# 5. Interpolace a aproximace funkcí

**Průvodce studiem**

Často je potřeba „složitou" funkci $f$ nahradit funkcí „jednodušší". V této kapitole budeme předpokládat, že u funkce $f$ známe její funkční hodnoty $f_i = f(x_i)$ v *uzlech* $x_i$ pro $i = 0, \ldots, n$. Budeme rozlišovat dvě úlohy.

Interpolační úloha: Hledáme funkci $\varphi$, pro niž je

$$\varphi(x_i) = f_i, \quad i = 0, \ldots, n. \tag{5.0.1}$$

Aproximace metodou nejmenších čtverců: Hledáme funkci $\varphi$, pro niž je

$$\varphi(x_i) \approx f_i, \quad i = 0, \ldots, n, \tag{5.0.2}$$

kde přibližná rovnost „$\approx$" je určena tak, aby součet druhých mocnin odchylek mezi předepsanými hodnotami $f_i$ a předpokládanými hodnotami $\varphi(x_i)$ byl minimální.

Jestliže tyto úlohy znázorníme graficky, bude řešení interpolační úlohy procházet přes body $(x_i, f_i)$, $i = 0, \ldots, n$, kdežto řešení aproximační úlohy bude (obecně) procházet jejich blízkým okolím.

Formulace obou úloh je zatím příliš obecná, protože jsme neřekli jakého typu má být funkce $\varphi$. Ukážeme tři volby: polynom, splajn (spline-funkce) a lineární kombinace obecných funkcí. Polynom je jednoduchý z hlediska matematických operací (snadno se derivuje, integruje atp.), jeho graf však často osciluje. Lepší tvary grafu mají splajny. Kombinace obecných funkcí se používá zpravidla v situacích, kdy je známo, jakou závislost daná data popisují (pro periodickou závislost je dobré použít funkce goniometrické, pro strmě rostoucí data se hodí funkce exponenciální atp.).

## 5.1. Interpolační polynom

### Cíle

Ukážeme metody pro sestavení interpolačního polynomu a odvodíme vzorec pro interpolační chybu.

### Předpokládané znalosti

Polynomy. Řešení soustav lineárních rovnic. Věta o střední hodnotě diferenciálního počtu.

### Výklad

Funkci $\varphi$ v úloze (5.0.1) budeme hledat jako *interpolační polynom* stupně nejvýše $n$, tj. položíme $\varphi = p_n$, kde

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n. \tag{5.1.1}$$

Začneme příkladem.

**Příklad 5.1.1.** Jsou dány uzly $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, $x_3 = 2$ a funkční hodnoty $f_0 = 10$, $f_1 = 4$, $f_2 = 6$, $f_3 = 3$. Určete interpolační polynom $p_3$.

**Řešení:** Hledaný polynom má obecný tvar

$$p_3(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3.$$

Koeficienty $a_0$, $a_1$, $a_2$, $a_3$ určíme tak, aby platilo (5.0.1). Každá interpolační rovnost určuje jednu rovnici:

$$\begin{array}{lcl} p_3(-2) = 10 & \Rightarrow & a_0 - 2a_1 + 4a_2 - 8a_3 = 10, \\ p_3(-1) = 4 & \Rightarrow & a_0 - a_1 + a_2 - a_3 = 4, \\ p_3(1) = 6 & \Rightarrow & a_0 + a_1 + a_2 + a_3 = 6, \\ p_3(2) = 3 & \Rightarrow & a_0 + 2a_1 + 4a_2 + 8a_3 = 3. \end{array}$$

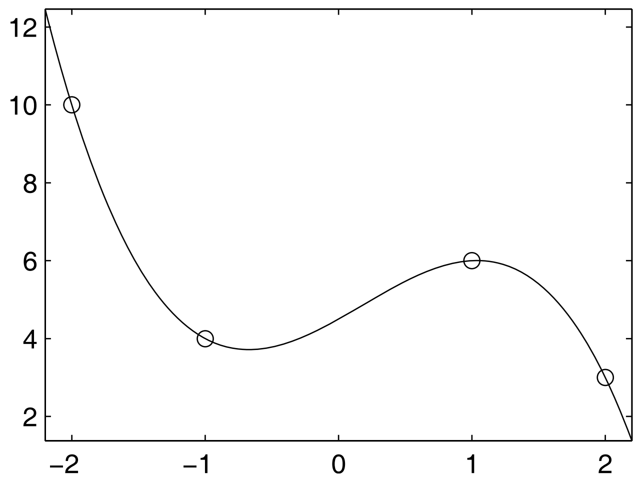
Dostali jsme soustavu lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 4 & -8 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 4 \\ 6 \\ 3 \end{pmatrix},$$

jejímž řešením (na tři desetinná místa) jsou koeficienty $a_0 = 4.500$, $a_1 = 1.917$, $a_2 = 0.500$ a $a_3 = -0.917$. Interpolační polynom má tvar

$$p_3(x) = 4.500 + 1.917x + 0.500x^2 - 0.917x^3.$$

Jeho graf je na obrázku 5.1.1.




Obrázek 5.1.1: Graf interpolačního polynomu $p_3$.

Rozborem postupu z příkaldu dokážeme následující větu.

**Věta 5.1.1.**
Nechť jsou dány vzájemně různé uzly $x_i$ a funkční hodnoty $f_i$, $i = 0, \ldots, n$. Existuje právě jeden interpolační polynom stupně nejvýše $n$.

**Důkaz:** Dosazením obecného tvaru polynomu (5.1.1) do interpolačních rovností

(5.0.1) dostaneme soustavu lineárních rovnic

$$p_n(x_i) = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \ldots + a_n x_i^n = f_i, \quad i = 0, \ldots, n,$$

kterou lze zapsat maticově jako

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}.$$

Matice této soustavy má nenulový determinant (Vandermodův determinant). Odtud plyne existence jediného řešení soustavy lineárních rovnic a také interpolačního polynomu. □

### 5.1.1. Lagrangeův tvar interpolačního polynomu

Ukážeme postup, při němž se obejdeme bez řešení soustavy lineárních rovnic. Interpolační polynom budeme hledat ve tvaru

$$p_n(x) = f_0\varphi_0(x) + f_1\varphi_1(x) + \ldots + f_n\varphi_n(x). \tag{5.1.2}$$

Rovnosti $p_n(x_i) = f_i$, $i = 0, 1, \ldots, n$ budou splněny, jestliže bude platit

$$\varphi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{pro} \quad i = j, \\ 0 & \text{pro} \quad i \neq j. \end{cases}$$

Z věty 5.1.1. víme, že interpolační polonom je stupně nejvýše $n$, takže také všechny funkce $\varphi_i$ musí být polynomy stupně nejvýše $n$. Uvedeným požadavkům vyhovuje následující definice:

$$\varphi_i(x) = \frac{(x-x_0)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)} \tag{5.1.3}$$

pro $i = 0, 1, \ldots, n$. Čitatel je totiž polynom, který nabývá nulových hodnot ve všech uzlech kromě $x_i$. V uzlu $x_i$ pak nabývá nenulové hodnoty, která je obsažena ve jmenovateli zlomku, takže platí $\varphi_i(x_i) = 1$.

Polynomům $\varphi_i$, $i = 0, 1, \ldots, n$ se říká *Lagrangeova báze* interpolační úlohy a vzorec (5.1.2) se nazývá *Lagrangeův tvar* inteprolačního polynomu.

**Příklad 5.1.2.** Mějme dány uzly $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, $x_3 = 2$ a funkční hodnoty $f_0 = 10$, $f_1 = 4$, $f_2 = 6$, $f_3 = 3$. Napište Lagrangeův tvar interpolačního polynomu.

**Řešení:** Nejdříve sestavíme Lagrangeovu bázi. Podle (5.1.3) je

$$\begin{aligned}
\varphi_0(x) &= \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(-2+1)(-2-1)(-2-2)} = -\frac{1}{12}(x+1)(x-1)(x-2),\\
\varphi_1(x) &= \frac{(x+2)(x-1)(x-2)}{(-1+2)(-1-1)(-1-2)} = \frac{1}{6}(x+2)(x-1)(x-2),\\
\varphi_2(x) &= \frac{(x+2)(x+1)(x-2)}{(1+2)(1+1)(1-2)} = -\frac{1}{6}(x+2)(x+1)(x-2),\\
\varphi_3(x) &= \frac{(x+2)(x+1)(x-1)}{(2+2)(2+1)(2-1)} = \frac{1}{12}(x+2)(x+1)(x-1).
\end{aligned}$$

Dosazením do (5.1.2) dostaneme výsledek

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

***Poznámka***

*Interpolační polynom je podle věty 5.1.1. určen jednoznačně. Úpravou Lagrangeova tvaru proto musíme nutně dojít k polynomu, který jsem vypočítali v příkladu 5.1.1. (ověřte).*

### 5.1.2. Newtonův tvar interpolačního polynomu

Uvažujme zápis polynomu ve tvaru:

$$p_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \ldots + a_n(x-x_0)\ldots(x-x_{n-1}). \quad (5.1.4)$$

Jestliže dosadíme do interpolačních rovností $p_n(x_i) = f_i$, $i = 0, 1, \ldots, n$, dostaneme soustavu lineárních rovnic s dolní trojúhelníkovou maticí:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 1 & (x_1-x_0) & 0 & \ldots & 0 \\ 1 & (x_2-x_0) & (x_2-x_0)(x_2-x_1) & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (5.1.5)$$

Odud můžeme postupně vyjádřit koeficienty $a_k$:

$$\begin{aligned} a_0 &= f_0, \quad a_1 = \frac{f_1 - a_0}{x_1 - x_0} = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}, \\ a_2 &= \frac{f_2 - a_1(x_2 - x_0) - a_0}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} = \frac{\frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} - \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}, \end{aligned}$$

atd..

Výrazy na pravých stranách jsou poměrné diference, jejichž označení zavádíme v následující definici.

**Definice 5.1.1.**

Nechť jsou dány vzájemně různé uzly $x_i$ a funkční hodnoty $f_i$, $i = 0, \ldots, n$. Poměrné diference $k$-tého řádu $f[x_{i+k}, \ldots, x_i]$, $i = 0, 1, \ldots, n-k$ definujeme rekurentně:

- pro $k = 0$ : $\quad f[x_i] = f_i;$
- pro $k = 1$ : $\quad f[x_{i+1}, x_i] = \dfrac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i};$
- pro $k \leq n$ : $\quad f[x_{i+k}, \ldots, , x_i] = \dfrac{f[x_{i+k}, \ldots, x_{i+1}] - f[x_{i+k-1}, \ldots, x_i]}{x_{i+k} - x_i}.$

Porovnáním poměrných diferencí s koeficienty $a_k$ vidíme, že

$$a_k = f[x_k, \ldots, x_0], \quad k = 0, 1, \ldots, n.$$

Dosazením do (5.1.4) dostaneme *Newtonův tvar* interpolačního polynomu:

$$p_n(x) = f_0 + f[x_1, x_0](x - x_0) + \ldots + f[x_n, \ldots, x_0](x - x_0) \ldots (x - x_{n-1}). \quad (5.1.6)$$

Při jeho sestavování potřebujeme vypočítat poměrné diference. Vše ukážeme v následujícím příkladu.

**Příklad 5.1.3.** Mějme dány uzly $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, $x_3 = 2$ a funkční hodnoty $f_0 = 10$, $f_1 = 4$, $f_2 = 6$, $f_3 = 3$. Napište Newtonův tvar interpolačního polynomu.

**Řešení:** Potřebujeme vypočítat poměrné diference:

$$f[x_1, x_0], \; f[x_2, x_1, x_0], \; f[x_3, x_2, x_1, x_0].$$

Podle definice je

$$\begin{aligned} f[x_1, x_0] &= \frac{4 - 10}{-1 + 2} = -6, \\ f[x_2, x_1, x_0] &= \frac{f[x_2, x_1] - f[x_1, x_0]}{x_2 - x_0} = \frac{\frac{6-4}{1+1} + 6}{1 + 2} = \frac{7}{3}, \\ f[x_3, x_2, x_1, x_0] &= \frac{f[x_3, x_2, x_1] - f[x_2, x_1, x_0]}{x_3 - x_0} = \frac{\frac{\frac{3-6}{2-1} - \frac{6-4}{1+1}}{2+1} - \frac{7}{3}}{2 + 2} = -\frac{11}{12}. \end{aligned}$$

Dosazením do (5.1.6) dostaneme výsledek

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

Přehledně můžeme výpočet poměrných diferencí provést v tabulce (tabulka 5.1.1), kde do prvních dvou sloupců zapíšeme zadané uzly a funkční hodnoty a v každém dalším sloupci pak vypočítáme všechny (!) poměrné diference postupně se zvyšujících řádů. Pro napsání interpolačního polynomu potřebujeme z této tabulky hodnoty diferencí z prvního řádku.

Tabulka 5.1.1: Výpočet poměrných diferencí.

| $i$ | $x_i$ | $f_i$ | $f[x_{i+1}, x_i]$ | $f[x_{i+2}, x_{i+1}, x_i]$ | $f[x_3, x_2, x_1, x_0]$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | $-2$ | 10 | $-6$ | $\frac{7}{3}$ | $-\frac{11}{12}$ |
| 1 | $-1$ | 4 | 1 | $-\frac{4}{3}$ | |
| 2 | 1 | 6 | $-3$ | | |
| 3 | 2 | 3 | | | |

### 5.1.3. Interpolační chyba

Předpokládejme, že hodnoty $f_i$ jsou funkčními hodnotami funkce $f$ v uzlech $x_i$, tj. $f_i = f(x_i)$. Bude nás zajímat *interpolační chyba*

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

V uzlech $x_i$ je interpolační chyba nulová, ale mimo uzly může být velká.

**Věta 5.1.2.**
Nechť uzly $x_i$, $i = 0, 1, \ldots, n$, jsou vzájemně různé a leží na intervalu $\langle a, b\rangle$. Nechť funkce $f$ má na tomto intervalu $n+1$ spojitých derivací. Pak pro každé $x \in \langle a, b\rangle$ existuje $\xi = \xi(x)$ v $(a, b)$ tak, že platí

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x), \tag{5.1.7}$$

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

**Důkaz:** Pro $x = x_i$ je rovnost (5.1.7) splněna, protože obě její strany jsou nulové. Pro pevně zvolené $x \neq x_i$ definujme funkci

$$g(t) = f(t) - p_n(t) - \frac{\pi_{n+1}(t)}{\pi_{n+1}(x)}\left(f(x) - p_n(x)\right), \tag{5.1.8}$$

kde $t$ je proměnná a $x$ je parametr. Funkce $g$ má zřejmě $n+2$ kořenů, kterými jsou body $x_0, \ldots, x_n$ a $x$. Každá derivace funkce $g$ má o jeden kořen méně, takže $(n+1)$-ní derivace má jediný kořen v nějakém bodě $\xi \in (a, b)$. Derivujeme-li $(n+1)$-krát výraz (5.1.8) (podle $t$) a použijeme přitom $p_n^{(n+1)}(t) = 0$ a $\pi_{n+1}^{(n+1)}(t) = (n+1)!$, dostaneme

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

Jestliže odtud vyjádříme interpolační chybu, vznikne rovnost (5.1.7). □

Na průběh interpolační chyby v intervalu $\langle a, b\rangle$ má podstatný vliv tvar polynomu $\pi_{n+1}$, jak ukazuje následující příklad.

**Příklad 5.1.4. (Rungeho příklad)** Nakreslíme graf funkce

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}$$

a graf interpolačního polynomu odpovídajícího uzlům $x_i = -5+i$, $i = 0, 1, \ldots, 10$. Výsledek porovnáme s grafem polynomu

$$\pi_{11}(x) = (x+5)(x+4)\ldots(x-5).$$

**Řešení:** Obrázek 5.1.2.a ukazuje graf polynomu $\pi_{11}$. Z jeho průběhu lze usoudit, že největší interpolační chyby budou poblíž krajních uzlů $x_0 = -5$ a $x_{10} = 5$. Na obrázku 5.1.2.b vidíme, že graf interpolačního polynomu osciluje kolem grafu funkce $f$ a že oscilace jsou největší právě na krajích intervalu $\langle -5, 5\rangle$. Poznamenejme ještě, že při zvětšení počtu interpolačních uzlů nedojde ke zmenšení interpolační chyby, ale naopak k jejímu zvětšení.

### Kontrolní otázky

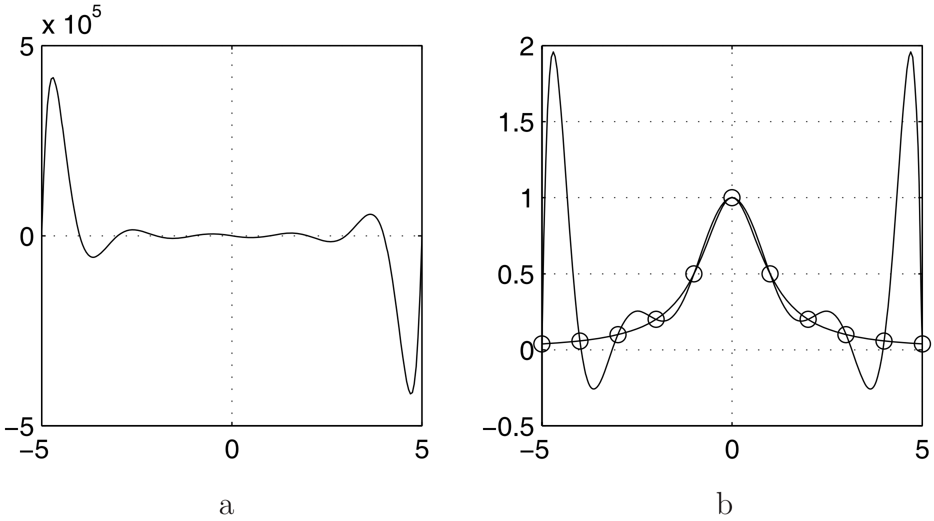
Otázka 1. Jaké znáte metody pro sestavení interpolačního polynomu?

Otázka 2. Jakého stupně je interpolační polynom?

Otázka 3. Jak se chová interpolační chyba?

### Úlohy k samostatnému řešení

**1.** Pro uzly $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 2$, $x_3 = 3$, $x_4 = 5$ a funkční hodnoty $f_0 = -2$,




Obrázek 5.1.2: a) Graf $\pi_{11}$; b) Grafy $f$ (neoscilující) a $p_{10}$ (oscilující).

$f_1 = 1$, $f_2 = 0$, $f_3 = 2$, $f_4 = -1$ vypočtěte interpolační polynom ve tvaru (5.1.1).

**2.** Pro předchozí data vypočtěte Lagrangeův a Newtonův tvar interpolačního polynomu.

## Výsledky úloh k samostatnému řešení

**1.** $p_4(x) = -\frac{3}{20}x^4 + \frac{11}{10}x^3 - \frac{109}{60}x^2 - \frac{1}{15}x + 1.$

**2.** Lagrangeův tvar: $p_4(x) = -\frac{1}{36}x(x-2)(x-3)(x-5) - \frac{1}{30}(x+1)(x-2)(x-3)(x-5) - \frac{1}{12}(x+1)x(x-2)(x-5) - \frac{1}{180}(x+1)x(x-2)(x-3);$

Newtonův tvar: $p_4(x) = -2 + 3(x+1) - \frac{35}{30}(x+1)x + \frac{1}{2}(x+1)x(x-2) - \frac{3}{20}(x+1)x(x-2)(x-3).$

## 5.2. Interpolační splajny

**Cíle**

Viděli jsme, že graf interpolačního polynomu může nepříjemně oscilovat. Tato situace nastává při předepsání většího počtu dat, protože interpolační polynom je pak vysokého stupně. Zdá se proto rozumné při řešení interpolační úlohy použít funkci, která bude *počástech* polynomem nízkého stupně, jejíž jednotlivé části budou na sebe navazovat dostatečně hladce. Takovým funkcím se říká *splajn* (z angl. „spline"). Ukážeme dva nejčastěji používané splajny: lineární a kubický.

**Předpokládané znalosti**

Interpolační polynom. Spojitost derivace. Řešení soustav lineárních rovnic.

**Výklad**

Abychom se vyhnuli komplikacím při popisu, budeme předpokládat, že uzly interpolace tvoří rostoucí posloupnost, tzn. $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$. Vzdálenost dvou sousedních uzlů označíme $h_i$, tj. $h_i = x_i - x_{i-1}, \quad i = 1, \ldots, n$.

### 5.2.1. Lineární splajn

**Definice 5.2.1.**

Lineárním splajnem nazýváme funkci $s_1$, která je spojitá na intervalu $\langle x_0, x_n \rangle$ a na každém podintervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$, $i = 1, \ldots, n$, je polynomem prvního stupně.

Lineární *interpolační* splajn je řešením úlohy (5.0.1), tzn. že pro něj platí $s_1(x_i) = f_i$, $i = 0, \ldots, n$. Můžeme ho zapsat po částech pro $i = 1, \ldots, n$:

$$s_1(x) = f_{i-1}(1-t) + f_i t, \quad t = (x - x_{i-1})/h_i, \quad x \in \langle x_{i-1}, x_i \rangle. \tag{5.2.1}$$

Grafem lineárního splajnu je *lomená čára*.

**Příklad 5.2.1.** Mějme dány uzly $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, $x_3 = 2$ a funkční hodnoty $f_0 = 10$, $f_1 = 4$, $f_2 = 6$, $f_3 = 3$. Napište lineární interpolační splajn.

**Řešení:** Zapíšeme jej pomocí předpisu (5.2.1):

$$s_1(x) = \begin{cases} 10\varphi_1(t) + 4\varphi_2(t), & t = x + 2 \qquad \text{pro } x \in \langle -2, -1 \rangle, \\ 4\varphi_1(t) + 6\varphi_2(t), & t = (x+1)/2 \quad \text{pro } x \in \langle -1, 1 \rangle, \\ 6\varphi_1(t) + 3\varphi_2(t), & t = x - 1 \qquad \text{pro } x \in \langle 1, 2 \rangle, \end{cases}$$

kde $\varphi_1(t) = 1 - t$, $\varphi_2(t) = t$. Graf je znázorněn na obrázku 5.2.1.

### 5.2.2. Kubický splajn

**Definice 5.2.2.**
Kubickým splajnem nazýváme funkci $s_3$, která má na intervalu $\langle x_0, x_n \rangle$ dvě spojité derivace a na každém podintervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$, $i = 1, \ldots, n$, je polynomem třetího stupně.

Kubický *interpolační* splajn, je řešení interpolační úlohy (5.0.1). Jeho konstrukce je složitější než u lineárního splajnu. Vyjdeme opět z vyjádření po částech pro $i = 1, \ldots, n$:

$$\begin{aligned} s_3(x) &= f_{i-1}(1 - 3t^2 + 2t^3) + f_i(3t^2 - 2t^3) \\ &\quad + m_{i-1}h_i(t - 2t^2 + t^3) + m_i h_i(-t^2 + t^3), \end{aligned} \tag{5.2.2}$$

kde $t = (x - x_{i-1})/h_i$ a $x \in \langle x_{i-1}, x_i \rangle$. Tento předpis je navržen tak, aby parametry $f_{i-1}$, $f_i$ a $m_{i-1}$, $m_i$ měly význam funkčních hodnot a hodnot první derivace v krajních bodech intervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$, tj. platí

$$s_3(x_{i-1}) = f_{i-1}, \quad s_3(x_i) = f_i, \tag{5.2.3}$$

$$s_3'(x_{i-1}) = m_{i-1}, \quad s_3'(x_i) = m_i. \tag{5.2.4}$$

O splnění rovností (5.2.3) a (5.2.4) se můžeme přesvědčit dosazením $x_{i-1}$ a $x_i$ do (5.2.2) a do první derivace $s_3'$, kterou vyjádříme z (5.2.2) podle pravidla o derivování složené funkce:

$$\begin{aligned} s_3'(x) &= f_{i-1}(-6t+6t^2)/h_i + f_i(6t-6t^2)/h_i \\ &\quad +m_{i-1}(1-4t+3t^2) + m_i(-2t+3t^2). \end{aligned} \tag{5.2.5}$$

Předpis (5.2.2) zaručuje spojitost první derivace $s_3'$ na celém intervalu $\langle x_0, x_n \rangle$ pro libovolné hodnoty $m_i$. Spojitost druhé derivace vynutíme speciální volbou $m_i$. Budeme požadovat

$$\lim_{x\to x_i-} s_3''(x) = \lim_{x\to x_i+} s_3''(x) \tag{5.2.6}$$

ve vnitřních uzlech $x_i$, $i = 1, \dots, n-1$. Potřebný výraz pro druhou derivaci vypočteme z (5.2.5) opět podle pravidla o derivování složené funkce:

$$\begin{aligned} s_3''(x) &= f_{i-1}(-6+12t)/h_i^2 + f_i(6-12t)/h_i^2 \\ &\quad +m_{i-1}(-4+6t)/h_i + m_i(-2+6t)/h_i. \end{aligned} \tag{5.2.7}$$

Levou stranu v (5.2.6) vyjádříme z (5.2.7) pro $t = 1$:

$$\lim_{x\to x_i-} s_3''(x) = 6f_{i-1}/h_i^2 - 6f_i/h_i^2 + 2m_{i-1}/h_i + 4m_i/h_i. \tag{5.2.8}$$

Pravou stranu v (5.2.6) vyjádříme z (5.2.7) pro $t = 0$, když současně posuneme indexování:

$$\lim_{x\to x_i+} s''(x) = -6f_i/h_{i+1}^2 + 6f_{i+1}/h_{i+1}^2 - 4m_i/h_{i+1} - 2m_{i+1}/h_{i+1}. \tag{5.2.9}$$

Dosadíme-li (5.2.8) a (5.2.9) do (5.2.6), dostaneme po jednoduché úpravě

$$\begin{aligned} &h_{i+1}m_{i-1} + 2(h_{i+1}+h_i)m_i + h_i m_{i+1} = \\ &3\left[-\frac{h_{i+1}}{h_i}f_{i-1} + \left(\frac{h_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i}{h_{i+1}}\right)f_i + \frac{h_i}{h_{i+1}}f_{i+1}\right], \quad i = 1, \dots, n-1. \end{aligned} \tag{5.2.10}$$

Tyto rovnosti tvoří soustavu $n-1$ rovnic pro $n+1$ neznámých $m_i$, $i = 0, 1, \ldots .n$. Abychom dostali jediné řešení, určíme $m_0$ a $m_n$ například jako přibližné derivace:

$$m_0 = \frac{f_1 - f_0}{h_1}, \quad m_n = \frac{f_n - f_{n-1}}{h_n}. \tag{5.2.11}$$

**Příklad 5.2.2.** Mějme dány uzly $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, $x_3 = 2$ a funkční hodnoty $f_0 = 10$, $f_1 = 4$, $f_2 = 6$, $f_3 = 3$. Napište kubický interpolační splajn.

**Řešení:** Nejdříve vypočítáme parametry $m_i$, $i = 0, 1, 2, 3$. Podle (5.2.11) je

$$m_0 = \frac{4-10}{-1+2} = -6, \quad m_3 = \frac{3-6}{2-1} = -3.$$

Soustava (5.2.10) má dvě rovnice:

$$\begin{aligned} 2(h_2+h_1)m_1 + h_1 m_2 &= 3\left[-\frac{h_2}{h_1}f_0 + \left(\frac{h_2}{h_1} - \frac{h_1}{h_2}\right)f_1 + \frac{h_1}{h_2}f_2\right] - h_2 m_0, \\ h_3 m_1 + 2(h_3+h_2)m_2 &= 3\left[-\frac{h_3}{h_2}f_1 + \left(\frac{h_3}{h_2} - \frac{h_2}{h_3}\right)f_2 + \frac{h_2}{h_3}f_3\right] - h_2 m_3, \end{aligned}$$

které můžeme psát jako

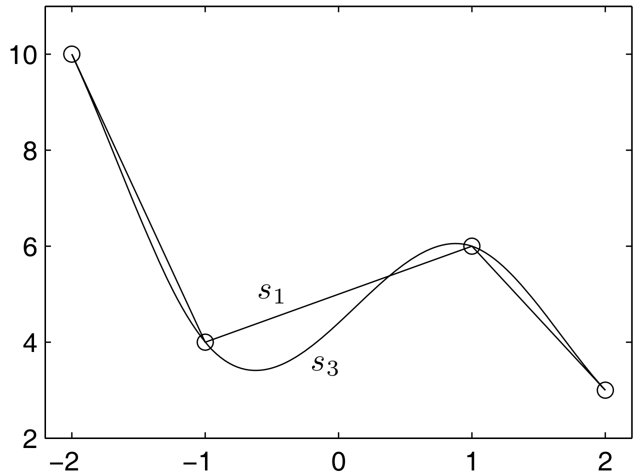
$$\begin{pmatrix} 6 & 1 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -21 \\ -9 \end{pmatrix}.$$

Vyřešením dostaneme $m_1 = -\frac{234}{70}$, $m_2 = -\frac{66}{70}$. Výsledný splajn zapíšeme podle (5.2.2) po částech:

$$s_3(x) = \begin{cases} 10\varphi_1(t) + 4\varphi_2(t) - 6\varphi_3(t) - \frac{117}{35}\varphi_4(t), & t = x+2 \text{ pro } x \in \langle -2, -1 \rangle, \\ 4\varphi_1(t) + 6\varphi_2(t) - \frac{234}{35}\varphi_3(t) - \frac{66}{35}\varphi_4(t), & t = (x+1)/2 \text{ pro } x \in \langle -1, 1 \rangle, \\ 6\varphi_1(t) + 3\varphi_2(t) - \frac{33}{35}\varphi_3(t) - 3\varphi_4(t), & t = x-1 \text{ pro } x \in \langle 1, 2 \rangle, \end{cases}$$

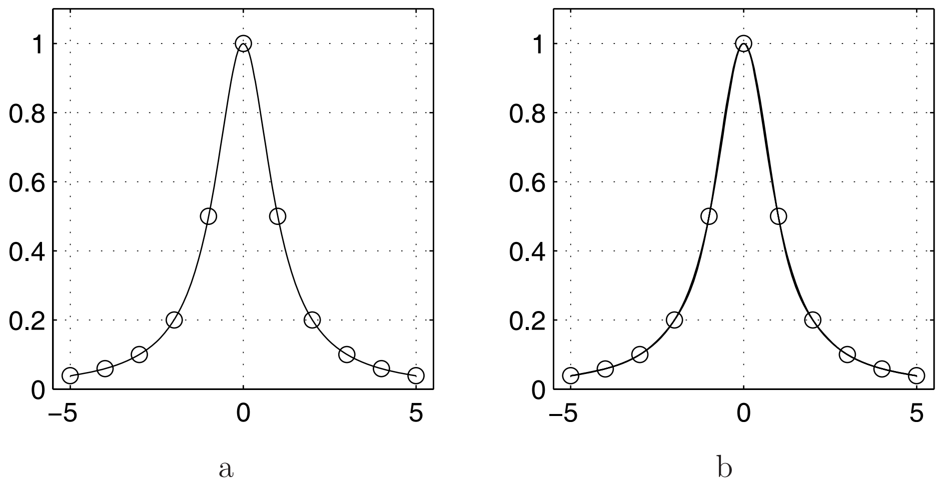
kde $\varphi_1(t) = 1 - 3t^2 + 2t^3$, $\varphi_2(t) = 3t^2 - 2t^3$, $\varphi_3(t) = t - 2t^2 + t^3$, $\varphi_4(t) = -t^2 + t^3$. Graf je znázorněn na obrázku 5.2.1.

**Příklad 5.2.3. (Rungeho příklad, pokračování)** Nakreslíme graf interpolačního kubického splajnu pro funkci $f$ a uzly $x_i$ z příkladu 5.1.4. a porovnáme ho s grafem interpolačního polynomu.




Obrázek 5.2.1: Graf lineárního ($s_1$) a kubického interpolačního ($s_3$) splajnu.

**Řešení:** Na obrázku 5.2.2 vidíme, že splajn $s_3$ neosciluje a je proto mnohem lepší aproximací interpolované funkce $f$ než interpolační polynom $p_{10}$, viz obrázek 5.1.2.b.




Obrázek 5.2.2: a) Funkce $f$; b) Kubický interpolační splajn $s_3$.

## Kontrolní otázky

Otázka 1. Co je to splajn? Jak se definuje a počítá splajn lineární a kubický?

Otázka 2. Jak se chovají při interpolaci splajny v porovnání s polynomy?

## Úlohy k samostatnému řešení

**1.** Pro uzly $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 2$, $x_3 = 3$, $x_4 = 5$ a funkční hodnoty $f_0 = -2$, $f_1 = 1$, $f_2 = 0$, $f_3 = 2$, $f_4 = -1$ sestavte lineární interpolační splajn.

**2.** Pro stejná data sestavte kubický interpolační splajn.

## Výsledky úloh k samostatnému řešení

**1.**

$$s_1(x) = \begin{cases} -2\varphi_1(t) + \varphi_2(t), & t = x+1 \quad \text{pro } x \in \langle -1, 0 \rangle, \\ \varphi_1(t), & t = x/2 \quad \text{pro } x \in \langle 0, 2 \rangle, \\ 2\varphi_2(t), & t = x-2 \quad \text{pro } x \in \langle 2, 3 \rangle, \\ 2\varphi_1(t) - 1\varphi_2(t), & t = (x-3)/2 \quad \text{pro } x \in \langle 3, 5 \rangle, \end{cases}$$

kde $\varphi_1(t) = 1 - t$, $\varphi_2(t) = t$.

**2.** Krajní parametry jsou $m_0 = 3$, $m_4 = -\frac{3}{2}$, ostatní dostaneme ze soustavy

$$\begin{pmatrix} 6 & 1 & 0 \\ 1 & 6 & 2 \\ 0 & 2 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{21}{2} \\ \frac{21}{2} \\ 9 \end{pmatrix},$$

takže $m_1 = \frac{97}{62}$, $m_2 = \frac{69}{62}$, $m_3 = \frac{35}{31}$ a konečně

$$s_3(x) = \begin{cases} -2\varphi_1(t) + \varphi_2(t) + 3\varphi_3(t) + \frac{97}{62}\varphi_4(t), & t = x+1 \text{ pro } x \in \langle -1, 0 \rangle, \\ \varphi_1(t) + \frac{97}{31}\varphi_3(t) + \frac{69}{31}\varphi_4(t), & t = x/2 \text{ pro } x \in \langle 0, 2 \rangle, \\ 2\varphi_2(t) + \frac{69}{62}\varphi_3(t) + \frac{35}{31}3\varphi_4(t), & t = x-2 \text{ pro } x \in \langle 2, 3 \rangle, \\ 2\varphi_1(t) - \varphi_2(t) + \frac{70}{31}\varphi_3(t) - 3\varphi_4(t), & t = (x-3)/2 \text{ pro } x \in \langle 3, 5 \rangle, \end{cases}$$

kde $\varphi_1(t) = 1 - 3t^2 + 2t^3$, $\varphi_2(t) = 3t^2 - 2t^3$, $\varphi_3(t) = t - 2t^2 + t^3$, $\varphi_4(t) = -t^2 + t^3$.

## 5.3. Aproximace metodou nejmenších čtverců

### Cíle

V mnoha situacích, v nichž je potřeba danou funkci $f$ nahradit funkcí „jednodušší", je nevhodné nebo vůbec nelze použít interpolaci. Jsou-li například v uzlech zadány nepřesné hodnoty, přenáší se tato nepřesnost i na interpolant. Interpolace je nepoužitelná, jestliže je požadován jistý charakter aproximující funkce a přitom žádná funkce tohoto charakteru není interpolantem. V těchto případech je rozumné použít metodu nejmenších čtverců.

### Předpokládané znalosti

Lineární závislost a nezávislost. Určení minima funkce pomocí derivace. Řešení soustav lineárních rovnic.

### Výklad

Začneme příkladem.

**Příklad 5.3.1.** Mějme dány uzly $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, $x_3 = 2$ a funkční hodnoty $f_0 = 10$, $f_1 = 4$, $f_2 = 6$, $f_3 = 3$. Najděte přímku

$$\varphi(x) = c_1 + c_2 x, \tag{5.3.1}$$

která je „blízko" předepsaným hodnotám.

**Řešení:** Nejdříve se musíme rozhodnout jak chápat slovo „blízko". Už jsme to vlastně řekli, když jsme popisovali smysl přibližných rovností v aproximační úloze (5.0.2). Přímku $\varphi$ určíme tak, aby minimalizovala součet druhých mocnin odchylek $\sum_{i=0}^{3}(\varphi(x_i)-f_i)^2$. Jestliže sem dosadíme (5.3.1), dostaneme úlohu na minimalizaci funkce dvou proměnných $\Psi(c_1, c_2) = \sum_{i=0}^{3}(c_1 + c_2 x_i - f_i)^2$. Minimum

$c_1^*$, $c_2^*$ vyhovuje rovnicím

$$\frac{\partial \Psi}{\partial c_1}(c_1^*, c_2^*) = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial c_2}(c_1^*, c_2^*) = 0.$$

Po vyjádření parciálních derivací dostáváme

$$2\sum_{i=0}^{3}(c_1^* + c_2^* x_i - f_i) = 0, \quad 2\sum_{i=0}^{3}(c_1^* + c_2^* x_i - f_i)x_i = 0,$$

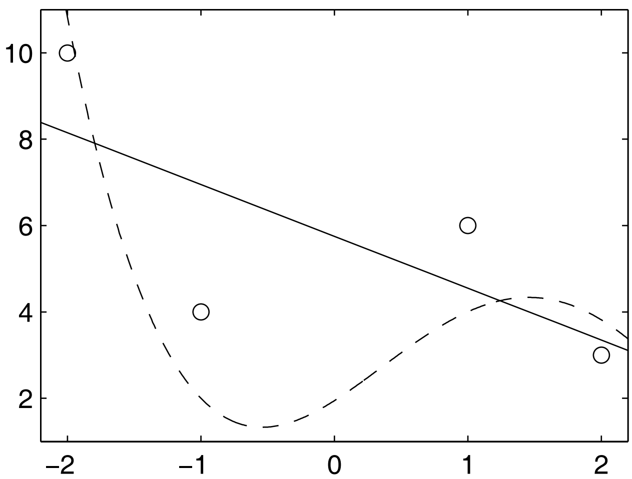
což je soustava lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{3} 1 & \sum_{i=0}^{3} x_i \\ \sum_{i=0}^{3} x_i & \sum_{i=0}^{3} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{3} f_i \\ \sum_{i=0}^{3} f_i x_i \end{pmatrix}, \text{ tj. } \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 23 \\ -12 \end{pmatrix}.$$

Tato soustava má jediné řešení $c_1^* = \frac{23}{4}$, $c_2^* = -\frac{6}{5}$, takže hledaná přímka $\varphi^* = \varphi$ je určena předpisem

$$\varphi^*(x) = \frac{23}{4} - \frac{6}{5}x. \tag{5.3.2}$$

Její graf je znázorněn na obrázku 5.3.1. □




Obrázek 5.3.1: Aproximace metodou nejmenších čtverců; přímka (5.3.2) plně; funkce (5.3.8) čárkovaně.

Postup z příkladu nyní zobecníme. Budeme předpokládat, že je dán systém funkcí $\varphi_j = \varphi_j(x)$, $j = 1, \ldots, m$ a budeme uvažovat všechny funkce ve tvaru

$$\varphi(x) = c_1\varphi_1(x) + \ldots + c_m\varphi_m(x) = \sum_{j=1}^{m} c_j\varphi_j(x), \tag{5.3.3}$$

kde koeficienty $c_1, \ldots, c_m$ jsou libovolná čísla. Funkci $\varphi^*$, pro niž platí

$$\sum_{i=1}^{n}(\varphi^*(x_i) - f_i)^2 \leq \sum_{i=1}^{n}(\varphi(x_i) - f_i)^2 \qquad \forall\varphi \tag{5.3.4}$$

nazýváme *aproximací podle metody nejmenších čtverců*. Její koeficienty $c_1^*, \ldots, c_m^*$ určíme jako minimum funkce

$$\Psi(c_1, \ldots, c_m) = \sum_{i=1}^{n}(\sum_{j=1}^{m} c_j\varphi_j(x_i) - f_i)^2, \tag{5.3.5}$$

které vyhovuje rovnicím

$$\frac{\partial\Psi}{\partial c_k}(c_1^*, \ldots, c_m^*) = 0, \quad k = 1, \ldots, m. \tag{5.3.6}$$

Vyjádříme-li parciální derivace

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

a dosadíme je do (5.3.6), dostaneme po jednoduché úpravě soustavu lineárních rovnic

$$\sum_{j=1}^{m}\left(\sum_{i=1}^{n}\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\right)c_j^* = \sum_{i=1}^{n} f_i\varphi_k(x_i), \quad k = 1, \ldots, m. \tag{5.3.7}$$

Soustava (5.3.7) se nazývá *soustava normálních rovnic.*

**Věta 5.3.1.**

Nechť jsou dány vzájemně různé uzly $x_i$ a funkční hodnoty $f_i$, $i = 0, \ldots, n$. Nechť je dán systém funkcí $\varphi_j$, $j = 1, \ldots, m$, které jsou lineárně nezávislé. Potom existuje jediná funkce $\varphi^*$, která splňuje (5.3.4) a její koeficienty $c_1^*, \ldots, c_m^*$ jsou řešením soustavy normálních rovnic (5.3.7).

**Důkaz:** V bodě $c_1^*, \ldots, c_m^*$, který vyhovuje rovnicím (5.3.6), nabývá funkce $\Psi$ minima, jestliže matice druhých derivací je symmetrická a pozitivně definitní (kladná). Druhé derivace jsou určeny vzorcem

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial c_k \partial c_l} = 2 \sum_{i=1}^{n} \varphi_l(x_i)\varphi_k(x_i),$$

odkud je symetrie zřejmá na první pohled (prohozením indexů $k$ a $l$ se nic nezmění). Nechť $d_1, \ldots, d_m$ jsou čísla ne všechny současně nulová. Potom

$$\sum_{k=1}^{m} \sum_{l=1}^{m} d_k d_l \frac{\partial^2 \Psi}{\partial c_k \partial c_l} = 2 \sum_{i=1}^{n} \Big( \sum_{l=1}^{m} d_l \varphi_l(x_i) \Big) \Big( \sum_{k=1}^{m} d_k \varphi_k(x_i) \Big) = 2 \sum_{i=1}^{n} \tilde{\varphi}(x_i)^2 > 0,$$

kde $\tilde{\varphi}(x) = \sum_{k=1}^{m} d_k \varphi_k(x)$, takže matice druhých derivací je pozitivně definitní. Odtud také plyne, že matice soustavy normálních rovnic je regulární, což znamená, že existuje její jediné řešení $c_1^*, \ldots, c_m^*$, které určuje jedinou funkci $\varphi^*$. $\square$

Při aproximaci metodou nejmenších čtverců se musíme nejdříve rozhodnout pro nějaký lineárně nezávislý systém funkcí $\varphi_j$, $j = 1, \ldots, m$. Poté stačí sestavit a vyřešit soustavu normálních rovnic (5.3.7).

**Příklad 5.3.2.** Napište normální soustavu lineárních rovnic odpovídající systému funkcí

$$\varphi_1(x) = e^{-x}, \quad \varphi_2(x) = \sin x.$$

Aproximujte data z příkladu 5.3.1.

**Řešení:** Obecně má soustava normálních rovnic tvar

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} e^{-2x_i} & \sum_{i=0}^{n} e^{-x_i} \sin x_i \\ \sum_{i=0}^{n} e^{-x_i} \sin x_i & \sum_{i=0}^{n} \sin^2 x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} f_i e^{-x_i} \\ \sum_{i=0}^{n} f_i \sin x_i \end{pmatrix}.$$

Po dosazení dostaneme

$$\begin{pmatrix} 62.1409 & -8.5736 \\ -8.5736 & 3.0698 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 87.3770 \\ -4.6821 \end{pmatrix}$$

a odtud vypočítáme $c_1^* = 1.9452$, $c_2^* = 3.9076$, tj.

$$\varphi^*(x) = 1.9452e^{-x} + 3.9076 \sin x. \tag{5.3.8}$$

Graf je znázorněn na obrázku 5.3.1.

## Kontrolní otázky

Otázka 1. Kdy je vhodné použít metodu nejmenších čtverců?

Otázka 2. Graficky znázorněte smysl výrazu pro součet druhých mocnin odchylek?

Otázka 3. Co je to normální soustava lineárních rovnic a jak vznikne?

Otázka 4. Co se stane, když v (5.3.3) a (5.3.4) bude $m = n + 1$?

## Úlohy k samostatnému řešení

**1.** Napište soustavu normálních lineárních rovnic pro systém funkcí $\varphi_1(x) = 1$, $\varphi_2(x) = x$, $\varphi_3(x) = x^2$.

**2.** Data $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 2$, $x_3 = 3$, $x_4 = 5$ a $f_0 = -2$, $f_1 = 1$, $f_2 = 0$, $f_3 = 2$, $f_4 = -1$ aproximujte metodou nejmenčích čtverců pomocí systému funkcí z předchozí úlohy.

## Výsledky úloh k samostatnému řešení

**1.** Normální soustava má tvar:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} 1 & \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i^3 \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i^3 & \sum_{i=0}^{n} x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \\ c_3^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} f_i \\ \sum_{i=0}^{n} f_i x_i \\ \sum_{i=0}^{n} f_i x_i^2 \end{pmatrix}.$$

**2.** $\varphi^*(x) = -0.2835x^2 + 1.2359x - 0.0130$.

## Shrnutí lekce

Ukázali jsme základní postupy pro aproximaci funkcí (dat) pomocí interpolace a metody nejmenších čtverců.