Aproximace funkcí

Chceme „vzoreček“

Známe:

- celý průběh funkce (ale výpočet je pomalý)
- hodnoty ve vybraných bodech, příp. i derivace

Kvalita údajů:

- známe přesně (máme algoritmus)
- známe přibližně (experiment či simulace)

Metody:

- Taylor (McLaurin) / Padé (racionální lomená funkce), Thiele
- interpolace
- splajny
- ortogonální systémy funkcí
- Čebyšovova nejlepší (minimax) aproximace
- metoda nejmenších čtverců – fitování, korelace, regrese

Henri Eugène Padé (1863–1953)

credit: Wikipedia

Taylorova řada

Taylorův rozvoj je okolo obecné hodnoty x_0.
MacLaurinův rozvoj je okolo $x_0 = 0$.
Musí existovat všechny derivace (v $\mathbb{R}$ nebo $\mathbb{C}$):

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n$$

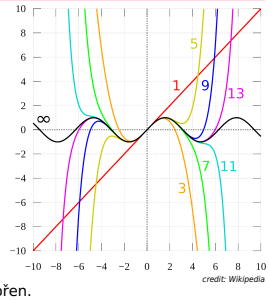
Funkce je **analytická** na $I = (a,b) \in \mathbb{R}$, jestliže $\forall x_0 \in I$ existuje Taylorův rozvoj v x_0 a ten konverguje v nějakém okolí x_0.

mmpc3.mw
mmpc3/3a-Taylor.py

- Přesné blízko $x = 0$.
- Čím větší x, tím menší přesnost.
- Konvergence není zaručena, např.:

$$f(x) = \begin{cases} \exp(-1/x) & \text{for } x > 0, \\ 0 & \text{for } x \le 0 \end{cases}$$

je hladká (všechny derivace v $x = 0$ jsou 0), ale není analytická (nulový poloměr konvergence Taylorovy řady).
Ale v $\mathbb{C}$ je nespojitá v $x = 0 + 0i$.



credit: Wikipedia

Příklad. Studujte konvergenci (částečné součty) pro Taylorovy řadu funkce $\sin(x)$ v $x = 0$. Vypočtěte nejmenší kladný kořen.

Padéova aproximace

Padéova aproximace funkce $f(x)$ v bodě $x = 0$ je racionální lomená funkce

$$f(x) \approx \frac{P_k(x)}{P_{n-k}(x)}, \quad P_m(x) = \sum_{i=0}^{m} a_i x^i$$

která má stejné derivace jako f do $f^{(n)}(0)$ (tj. stejný Taylorův rozvoj).

Přesné blízko $x = 0$, pro větší x přesnost prudce klesá.

Často (ale ne vždy) je Padéův rozvoj přesnější než Taylorův rozvoj stejného řádu.

Výpočet Padéovy aproximace:

- z Taylorova rozvoje obou stran rovnice a výpočtem koeficientů
- na základě Thielovy věty pro řetězový zlomek

mmpc3.mw (Taylor+Padé)
mmpc3/3b-Pade.py

Použití:

- zrychlení konvergence (např. viriálové stavové rovnice a odhad vyšších viriálových koeficientů)

Řetězový zlomek (continued fraction)

Lze převést na racionální lomenou funkci a zpět. Např.:

$$a_0 + \cfrac{x}{a_1 + \cfrac{x}{a_2 + \cfrac{x}{a_3}}} = a_0 + \frac{x\,|}{|a_1} + \frac{x\,|}{|a_2} + \frac{x\,|}{|a_3}$$

alternativní zápis: $a_0 + \mathop{\mathrm{K}}_{i=1}^{3} \frac{x}{a_i}$

Příklad nekonečného řetězového zlomku

$$\arctan x = \frac{x|}{|1} + \frac{1^2x^2|}{|3} + \frac{2^2x^2|}{|5} + \frac{3^2x^2|}{|7} + \cdots \quad \text{konverguje pro } x \in \mathbb{R}$$

Taylorův rozvoj:

$$\arctan x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} + - \cdots \quad \text{konverguje pro } x \le 1$$

Příklad nekonečného řetězového zlomku

$$\tan x = \frac{x|}{|1} - \frac{x^2|}{|3} - \frac{x^2|}{|5} - \frac{x^2|}{|7} - \cdots \quad \text{konverguje pro } x \in \mathbb{R}$$

Taylorův rozvoj:

mmpc3.mw
mmpc3/3c-contfrac.py

$$\tan x = x + \frac{x^3}{3} + \frac{2x^5}{15} + \frac{17x^7}{315} + \cdots \quad \text{konverguje pro } x \le \pi/2$$

Výpočet polynomu

Hornerovo schéma:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + x(a_3 + \ldots)))$$

Rekurzivní zápis:

$$\begin{aligned} P &:= a_n \\ P &:= xP + a_{n-1} \\ P &:= xP + a_{n-2} \\ &\vdots \\ P &:= xP + a_0 \end{aligned}$$

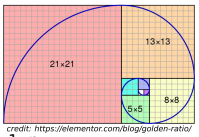
- je potřeba n násobení a n sčítání
- pro P_4 stačí 3 násobení a 5 sčítání, pro P_5 stačí 4 násobení a 5 sčítání
  - dnes v $\mathbb{R}$ žádná (velká) výhoda
  - vhodné pro $\mathbb{C}$, případně matice aj., kdy je násobení pomalejší než sčítání

Pozn.: násobení v $\mathbb{C}$: 4 násobení + 2 sčítání/odčítání nebo 3 násobení + 5 sčítání/odčítání
$A = ac-bd$, $B = ad+bc$; Karatsuba: $S_1 = ac$, $S_2 = bd$, $S_3 = (a+b)(c+d)$, $A = S_1 - S_2$, $B = S_3 - S_1 - S_2$

Výpočet řetězového zlomku

Přímý výpočet:

$$f_n = a_0 + \frac{b_1\,|}{|a_1} + \frac{b_2\,|}{|a_2} + \cdots + \frac{b_n\,|}{|a_n}$$



credit: https://elementor.com/blog/golden-ratio/

Eukleides; Cataldi; Wallis, Euler:

$$\begin{aligned} A_{-1} &:= 0, & B_{-1} &:= 1 \\ A_0 &:= 1, & B_0 &:= a_0 \\ A_j &:= a_j A_{j-1} + b_j A_{j-2}, & B_j &:= a_j B_{j-1} + b_j B_{j-2}, \quad j = 1..n \end{aligned}$$

$$f_n = \frac{B_n}{A_n}$$

- v nekonečném zlomku snadno zvětšíme n a sledujeme konvergenci
- A_j, B_j rychle rostou a mohou přetéct

Příklady: zlatý řez $\varphi = 1 + 1/\varphi$

$$\varphi = \frac{\sqrt{5}+1}{2} = 1 + \frac{1|}{|1} + \frac{1|}{|1} + \frac{1|}{|1} + \cdots; \quad \text{aproximace: } 1, 2, \frac{3}{2}, \frac{5}{3}, \frac{13}{8}, \frac{21}{13}, \ldots$$

$$\sqrt{2} = 1 + \frac{1|}{|2} + \frac{1|}{|2} + \frac{1|}{|2} + \cdots; \quad \text{aproximace: } 1, \frac{3}{2}, \frac{5}{3}, \frac{7}{5}, \frac{17}{12}, \frac{41}{29}, \ldots$$

Výpočet řetězového zlomku: důkaz indukcí

- Pro $n = 1$:

$$f_1 = 1 + \frac{b_1}{a_1} = \frac{a_0 a_1 + b_1}{a_1} = \frac{a_0 B_0 + b_1 B_{-1}}{a_0 A_0 + b_1 A_{-1}}$$

kde jsme dosadili počáteční hodnoty $A_{-1} = 0, B_{-1} = 1, A_0 = 1, B_0 = a_0$

- Nechť

$$f_n = \frac{B_n}{A_n} = \frac{a_n B_{n-1} + b_n B_{n-2}}{a_n A_{n-1} + b_n A_{n-2}}$$

Provedeme substituci $a_n \to a_n + b_{n+1}/a_{n+1}$, čímž získáme f_{n+1}:

$$f_{n+1} = a_0 + \frac{b_1\,|}{|a_1} + \frac{b_2\,|}{|a_2} + \cdots + \frac{b_n\,|}{|a_n} + \frac{b_{n+1}\,|}{|a_{n+1}}$$

$$= \frac{a_n B_{n-1} + \frac{b_{n+1}}{a_{n+1}} B_{n-1} + b_n B_{n-2}}{a_n A_{n-1} + \frac{b_{n+1}}{a_{n+1}} A_{n-1} + b_n A_{n-2}} = \frac{B_n + \frac{b_{n+1}}{a_{n+1}} B_{n-1}}{A_n + \frac{b_{n+1}}{a_{n+1}} A_{n-1}} = \frac{a_{n+1} B_n + b_{n+1} B_{n-1}}{a_{n+1} A_n + b_{n+1} A_{n-1}}$$

což je stejný rekurzivní vztah pro $n \to n+1$.

Thielova věta

je analogií Taylorovy věty pro řetězové zlomky.

$$f(x) = f(0) + \frac{x\,|}{|r_1(0)} + \frac{x\,|}{|r_2(0)} + \frac{x\,|}{|r_3(0)} + \cdots$$

kde počítáme rekurzivně:

$$\begin{aligned} R_{-1} &= 0 \\ R_0 &= f(x) \\ r_0 &= 1/f'(x) \\ \hline R_j(x) &= R_{j-2}(x) + r_{j-1}(x) \\ r_j(x) &= \frac{j+1}{R_j'(x)} \end{aligned}$$

Příklad: $\ln(1+x)$

$$\begin{aligned} R_0 &= \ln(1+x) \\ r_0 &= 1/(1/(1+x)) = 1 + x \overset{x=0}{=} \boxed{1} \\ R_1 &= R_{-1} + r_0 = 1 + x \\ r_1 &= 2/(1+x)' \overset{x=0}{=} \boxed{2} \\ R_2 &= R_0 + r_1 = \ln(1+x) + 2 \\ r_2 &= \frac{3}{R_2'(x)} = 3(1+x) = \frac{3}{1/(1+x)} = 3(1+x) \overset{x=0}{=} \boxed{3} \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$r_{2n} = 2n+1, \; r_{2n+1} = 2/(n+1)$$

$$\ln(1+x) = \frac{x|}{|1} + \frac{x\,|}{|2/1} + \frac{x|}{|3} + \frac{x\,|}{|2/2} + \frac{x|}{|5} + \frac{x\,|}{|2/3} + \cdots$$

Aproximace pomocí ortogonálních funkcí

Uvažujme funkce $f(x)$ integrovatelné s kvadrátem na uzavřeném intervalu $[a,b]$.
Buď $\{u_i(x)\}_0^\infty$ úplný systém reálných ortonormálních funkcí (báze) na tomto intervalu. Pak

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i u_i(x), \quad \text{kde } c_i = \int_a^b f(x) u_i(x) \mathrm{d}x$$

Konverguje „skoro všude“, problémy viz dále – úplný popis druhů konvergence je dost složitý.

Označme částečné součty jako $f_n(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i u_i(x)$.

Koeficienty c_i pak minimalizují následující „chybu“ aproximace (integrál kvadrátů odchylek)

$$\min_{c_i} \int_a^b |f_n(x) - f(x)|^2 \mathrm{d}x \qquad (1)$$

Poznámky:

- Pro aproximaci jisté třídy ubývajících funkcí lze uvažovat nevlastní interval.
- Lze použít i skalární součin s váhou (viz Čebyšov dále).

Koeficienty jsou optimální

Koeficienty c_i minimalizují následující “chybu” aproximace (integrál kvadrátů odchylek)

$$\min_{c_i} \int_a^b |f_n(x) - f(x)|^2 \mathrm{d}x \qquad (2)$$

Důkaz. Funkci $f_n(x)$ napíšeme ve tvaru

$$f_n(x) = \sum_{i=0}^{n} (c_i + \delta_i) u_i(x), \quad \text{kde } c_i = \int_a^b f(x) u_i(x) \mathrm{d}x$$

Budeme hledat δ_i ($i = 0, 1, \ldots, n$) tak, aby (2) bylo minimální. Pokud dodefinujeme $\delta_i = -c_i$ pro $i > n$, máme

$$f_n(x) - f(x) = \sum_{i=0}^{n} (c_i + \delta_i) u_i(x) - \sum_{i=0}^{\infty} c_i u_i(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \delta_i u_i(x)$$

$$\int_a^b |f_n(x) - f(x)|^2 \mathrm{d}x = \int \left(\sum_{i=0}^{\infty} \delta_i u_i(x) \right)^2 \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{\infty} \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{n} \delta_i^2 + \sum_{i=n+1}^{\infty} c_i^2$$

Minimum je dosaženo pro $\delta_i = 0$, $i = 0, 1, \ldots, n$.

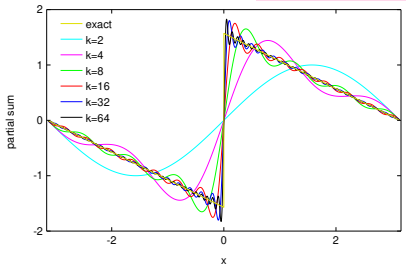
Příklad – Fourierova řada pro skokovou funkci

Fourierova řada pro funkce $f(x), x \in [0, 2\pi]$ takové, že existuje $\int_0^{2\pi} |f|^2 dx$:

- báze = $\{1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x \ldots\}$ resp. $\{e^{nix}\}$ v $\mathbb{C}$
- dobré pro „dostatečně hladké“ periodické funkce
- pro numerické účely často nevhodné: pomalé sin, cos (trik: $e^{nix} = (e^{ix})^n$)

Pro $m > 0$ definujeme: $\mathrm{mod}(x, m) = x - km$, kde k je největší celé číslo takové, že $x - km \geq 0$.

pila: $$\frac{\pi - \mathrm{mod}(x, 2\pi)}{2} = \sum_{i=1}^{k} \frac{\sin(ix)}{i},$$



Gibbsův jev:
Skok se (v limitě $n \to \infty$) přešvihne na každé straně o

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \frac{\sin x}{x} dx - \frac{1}{2} \doteq 0.0895$$

krát velikost skoku.

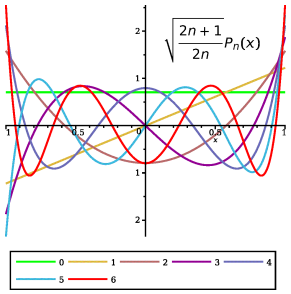
Aproximace pomocí ortogonálních polynomů poprvé

Zvolme interval $[-1, 1]$ a zkusme ortogonalizovat polynomy $\{1, x, x^2, \ldots\}$ (Gram–Schmidt). Až na normalizaci získáme **Legendreovy polynomy**. Je více ekvivalentních vzorců, např. pomocí generující funkce:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n$$

Pak normalizace je:

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}$$



Rozvoj:

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^{n} c_i P_i(x)$$

mmpc3.mw
mmpc3/3[de]-*py

$$c_i = \sqrt{\frac{2i+1}{2}} \int_{-1}^{1} f(x) P_i(x)$$

- aproximace minimalizuje integrál kvadrátu odchylek (2)
- obvykle numericky nevhodné – větší chyba na krajích intervalu

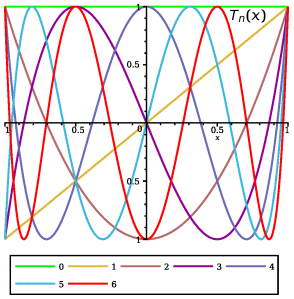
Čebyšovovy polynomy (prvního druhu)

Anglicky: Pafnuty Lvovich Chebyshev Rusky: Пафну́тий Льво́вич Чебышёв
Česky: Pafnutij Lvovič Čebyšov (často nesprávně Čebyšev)

Ortogonální na intervalu $[-1, 1]$ s váhou $1/\sqrt{1-x^2}$

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_n(x) T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } n \neq m \\ \pi & \text{pro } n = m = 0 \\ \pi/2 & \text{pro } n = m \neq 0 \end{cases}$$



Rozvoj:

$$f(x) \approx \frac{c_0}{2} + \sum_{i=1}^{n} c_i T_i(x)$$

mmpc3.mw
mmpc3/3[fg]-*py

$$c_i = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{f(x) T_i(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{2}{\pi}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\sin\theta) T_i(\sin\theta) d\theta$$

- blízko nejlepší (minimax) aproximace

Čebyšovova nejlepší (minimax) aproximace

Je to aproximace minimalizující maximální chybu,

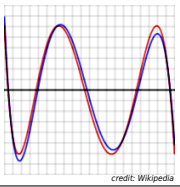
$$\min_{c_i} [\max_x |f(x) - P_n(x)|],$$

kde $P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$ je polynom s $n+1$ koeficienty.

- vždy existuje
- odchylka $[f(x) - P_n(x)]$ má (je-li nenulová a nejsou-li koeficienty 0 z důvodu symetrie):
  - $n+2$ extrémů, kde se střídají maxima a minima = **alternanta**
  - $n+1$ nulových bodů
  - aproximace pomocí Čebyšovových polynomů je obvykle dost blízko

Obdobně pro racionální lomenou funkci (až singulární případy).

Příklad: Funkce $\ln x$ v intervalu $[2, 4]$ aproximovaná Čebyšovovými polynomy do x^4 (—) a nejlepší aproximace (—); zobrazena je odchylka od přesné funkce.



Interpolace

Funkci známe v diskrétních bodech, (x_i, y_i), $i = 1..n$.
Chceme proložit polynomem.
Existuje jediný polynom řádu $n-1$ (do x^{n-1}, tj. n koeficientů)
= **Lagrangeův interpolační polynom**:

$$\begin{aligned} y(x) &= y_1 \frac{\cancel{(x_1 - x)}(x_2 - x)(x_3 - x)\cdots(x_n - x)}{\cancel{(x_1 - x_1)}(x_2 - x_1)(x_3 - x_1)\cdots(x_n - x_1)} \\ &+ y_2 \frac{(x_1 - x)\cancel{(x_2 - x)}(x_3 - x)\cdots(x_n - x)}{(x_1 - x_2)\cancel{(x_2 - x_2)}(x_3 - x_2)\cdots(x_n - x_2)} \\ &\vdots \\ &+ y_n \frac{(x_1 - x)(x_2 - x)(x_3 - x)\cdots\cancel{(x_n - x)}}{(x_1 - x_n)(x_2 - x_n)(x_3 - x_n)\cdots\cancel{(x_n - x_n)}} \end{aligned}$$

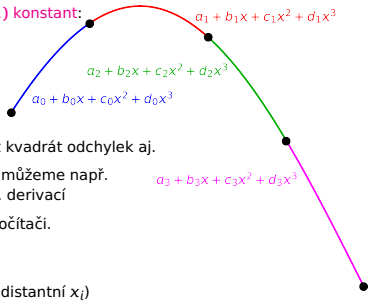
- Lze zjednodušit pro ekvidistantní argumenty.
- Nepřesné u krajních bodů v případě ekvidistantních dělících bodů.
- Lze rozšířit pro známé derivace dané funkce.

mmpc3.mw
mmpc3/3[ij]-*py

Splajny (*splines*)

Funkci známe v diskrétních bodech, (x_i, y_i), $i = 1..n$; někdy známe i derivace.
Chceme proložit po částech polynomy na intervalech $[x_i, x_{i+1}]$ ($n-1$ intervalů).

Pro nejčastější **kubické splajny**: celkem $4(n-1)$ konstant:



- prochází body: $2(n-1)$ podmínek
- má spojité derivace: $n-2$ podmínek
- má spojité 2. derivace: $n-2$ podmínek

Zbývají 2 konstanty, můžeme např. požadovat druhé derivace na konci = 0 nebo minimalizovat kvadrát odchylek aj.

Pokud numericky aproximujeme známou funkci, můžeme např. místo spojitosti 2. derivací požadovat hodnoty 1. derivací

- Užitečné pro aproximaci složitých funkcí na počítači.

plusy: jednoduché
málo operací v řádové čárce
minusy: je potřeba počítat i (pomalé pro neekvidistantní x_i)
rozsáhlé tabulky se nemusí vejít do cache

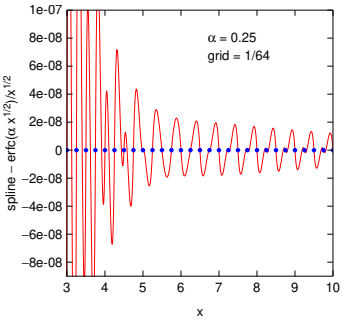
Case study: hyperbolické splajny

Pro Ewaldovu sumaci je potřeba funkce (a též její derivace)

$$e(x) = \frac{\mathrm{erfc}(\alpha\sqrt{x})}{\sqrt{x}}$$

kde α je parametr a

$$\mathrm{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp(-t^2) dt$$

je doplňková chybová funkce (complementary error function). Parametr $x = r^2$, kde r je vzdálenost nábojů. Funkce rychle ubývá. Možná implementace je pomocí splajnů s funkcí v intervalu

$$A + \frac{B}{C + x}$$