Katedra aplikovanej matematiky, Strojnícka fakulta, UNIZA

UNIZA

Interpolácia funkcie & aproximácia funkcie metódou najmenších štvorcov

Pavol ORŠANSKÝ

12. októbra 2023

Interpolácia

Hlavnou ideou interpolácie je nájsť funkciu (v našom prípade polynóm) $P_n(x)$, ktorá/ý sa bude zhodovať s funkciou $f(x)$ v $n+1$ rôznych uzlových bodoch x_i, t. j. platí

$$P_n(x) = f(x_i) = f_i = y_i \qquad \text{pre } i = 0, 1, \ldots n.$$

Niekedy sa naviac vyžaduje aj rovnosť derivácii do istého rádu, napr. pri tzv. Hermitovej aproximácii sa vyžaduje zhoda prvých derivácii v uzlových bodoch.

Veta

Pre každú $(n+1)$-ticu funkčných hodnôt $y_0, y_1, \ldots y_n$ a $x_i \neq x_j$ pre $i \neq j$, existuje práve jeden algebraický polynóm n-tého stupňa

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n \tag{1}$$

taký, že preň platí (teda, že týmito bodmi prechádza)

$$P_n(x_i) = y_i, \qquad i = 0, 1, \ldots, n. \tag{2}$$

Dôkaz.
Priamym dosadením do (2) dostávame sústavu $(n+1)$ rovníc o $(n+1)$ neznámych

$$\begin{aligned} y_0 &= P_n(x_0) = a_0 + a_1 x_0 + \ldots + a_n x_0^n, \\ y_1 &= P_n(x_1) = a_0 + a_1 x_1 + \ldots + a_n x_1^n, \\ &\ldots \\ y_n &= P_n(x_n) = a_0 + a_1 x_n + \ldots + a_n x_n^n, \end{aligned}$$

ktorej riešením sú koeficienty $a_0, a_1, \ldots, a_n$ polynómu (1). Táto má riešenie vždy, nakoľko determinant tzv. **Vandermontovej matice** je vždy nenulový

$$V = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \ldots & x_1^n \\ 1 & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^n \end{pmatrix}.$$

Lagrangeova interpolácia

Lagrangeov interpolačný polynóm $L_n(x)$ zostrojíme lineárnou kombináciou funkčných hodnôt y_i a tzv. elementárnych Lagrangeových interpolačných polynómov $l_{n,i}(x)$

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot l_{n,i}(x),$$

kde elementárne Lagrangeové interpolačné polynómy sú

$$l_{n,i}(x) = \frac{(x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{i-1}) \cdot (x - x_{i+1}) \cdot \ldots \cdot (x - x_n)}{(x_i - x_0) \cdot (x_i - x_1) \cdot \ldots \cdot (x_i - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i+1}) \cdot \ldots \cdot (x_i - x_n)},$$

a teda sú vo všetkých uzlových bodoch, okrem i-tého, rovné nule t. j. platí

$$l_{n,i}(x) = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j. \end{cases}$$

Príklad (1.a)

Nájdite Lagrangeov interpolačný polynóm pre uzlové body funkcie dané tabuľkou:

x_i :	-2	0	2	4	6
$y_i = f(x_i)$:	2	1	-1	2	4

Nultý elementárny Lagrangeov interpolačný polynóm je

$$\begin{aligned} l_{4,0}(x) &= \frac{(x-0)\cdot(x-2)\cdot(x-4)\cdot(x-6)}{(-2-0)\cdot(-2-2)\cdot(-2-4)\cdot(-2-6)} \\ &= \frac{1}{384}x\,(x-2)\,(x-4)\,(x-6) \\ &= \frac{1}{384}x^4 - \frac{1}{32}x^3 + \frac{11}{96}x^2 - \frac{1}{8}x, \end{aligned}$$

Lagrangeova interpolácia

Príklad (1.b)

Nájdite Lagrangeov interpolačný polynóm pre uzlové body funkcie dané tabuľkou:

x_i :	-2	0	2	4	6
$y_i = f(x_i)$:	2	1	-1	2	4

prvý elementárny Lagrangeov interpolačný polynóm je

$$
\begin{aligned}
l_{4,1}(x) &= \frac{(x+2)\cdot(x-2)\cdot(x-4)\cdot(x-6)}{(0+2)\cdot(0-2)\cdot(0-4)\cdot(0-6)} \\
&= -\frac{1}{96}(x-2)(x+2)(x-4)(x-6) \\
&= \frac{5}{48}x^3 - \frac{1}{96}x^4 - \frac{5}{24}x^2 - \frac{5}{12}x + 1,
\end{aligned}
$$

Príklad (1.c)

Nájdite Lagrangeov interpolačný polynóm pre uzlové body funkcie dané tabuľkou:

x_i :	-2	0	2	4	6
$y_i = f(x_i)$:	2	1	-1	2	4

druhý elementárny Lagrangeov interpolačný polynóm je

$$
\begin{aligned}
l_{4,2}(x) &= \frac{(x+2)\cdot(x-0)\cdot(x-4)\cdot(x-6)}{(2+2)\cdot(2-0)\cdot(2-4)\cdot(2-6)} \\
&= \frac{1}{64}x\,(x+2)\,(x-4)\,(x-6) \\
&= \frac{1}{64}x^4 - \frac{1}{8}x^3 + \frac{1}{16}x^2 + \frac{3}{4}x
\end{aligned}
$$

Príklad (1.d)

Nájdite Lagrangeov interpolačný polynóm pre uzlové body funkcie dané tabuľkou:

x_i :	-2	0	2	4	6
$y_i = f(x_i)$:	2	1	-1	2	4

tretí elementárny Lagrangeov interpolačný polynóm je

$$\begin{aligned} l_{4,3}(x) &= \frac{(x+2)\cdot(x-0)\cdot(x-2)\cdot(x-6)}{(4+2)\cdot(4-0)\cdot(4-2)\cdot(4-6)} \\ &= -\frac{1}{96}x\,(x-2)\,(x+2)\,(x-6) \\ &= \frac{1}{16}x^3 - \frac{1}{96}x^4 + \frac{1}{24}x^2 - \frac{1}{4}x, \end{aligned}$$

Príklad (1.e)

Nájdite Lagrangeov interpolačný polynóm pre uzlové body funkcie dané tabuľkou:

x_i :	-2	0	2	4	6
$y_i = f(x_i)$:	2	1	-1	2	4

štvrtý elementárny Lagrangeov interpolačný polynóm je

$$\begin{aligned} l_{4,4}(x) &= \frac{(x+2)\cdot(x-0)\cdot(x-2)\cdot(x-4)}{(6+2)\cdot(6-0)\cdot(6-2)\cdot(6-4)} \\ &= \frac{1}{384}x\,(x-2)\,(x+2)\,(x-4) \\ &= \frac{1}{384}x^4 - \frac{1}{96}x^3 - \frac{1}{96}x^2 + \frac{1}{24}x. \end{aligned}$$

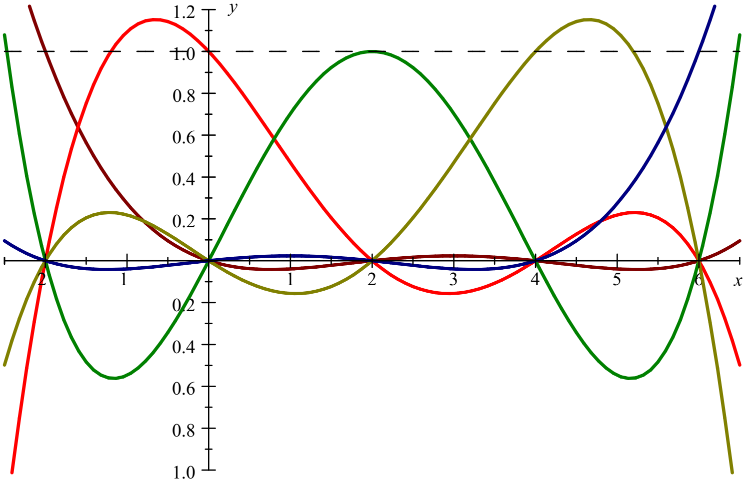
Lagrangeova interpolácia

Príklad (1.f)

Celkovo Lagrangeov interpolačný polynóm $L_4(x)$ získame prenásobením elementárnych Lagrangeových polynómov $l_{4,i}(x)$ funkčnými hodnotami $y_i = f(x_i)$, čiže

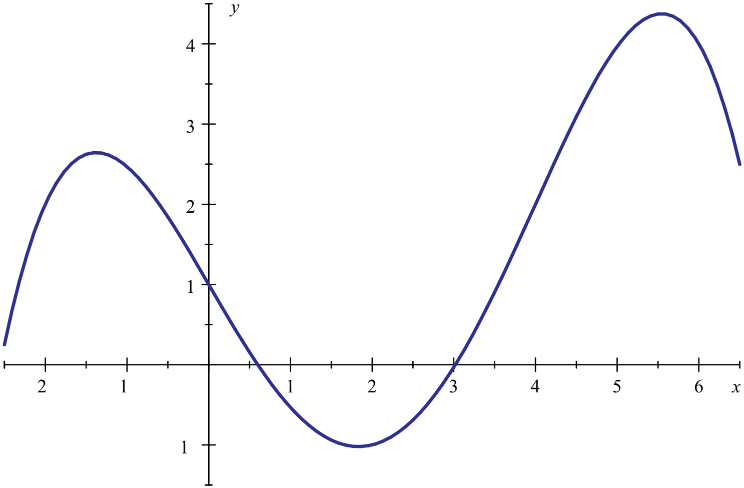
$$\begin{aligned}
L_4(x) &= 2 \cdot \frac{(x-0)(x-2)(x-4)(x-6)}{384} + 1 \cdot \frac{(x+2)(x-2)(x-4)(x-6)}{-96} \\
&\quad + (-1) \cdot \frac{(x+2)\,x\,(x-4)(x-6)}{64} + 2 \cdot \frac{(x+2)\,x\,(x-2)(x-6)}{-96} \\
&\quad + 4 \cdot \frac{(x+2)\,x\,(x-2)(x-4)}{384} \\
&= -\frac{1}{32}x^4 + \frac{1}{4}x^3 - \frac{7}{4}x + 1.
\end{aligned}$$

Lagrangeova interpolácia



Obr.: elementárne Lagrangeove polynómy $l_{4,i}(x)$.

Lagrangeova interpolácia



Obr.: Lagrangeove polynómy $L_4(x) = -\frac{1}{32}x^4 + \frac{1}{4}x^3 - \frac{7}{4}x + 1$

Newtonova interpolácia

Ďalším interpolačným polynómom Newtonov interpolačný polynóm.

Pomocou Newtonovej interpolácie nájdeme opäť ten istý polynóm ako Lagrangeovou interpoláciou, čo je zrejmé, nakoľko, ako hovorí predošlá veta, tento polynóm je jediný.

Rozdielny je ale spôsob jeho odvodenia. Newtonova metóda nevytvára celý polynóm naraz, ale postupne zahrňa viacej bodov do interpolacie a tak konštruuje polynómy vyššieho stupňa.

Newtonova interpolácia

Najskôr zavedieme pojem pomernej diferencie.
Pomerná diferencia prvého rádu je definovaná vzťahom

$$f[x_1, x_0] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Čo je akýsi odhad prvej derivácie pomocou jej funkčných hodnôt. Obdobne definujeme aj jej druhú pomernú diferenciu, pomocou pomerných diferencií nižšieho rádu

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{f[x_2, x_1] - f[x_1, x_0]}{x_2 - x_0}.$$

A všeobecne aj jej n-tú pomernú diferenciu pomocou pomerných diferencií $n-1$ rádu

$$f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_0] = \frac{f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1] - f[x_{n-1}, \dots, x_1, x_0]}{x_n - x_0}.$$

Newtonova interpolácia

Newtonova metóda začína s konštantnou interpoláciou jedným bodom

$$N_0(x) = f(x_0).$$

Pridaním ďalšieho bodu dostávame lineárnu interpoláciu

$$N_1(x) = f(x_0) + (x - x_0) \cdot f[x_1, x_0].$$

Ak by sme pridali ďalší bod dostávame kvadratickú interpoláciu, a pre ďalší bod obdobne, etc. až po n-tú interpoláciu

$$\begin{aligned} N_2(x) &= f(x_0) + (x - x_0) \cdot f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1) \cdot f[x_2; x_1; x_0], \\ &\vdots \\ N_n(x) &= f(x_0) + (x - x_0) \cdot f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1) \cdot f[x_2; x_1; x_0] \\ &\quad + \ldots + (x - x_0)(x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}) \cdot f[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_0]. \end{aligned}$$

Výhodou Newtonovho interpolačného polynómu je, že pridávaním daľších členov môžeme zvyšovať presnosť interpolácie, pričom body x_i ani nemusia byť zoradené.

Príklad (2.a)

Nájdite Newtonov interpolačný polynóm pre uzlové body funkcie dané tabuľkou:

x_i :	-2	0	2	4	6
$y_i = f(x_i)$:	2	1	-1	2	4

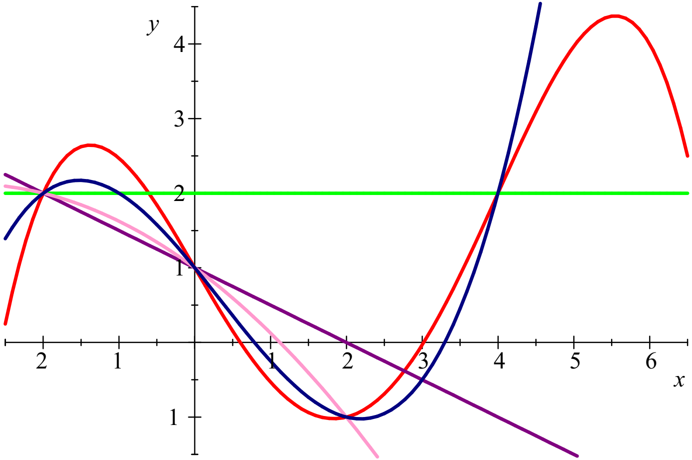
Riešenie budeme zapisovať do nasledujúcej tabuľky

i	x_i	$f(x_i)$	$f[x_{i+1}, x_i]$	$f[x_{i+2}, x_{i+1}, x_i]$	$f[x_{i+3}, \ldots, x_i]$	$f[x_{i+4}, \ldots, x_i]$
0	-2	2	$\frac{1-2}{0-(-2)} = -\frac{1}{2}$	$\frac{-1-\left(-\frac{1}{2}\right)}{2-(-2)} = -\frac{1}{8}$	$\frac{\frac{5}{8}-\left(-\frac{1}{8}\right)}{4-(-2)} = \frac{1}{8}$	$\frac{-\frac{1}{8}-\frac{1}{8}}{6-(-2)} = -\frac{1}{32}$
1	0	1	$\frac{-1-1}{2-0} = -1$	$\frac{\frac{3}{2}-(-1)}{4-0} = \frac{5}{8}$	$\frac{-\frac{1}{8}-\frac{5}{8}}{6-0} = -\frac{1}{8}$	
2	2	-1	$\frac{2-(-1)}{4-2} = \frac{3}{2}$	$\frac{1-\frac{3}{2}}{6-2} = -\frac{1}{8}$		
3	4	2	$\frac{4-2}{6-4} = 1$			
4	6	4				

Newtonova interpolácia

Hodnoty prvých pomerných diferencií príslušných rádov použijeme na určenie Newtonovho interpolačného polynómu

$$\begin{aligned} N_4(x) &= 2 + (x+2)\cdot\left(-\frac{1}{2}\right) + (x+2)(x-0)\cdot\left(-\frac{1}{8}\right) \\ &\quad +(x+2)(x-0)(x-2)\cdot\frac{1}{8} \\ &\quad +(x+2)(x-0)(x-2)(x-4)\cdot\left(-\frac{1}{32}\right) \\ &= -\frac{1}{32}x^4 + \frac{1}{4}x^3 - \frac{7}{4}x + 1. \end{aligned}$$



Obr.: Postupné pridávanie jednotlivých sčítancov Newtonovho interpolačného polynómu

Newtonova interpolácia pre ekvidištantné uzly

Poznámka

Predošlé príklady mali uzlové body rozmiestnené v rovnakých vzdialenostiach, tzn. ekvidištantne. Nebolo to požiadavkou, t. j. oba polynómy nevyžadujú aby boli uzlové body takto rozmiestnené.
Ak sú však uzlové body rozmiestnené ekvidištantne, t. j. platí

$$x_{i+1} - x_i = h = \mathrm{const.},$$

môžeme Newtonov interpolačný polynóm modifikovať, a to nasledujúcim spôsobom.

Newtonova interpolácia pre ekvidištantné uzly

Namiesto pomernej diferencie budeme požívať jednoduchú diferenciu.
Diferencia prvého rádu bude

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$$

a diferencia vyššieho rádu je

$$\Delta^k f(x) = \Delta^{k-1} f(x+h) - \Delta^{k-1} f(x),$$

kde $h = x_{i+1} - x_i$ je zrejme „krok", t. j. vzdialenosť medzi jednotlivými uzlami.
Skrátene píšeme

$$\Delta f_i = f(x_i + h) - f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_i) = f_{i+1} - f_i,$$

$$\Delta^k f_i = \Delta^{k+1} f_{i+1} - \Delta^{k-1} f_i.$$

Newtonova interpolácia pre ekvidištantné uzly

Diferencie môžeme teraz zrejme vyjadriť ako

$$f\left[x_{i+1}, x_i\right] = \frac{\Delta f_i}{h}.$$

Diferencia druhého rádu je zrejme

$$f\left[x_{i+2}, x_{i+1}, x_i\right] = \frac{\frac{\Delta f_{i+1}}{h} - \frac{\Delta f_i}{h}}{2h} = \frac{\Delta^2 f_i}{2h^2}.$$

Matematickou indukciou dostávame vzťah pre diferenciu k-tého rádu

$$f\left[x_{i+k}, \ldots, x_i\right] = \frac{\Delta^k f_i}{k!h^k}.$$

Newtonov interpolačný polynóm pre ekvidištantné uzly má teda tvar

$$\begin{aligned} N_n(x) \quad = \quad & f_0 + (x - x_0) \cdot \frac{\Delta f_i}{h} + (x - x_0)(x - x_1) \cdot \frac{\Delta^2 f_i}{2h^2} + \ldots \\ & \ldots + (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_n) \cdot \frac{\Delta^k f_i}{k!h^k}. \end{aligned}$$

Newtonova interpolácia odhad chyby

Pre použitie interpolačných polynómov je dôležité poznať aspoň mieru chyby, ktorej sme sa pri interpolácii dopustili, preto je opodstatnené si túto chybu nejakým spôsobom vymedziť.

Veta

Nech interval I je interval obsahujúci všetky uzlové body x_i, $i = 0, 1, \ldots, n$, určujúce interpolačný polynóm $P_n(x)$ a nech funkcia $f(x)$ je $(n+1)$-krát diferencovateľná na tomto intervale.
Potom pre ľubovoľné $x \in I$ existuje také $\xi \in I$, že pre chybu interpolácie platí

$$\varepsilon(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n). \tag{3}$$

Newtonova interpolácia odhad chyby

Poznámka

Použitie predošlého odhadu je v praxi dosť náročné, keďže hodnota ξ je pre každý bod x z intervalu I iná. Preto chybu ohraničíme aspoň zhora.

Veta

Označme $M_{n+1} = \max_{t\in I} \left| f^{(n+1)}(t) \right|$, potom pre horné ohraničenie chyby platí

$$|\varepsilon(x)| = |f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n).$$

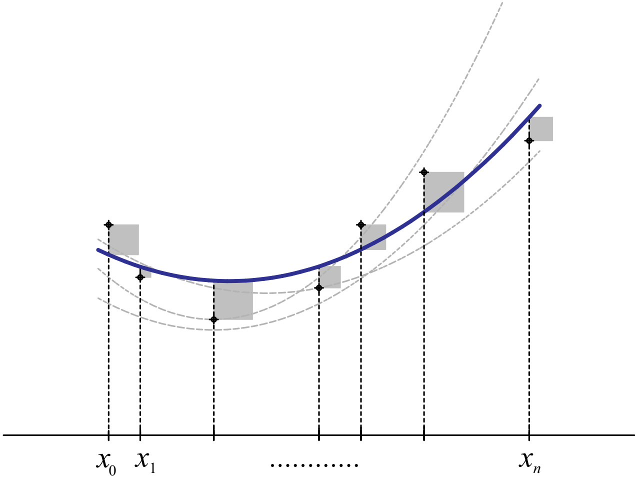
Aproximácia metódou najmenších štvorcov

Aproximáciou funkcie budeme mať na mysli nahradenie funkcie inou funkciou, ktorej „vzdialenosť“ od pôvodnej funkcie je minimálna.

Abstraktnosť pojmu „minimálna vzdialenosť dvoch funkcií” nahradíme požiadavkou, aby odchýlky od pôvodnej funkcie boli celkovo (!) minimálne. V istom zmysle môžeme hovoriť aj o akomsi „priblížení”.

Vo všeobecnej praxi často ani nie je nutné, aby nami hľadaná krivka prechádzala všetkými bodmi pôvodnej funkcie, nakoľko sa často jedná o hodnoty funkcie poznačené či už chybou merania, alebo inak znehodnotené, a teda hľadaná krivka má do istej miery iba vystihovať charakter hodnôt (funkcie).

Aproximácia metódou najmenších štvorcov



Obr.: Vizualizácia aproximácie metódou najmenších štvorcov.

Aproximácia metódou najmenších štvorcov

Máme dané dvojice bodov (x_i, y_i), $i = 0, 1, \dots, n$. Hľadáme teda polynóm m-tého stupňa tvaru

$$p_m(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_m x^m = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j.$$

Poznámka

Tu by sme sa chceli pozastaviť a zdôrazniť, že stupeň polynómu m je väčšinou podstatne menší ako počet bodov n (t. j. $m \ll n$), ktorými tento polynóm prekladáme. Ak by bol počet bodov rovnaký ako stupeň polynómu išlo by zrejme o interpoláciu, t. j. tvoma bodmi preložím a „najlepšie"polynóm druhého stupňa (parabolou) tak, že bude týmito bodmi prechádzať.

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - polynomická

Požadujeme, aby suma odchýlok nášho polynómu od daných hodnôt (danej funkcie) bola minimálna, t. j.

$$E = \sum_{i=0}^{n} \epsilon_i = \sum_{i=0}^{n} |p_m(x_i) - y_i| \to \min .$$

Nakoľko absolútnu hodnotu nevieme derivovať nahradíme ju druhou mocninou rozdielu, ktorá má veľmi podobné vlastnosti (t. j., je kladná a definuje mieru rozdielu hodnôt)

$$E = \sum_{i=0}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=0}^{n} (p_m(x_i) - y_i)^2 \to \min .$$

Dosadíme nami hľadaný polynóm, t. j. $p_m(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j$

$$E = \sum_{i=0}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{m} \left(a_j x_i^j - y_i \right)^2 .$$

Táto suma je funkciou koeficientov hľadaného polynómu $a_0, a_1, a_2, \ldots, a_m$.

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - polynomická

Minimálna bude táto suma v prípade, že bude prvá derivácia rovná nule

$$\frac{\partial E}{\partial a_k}.$$

Upravíme

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial a_k} &= \frac{\partial}{\partial a_k}\left(\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{m}\left(a_j x_i^j - y_i\right)^2\right) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{m}\frac{\partial}{\partial a_k}\left(a_j x_i^j - y_i\right)^2 \\
&= \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{m} 2\left(a_j x_i^j - y_i\right)\cdot\frac{\partial}{\partial a_k}\left(a_j x_i^j - y_i\right) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{m} 2\left(a_j x_i^j - y_i\right)\cdot x_i^k \\
&= 2\sum_{j=0}^{m}\sum_{i=0}^{n}\left(a_j x_i^{j+k} - y_i x_i^k\right) = 2\left(\sum_{j=0}^{m} a_j \sum_{i=0}^{n} x_i^{j+k} - \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^k\right) = 0
\end{aligned}$$

a dostávame sústavu

$$
\begin{aligned}
a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i^0 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^1 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + \ldots + a_m \sum_{i=0}^{n} x_i^m &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^0, \\
a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i^1 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^3 + \ldots + a_m \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^1, \\
a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^3 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^4 + \ldots + a_m \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2} &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^2, \\
&\vdots \\
a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i^m + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2} + \ldots + a_m \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+m} &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^m,
\end{aligned}
$$

kde zrejme $\sum_{i=0}^{n} x_i^0 = \sum_{i=0}^{n} 1 = n + 1$.

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - polynomická

Označíme

$$S_k = \sum_{i=0}^{n} x_i^k, \qquad T_k = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^k,$$

a dostávame

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \cdot S_{j+k} - T_k = 0.$$

Čo je systém lineárnych rovníc

$$\begin{aligned}
S_0 \cdot a_0 + \quad S_1 \cdot a_1 + \ldots + \quad S_m \cdot a_m &= T_0, \\
S_1 \cdot a_0 + \quad S_2 \cdot a_1 + \ldots + S_{m+1} \cdot a_m &= T_1, \\
&\ldots \\
S_m \cdot a_0 + S_{m+1} \cdot a_1 + \ldots + \quad S_{2m} \cdot a_m &= T_m.
\end{aligned}$$

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - polynomická

Maticovo môžeme tento systém zapísať v tvare

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & \cdots & S_m \\ S_1 & S_2 & \cdots & S_{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_m & S_{m+1} & \cdots & S_{2m} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ \vdots \\ T_m \end{pmatrix}.$$

Riešením tohto systému lineárnych rovníc získame koeficienty $a_0, a_1, a_2, \ldots, a_m$ polynómu, ktorým „prekladáme" dané hodnoty.

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - polynomická

Dôsledok (Polynomická aproximácia priamkou)

Pre polynóm 1. stupňa (priamka) má systém nasledujúci tvar

$$\begin{aligned} a_0(n+1) + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i &= \sum_{i=0}^{n} y_i, \\ a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i. \end{aligned}$$

Propozícia (Polynomická aproximácia priamkou)

Pomocou Cramerovho pravidla dostávame

$$a_0 = \frac{\sum_{i=0}^{n} y_i \sum_{i=0}^{n} x_i^2 - \sum_{i=0}^{n} x_i \sum_{i=0}^{n} x_i y_i}{(n+1)\sum_{i=0}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)^2} = \frac{T_0 \cdot S_2 - S_2 \cdot T_1}{(n+1)\cdot S_2 - (S_1)^2},$$

$$a_1 = \frac{(n+1)\sum_{i=0}^{n} x_i y_i - \sum_{i=0}^{n} x_i \sum_{i=0}^{n} y_i}{(n+1)\sum_{i=0}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)^2} = \frac{(n+1)\cdot T_1 - S_1 \cdot T_0}{(n+1)\cdot S_2 - (S_1)^2}.$$

Propozícia (Polynomická aproximácia parabolou)

Pre polynóm 2. stupňa (parabola) má systém nasledujúci tvar

$$\begin{aligned}
a_0(n+1) + a_1\sum_{i=0}^{n} x_i + a_2\sum_{i=0}^{n} x_i^2 &= \sum_{i=0}^{n} y_i,\\
a_0\sum_{i=0}^{n} x_i + a_1\sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_2\sum_{i=0}^{n} x_i^3 &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i,\\
a_0\sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_1\sum_{i=0}^{n} x_i^3 + a_2\sum_{i=0}^{n} x_i^4 &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^2.
\end{aligned}$$

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - polynomická

Poznámka

Je dôležité si uvedomiť, že aj keď sme uvažovali o minimálnej odchýlke nájdeného polynómu (lineárneho alebo kvadratického) od daných bodov, nemusí tento polynóm skutočne vystihovať reálny charakter daných funkčných bodov najlepšie, keďže nejaká časť variabilty týchto hodnôt môže pripadať na inú ako lineárnu, resp. kvadratickú závislosť (viď. korelačná analýza).

Príklad

Preložme bodmi $(1,0)$, $(2,0)$, $(3,4)$, $(4,5)$, $(5,4)$ *a* $(6,5)$ *parabolu.*

i	x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$y_i x_i$	$y_i x_i^2$
0	1	0	1	1	1	0	0
1	2	0	4	8	16	0	0
2	3	4	9	27	81	12	36
3	4	5	16	64	256	20	80
4	5	4	25	125	625	20	100
5	6	5	36	216	1296	30	180
$\sum$	21	18	91	441	2275	82	396

To znamená, že riešime sústavu

$$\begin{aligned} 6a_0 + 21a_1 + 91a_2 &= 18, \\ 21a_0 + 91a_1 + 441a_2 &= 82, \\ 91a_0 + 441a_1 + 2275a_2 &= 396. \end{aligned}$$

V maticovom zápise

$$\begin{pmatrix} 6 & 21 & 91 \\ 21 & 91 & 441 \\ 91 & 441 & 2275 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 \\ 82 \\ 396 \end{pmatrix}.$$

Sústavu riešime napríklad Cramerovým pravidlom

$$D = \det\begin{pmatrix} 6 & 21 & 91 \\ 21 & 91 & 441 \\ 91 & 441 & 2275 \end{pmatrix} = 3920,$$

$$D_1 = \det\begin{pmatrix} 18 & 21 & 91 \\ 82 & 91 & 441 \\ 396 & 441 & 2275 \end{pmatrix} = -12\,936,$$

$$D_2 = \det\begin{pmatrix} 6 & 18 & 91 \\ 21 & 82 & 441 \\ 91 & 396 & 2275 \end{pmatrix} = 11\,606,$$

$$D_3 = \det\begin{pmatrix} 6 & 21 & 18 \\ 21 & 91 & 82 \\ 91 & 441 & 396 \end{pmatrix} = -1050,$$

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - polynomická

a teda

$$
\begin{aligned}
a_0 &= \frac{D_1}{D} = \frac{-12\,936}{3920} = -3.3, \\
a_1 &= \frac{D_2}{D} = \frac{11\,606}{3920} = 2.960\,7, \\
a_2 &= \frac{D_3}{D} = \frac{-1050}{3920} = -0.267\,86.
\end{aligned}
$$

Hľadaný polynóm má tvar

$$p_2(x) = -3.30000 + 2.9607 \cdot x - 0.26786 \cdot x^2.$$

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - exponenciálna

Exponencionálnu funkciu

$$y = A \cdot \mathrm{e}^{Bx}$$

zlogaritmujeme

$$\ln y = \ln A + Bx \cdot \ln e = \ln A + Bx$$

a za použitia označenia $a = \ln A$, $b = B$ dostávame lineárnu aproximáciu

$$\ln y = a + B \cdot x$$

ktorú by sme aproximovali ako v predchádzajúcom prípade

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - exponenciálna

parametre podľa Cramerovho pravidla pre sústavu 2x2 sú

$$
\begin{aligned}
a &= \frac{\sum\limits_{i=0}^{n} \ln y_i \sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2 - \sum\limits_{i=0}^{n} x_i \sum\limits_{i=0}^{n} x_i \ln y_i}{(n+1) \sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2 - \left(\sum\limits_{i=0}^{n} x_i \right)^2}, \\
b &= \frac{(n+1) \sum\limits_{i=0}^{n} x_i \ln y_i - \sum\limits_{i=0}^{n} x_i \sum\limits_{i=0}^{n} \ln y_i}{(n+1) \sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2 - \left(\sum\limits_{i=0}^{n} x_i \right)^2},
\end{aligned}
$$

a následne $B = b$ a $A = \exp(a) = \mathrm{e}^a$.
Tento odhad dáva veľmi dobré výsledky najmä pre väčšie hodnoty $y \ll 0$.

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - exponenciálna 2

Niekedy je lepšie minimalizovať

$$\sum_{i=0}^{n} y_i \left(\ln y_i - a - bx_i\right)^2 \to \min,$$

čiže

$$\begin{aligned} a\sum_{i=0}^{n} y_i + b\sum_{i=0}^{n} x_i y_i &= \sum_{i=0}^{n} y_i \ln y_i, \\ a\sum_{i=0}^{n} x_i y_i + b\sum_{i=0}^{n} x_i^2 y_i &= \sum_{i=0}^{n} x_i y_i \ln y_i, \end{aligned}$$

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - exponenciálna 2

$$a = \frac{\sum\limits_{i=0}^{n} \left(x_i^2 y_i\right) \sum\limits_{i=0}^{n} y_i \ln y_i - \sum\limits_{i=0}^{n} x_i y_i \sum\limits_{i=0}^{n} x_i y_i \ln y_i}{\sum\limits_{i=0}^{n} y_i \sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2 y_i - \left(\sum\limits_{i=0}^{n} x_i y_i\right)^2},$$

$$b = \frac{\sum\limits_{i=0}^{n} y_i \sum\limits_{i=0}^{n} x_i y_i \ln y_i - \sum\limits_{i=0}^{n} x_i y_i \sum\limits_{i=0}^{n} y_i \ln y_i}{\sum\limits_{i=0}^{n} y_i \sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2 y_i - \left(\sum\limits_{i=0}^{n} x_i y_i\right)^2}.$$

kde $B = b$ a $A = \exp(a) = \mathrm{e}^a$.

Pre logaritmickú funkciu

$$y = a + b \ln x,$$

budú koeficienty aproximácie určené analogicky predošlým postupom a budú viesť na sústavu dvoch rovníc o dvoch neznámych, ktorá použitím Cramarovho pravidla určuje tieto nasledujúcim spôsobom

$$\begin{aligned} b &= \frac{(n+1)\sum_{i=0}^{n}(y_i \ln x_i) - \sum_{i=0}^{n} y_i \sum_{i=0}^{n} \ln x_i}{(n+1)\sum_{i=0}^{n}(\ln x_i)^2 - \left(\sum_{i=0}^{n} \ln x_i\right)^2}, \\ a &= \frac{\sum_{i=0}^{n} y_i - b\sum_{i=0}^{n} \ln x_i}{(n+1)}. \end{aligned}$$

Aproximácia metódou najmenších štvorcov - mocninová

Mocninovú funkciu

$$y = A \cdot x^B,$$

aproximujeme použitím následných odhadov pre parametre

$$\begin{aligned} b &= \frac{(n+1)\sum\limits_{i=0}^{n} \ln x_i \ln y_i - \sum\limits_{i=0}^{n} \ln x_i \sum\limits_{i=0}^{n} \ln y_i}{(n+1)\sum\limits_{i=0}^{n} (\ln x_i)^2 - \left(\sum\limits_{i=0}^{n} \ln x_i\right)^2}, \\ a &= \frac{\sum\limits_{i=0}^{n} \ln y_i - b\sum\limits_{i=0}^{n} \ln x_i}{(n+1)}, \end{aligned}$$

kde $B = b$ a $A = \exp(a) = \mathrm{e}^a$.