

Aproximace funkcí

1/16 mmfch3

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

Výpočet řetězového zlomku

6/16 mmfch3

Přímý výpočet:

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

Eukleidův algoritmus:

$$A_{-1} := 0, \quad B_{-1} := 1$$

$$A_0 := 1, \quad B_0 := a_0$$

$$A_j := a_j A_{j-1} + b_j A_{j-2}, \quad B_j := a_j B_{j-1} + b_j B_{j-2}, \quad j = 1..n$$

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

algoritmus je rekurzivní, snadno lze zvětšit n

A_j, B_j rychle rostou a mohou přetéct

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

$$\varphi = \frac{\sqrt{5} + 1}{2} = 1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}}$$

aproximace: $1, 2, \frac{3}{2}, \frac{5}{3}, \frac{8}{5}, \frac{13}{8}, \frac{21}{13}, \dots$

$$\sqrt{2} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \dots$$

aproximace: $1, \frac{3}{2}, \frac{5}{3}, \frac{7}{5}, \frac{17}{12}, \frac{41}{29}, \dots$

Taylorova řada

2/16 mmfch3

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}):

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x-x_0)^n$$

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

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

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

Příklad. Studujte konvergenci (částečné součty) pro Taylorovy řady funkce $\sin(x)$ v $x = 0$ (viz mmfch3.mw).

Thielova věta

7/16 mmfch3

je analogií Taylorovy věty pro řetězové zlomky.

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

kde počítáme rekurzivně:

$$R_{-1} = 0$$

$$R_0 = f(x)$$

$$r_0 = 1/f'(x)$$

$$R_j(x) = \frac{R_{j-2}(x) + r_{j-1}(x)}{r_j(x)}$$

$$r_j(x) = \frac{j+1}{R_j'(x)}$$

Příklad: $\ln(1+x)$

$$R_0 = \ln(1+x)$$

$$r_0 = 1/(1+x) = 1 + x^{-1} \quad [1]$$

$$R_1 = R_{-1} + r_0 = 1 + x$$

$$r_1 = 2/(1+x)^2 = 2 - 4x + 6x^2 - \dots \quad [2]$$

$$R_2 = R_0 + r_1 = \ln(1+x) + 2 - 4x + 6x^2 - \dots$$

$$r_2 = \frac{3}{R_2'(x)} = 3(1+x) = 3(1+x)^{-1} \quad [3]$$

$$\vdots$$

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

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

Padé

3/16 mmfch3

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

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

kteřá 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

Použití:

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

mmfch3.mw: Taylor expansion and the Padé approximant

Aproximace pomocí ortogonálních funkcí

8/16 mmfch3

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

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

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)

$$\min_{c_i} \int_a^b |f_n(x) - f(x)|^2 dx \quad (1)$$

Poznámky:

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

Řetězový zlomek (continued fraction)

4/16 mmfch3

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

$$a_0 + \frac{x}{a_1 + \frac{x}{a_2 + \frac{x}{a_3}}}$$

Nekonečný řetězový zlomek (příklad)

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

Taylorův rozvoj:

$$\arctan x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \dots \quad \text{konverguje pro } x \leq 1$$

mmfch3.mw: Taylor expansion and the continued fraction

Koeficienty jsou optimální

9/16 mmfch3

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

$$\min_{c_i} \int_a^b |f_n(x) - f(x)|^2 dx \quad (2)$$

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

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

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

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

$$\int_a^b |f_n(x) - f(x)|^2 dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^n \delta_i u_i(x) \right)^2 dx = \sum_{i=0}^n \delta_i^2 + \sum_{i=0}^n \sum_{j=0, j \neq i}^n c_i^2$$

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

Výpočet polynomu

5/16 mmfch3

Hornerovo schéma:

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

Rekurzivní zápis:

$$P := a_n$$

$$P := xP + a_{n-1}$$

$$P := xP + a_{n-2}$$

$$\vdots$$

$$P := xP + a_0$$

- 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: $S_1 = ac, S_2 = bd, S_3 = (a+b)(c+d), A = S_1 - S_2, B = S_3 - S_1 - S_2$

Příklad – Fourierova řada

10/16 mmfch3

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

- báze = $\{1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x, \dots\}$
- dobré pro „dostatečně hladké“ periodické funkce
- pro numerické účely málokdy vhodné (pomalé sin, cos)

pila: $\frac{\pi}{2} - \pi \left[\frac{x}{2\pi} - \text{floor} \left(\frac{x}{2\pi} \right) \right] = \sum_{i=1}^k \frac{\sin(ix)}{i}$

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

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

krát velikost skoku

Aproximace pomocí ortogonálních polynomů poprvé

11/16
mmfch3

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

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

Pak normalizace je:

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

Rozvoj:

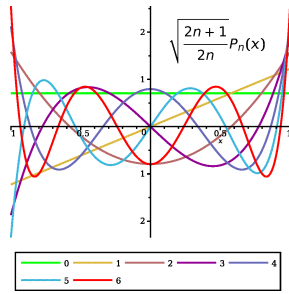
$$f(x) \approx \sum_{i=0}^n c_i P_i(x)$$

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

● aproximace minimalizuje integrál kvadrátu odchylek (2)

● obvykle numericky nevhodné – větší chyba na krajích intervalu

mmpc3.mw: Legendre 2x



Interpolace

14/16
mmfch3

Funkci známe v diskretních 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**:

$$y(x) = y_1 \frac{(x_2-x)(x_3-x)\dots(x_n-x)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)\dots(x_1-x_n)} + y_2 \frac{(x_1-x)(x_3-x)\dots(x_n-x)}{(x_1-x_2)(x_2-x_3)\dots(x_2-x_n)} + \dots + y_n \frac{(x_1-x)(x_2-x)(x_3-x)\dots(x_{n-1}-x)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)\dots(x_1-x_n)}$$

● Lze zjednodušit pro ekvidistanční argumenty

● Nepřesné u krajních bodů v případě ekvidistančních dělicích bodů

● Lze rozšířit pro známé derivace

mmpc3.mw: Interpolation by a polynomial and a rational function

Čebyšovovy polynomy

12/16
mmfch3

Anglicky: Pafnuty Lvovich Chebyshev Ruský: Пафну́тий Льво́вич Чебышёв

Česky: Pafnutij Lvovič Čebyšov (často nesprávně Čebyšev)

Ortogonalní 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:

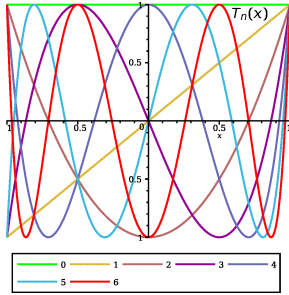
$$f(x) \approx \frac{c_0}{2} + \sum_{i=1}^n c_i T_i(x)$$

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

$$= \frac{2}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\sin \theta) T_i(\sin \theta) d\theta$$

● blízko nejlepší (minimax) aproximace

mmpc3.mw: Chebyshev 2x



Splajny (splines)

15/16
mmfch3

Funkci známe v diskretních bodech, (x_i, y_i) , $i = 1..n$.

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)

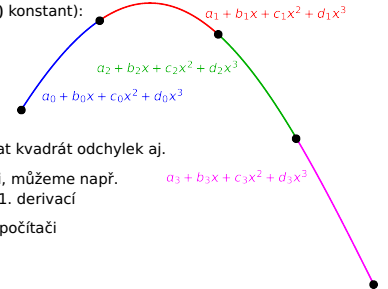
Zbývají 2 konstanty, můžeme např. požadovat druhé derivace na konci = 0 nebo minimalizovat kvadrát odchylek aj.

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 neekvidistanční x_i) rozsáhlé tabulky se nemusí vejít do cache



Čebyšovova nejlepší (minimax) aproximace

13/16
mmfch3

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):

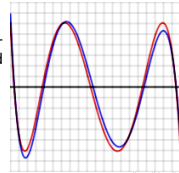
● $n+2$ extrémů, kde se střídají maxima a minima = **alternanta**

● $n+1$ 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



credit: Wikipedia

Case study: hyperbolické splajny

[plot/ertest.sh] 16/16
mmfch3

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

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

kde α je parametr a

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

je doplňková chybová funkce (complementary error function). Funkce rychle ubývá. Možná implementace je pomocí splajnů s funkcí v intervalu

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

