho příklad:

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, \quad x \in \langle -5, 5 \rangle, \quad x_i : -5, -4, \dots, 4, 5$$

Interpolační splajn

- počástech polynom nízkého stupně (třetího) – odstraňuje oscilace
- polynomické části jsou navázány ”hladce” (spojité derivace)
- Hermitovský kubický splajn (první derivace je spojitá, interpoluje funkční hodnoty a hodnoty derivací)
- kubický splajn (i druhá derivace je spojitá, interpoluje funkční hodnoty)
- splajny s napětím — umožňuje řídit tvar interpolační funkce

Aproximace metodou nejmenších čtverců

- hledáme φ: $\quad \varphi(x_i) \approx f_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n$
- minimalizujeme celkovou kvadratickou odchylku:

$$\sum_{i=0}^{n} (\varphi(x_i) - f_i)^2 \to Min!$$

Příklad (lineární regrese)

$$\varphi(x) = c_1 + c_2 x \;\Rightarrow\; \sum_{i=0}^{n} (c_1 + c_2 x_i - f_i)^2 = \Psi(c_1, c_2) \to Min!$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial c_1} &= 2 \sum_{i=0}^{n} (c_1 + c_2 x_i - f_i) = 0 \\ \frac{\partial \Psi}{\partial c_2} &= 2 \sum_{i=0}^{n} (c_1 + c_2 x_i - f_i) x_i = 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{SLR pro } c_1, c_2$$

Obecný postup

$$\varphi(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) + \cdots + c_m\varphi_m(x) = \sum_{j=1}^{m} c_j\varphi_j(x)$$

- φ_j, $j = 1, \ldots, m$ je daný systém funkcí, $m \leq n$
- funkce φ_j musí být lineárně nezávislé
- dosadíme:

$$\sum_{i=0}^{n}\left(\sum_{j=1}^{m} c_j\varphi_j(x_i) - f_i\right)^2 = \Psi(c_1, \ldots, c_m) \to Min!$$

- derivujeme a hledáme stacionární bod:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial c_k} = 2\sum_{i=0}^{n}\left(\sum_{j=1}^{m} c_j\varphi_j(x_i) - f_i\right)\varphi_k(x_i) = 0$$

Obecný postup

- dostáváme soustavu normálních rovnic:

$$\sum_{j=1}^{m}\left(\sum_{i=0}^{n}\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\right)c_j=\sum_{i=0}^{n}f_i\varphi_k(x_i),\quad k=1,\ldots,m$$

Věta

Nechť x_i, f_i, $i=0,1,\ldots,n$, jsou vzájemně různé uzly a funkční hodnoty. Nechť φ_j, $j=1,2,\ldots,m$ je systém lineárně nezávislých funkcí. Pak existuje jediná funkce φ, která aproximuje daná data podle metody nejmenších čtverců a její koeficienty c_j jsou řešením lineární soustavy normálních rovnic.

Důkaz: Zbývá dokázat, že řešení soustavy normálních rovnic určuje minimum. K tomu stačí ukázat, že matice druhých derivací je pozitivně definitní ($\boldsymbol{d}^\top \boldsymbol{A}\boldsymbol{d}>0$ pro $\boldsymbol{d}\neq\mathbf{0}$).

$$\boldsymbol{A} = (a_{kj}), \quad a_{kj} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial c_k \partial c_j} = 2 \sum_{i=0}^{n} \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i)$$

$$\boldsymbol{d}^\top \boldsymbol{A} \boldsymbol{d} = 2 \sum_{k=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=0}^{n} d_k d_j \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i) = 2 \sum_{i=0}^{n} \tilde{\varphi}(x_i)^2 \geq 0,$$

kde $\tilde{\varphi}(x) = \sum_{j=1}^{m} d_j \varphi_j(x)$. Rovnost nule může nastat jen v případě všech nulových sčítanců $\tilde{\varphi}(x_i)^2$, což je ale vyloučeno, protože uvažujeme lineárně nazávislé funkce φ_j.

Příklady

Určete soustavu normálních rovnic v následujících případech:

- konstantní funkce
- lineární funkce (regresní přímka)
- kvadratická funkce (regresní parabola)
- funkce tvaru: $\varphi(x) = c_1 e^{-x} + c_2 \sin x$

Souhrn

- úloha na interpolaci a aproximaci
- tvary interpolačního polynomu
- interpolační splajn (vlastnosti)
- metoda nejmenších čtverců

Zdroj

- skripta Numerické metody
- str. 92–112