

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

**Taylorův rozvoj** je okolo obecné hodnoty  $x_0$ .

**MacLaurinův rozvoj** je okolo  $x_0 = 0$ .

Musí existovat všechny derivace (v  $\mathbb{R}$  nebo  $\mathbb{C}$ ):

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

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

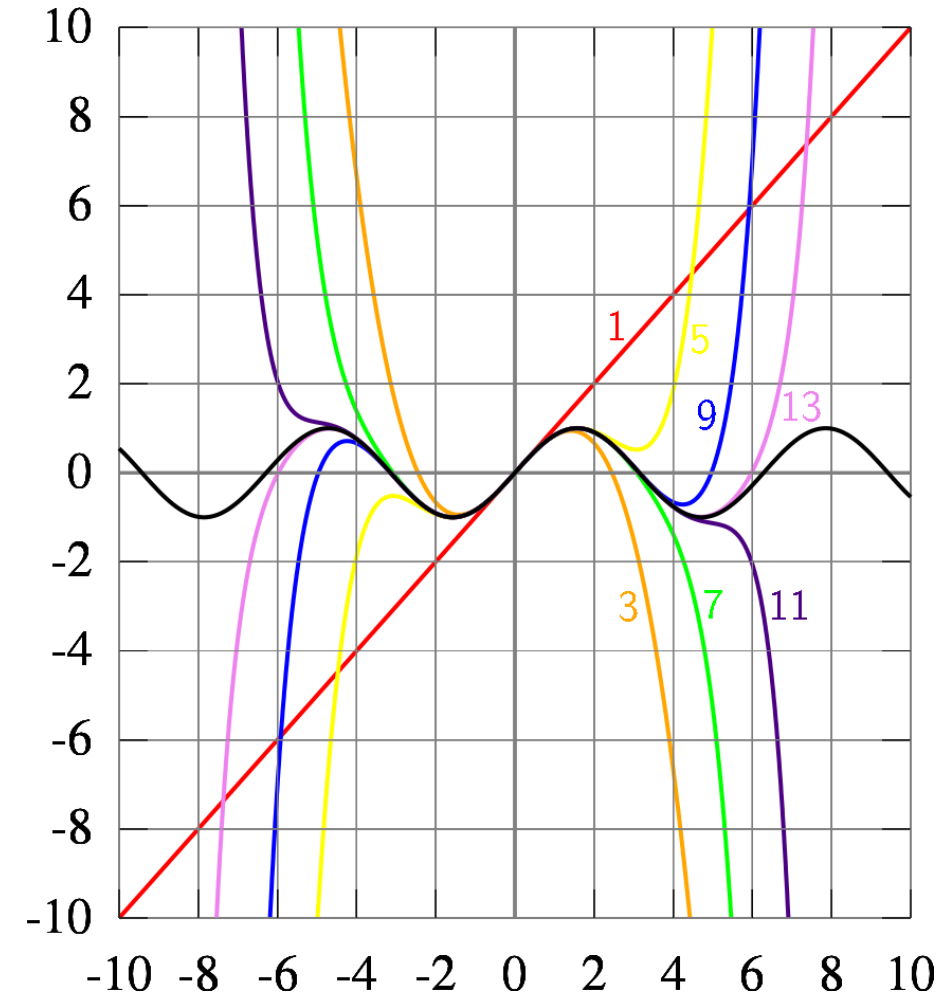
$$f(x) = \begin{cases} \exp(-1/x) & \text{for } x > 0, \\ 0 & \text{for } x \leq 0 \end{cases}$$

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 řadu funkce  $\sin(x)$  v  $x = 0$  (viz [mmpc3.mw](#)).

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  $x_0$ .



**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

### **Použití:**

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

[mmpc3.mw: Taylor expansion and the Padé approximant](#)

Lze převést na racionální lomenou funkci a zpět.

Např.:

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

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

## 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:

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

● 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

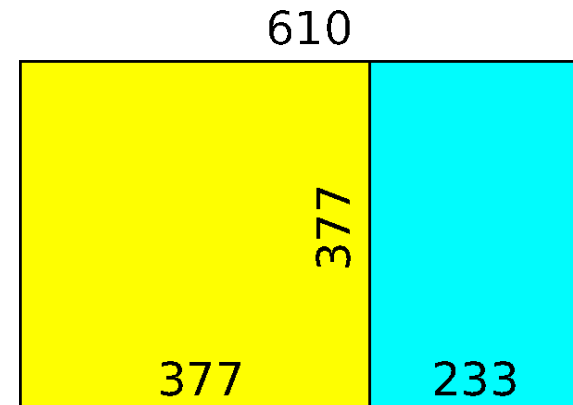
● vhodné pro  $\mathbb{C}$ , případně matice aj., kdy je násobení pomalejší než sčítání

Pozn.: násobení v  $\mathbb{C}$ : 4 násobení + 2 sčítání/odčítání nebo 3 násobení + 5 sčítání/odčítání

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

## Přímý výpočet:

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



## Eukleidův algoritmus:

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

● algoritmus je rekurzivní, snadno lze zvětšit  $n$

●  $A_j, B_j$  rychle rostou a mohou přetéct

## Příklady:

zlatý řez  $\varphi = 1 + 1/\varphi$

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

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

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:

**Příklad:**  $\ln(1+x)$

$$R_{-1} = 0$$

$$R_0 = f(x)$$

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

---

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

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

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

$$r_0 = 1/(1/(1+x)) = 1+x \stackrel{x=0}{=} 1 \quad \boxed{1}$$

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

$$r_1 = 2/(1+x)' \stackrel{x=0}{=} 2 \quad \boxed{2}$$

$$R_2 = R_0 + r_1 = \ln(1+x) + 2$$

$$r_2 = \frac{3}{R'_2(x)} = 3(1+x) = \frac{3}{1/(1+x)} = 3(1+x) \stackrel{x=0}{=} 3 \quad \boxed{3}$$

⋮

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

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

Uvažujme 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)

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

## Poznámky:

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



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

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

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

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

Fourierova řada pro funkci  $f(x)$ ,  $x \in [0, 2\pi]$  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)

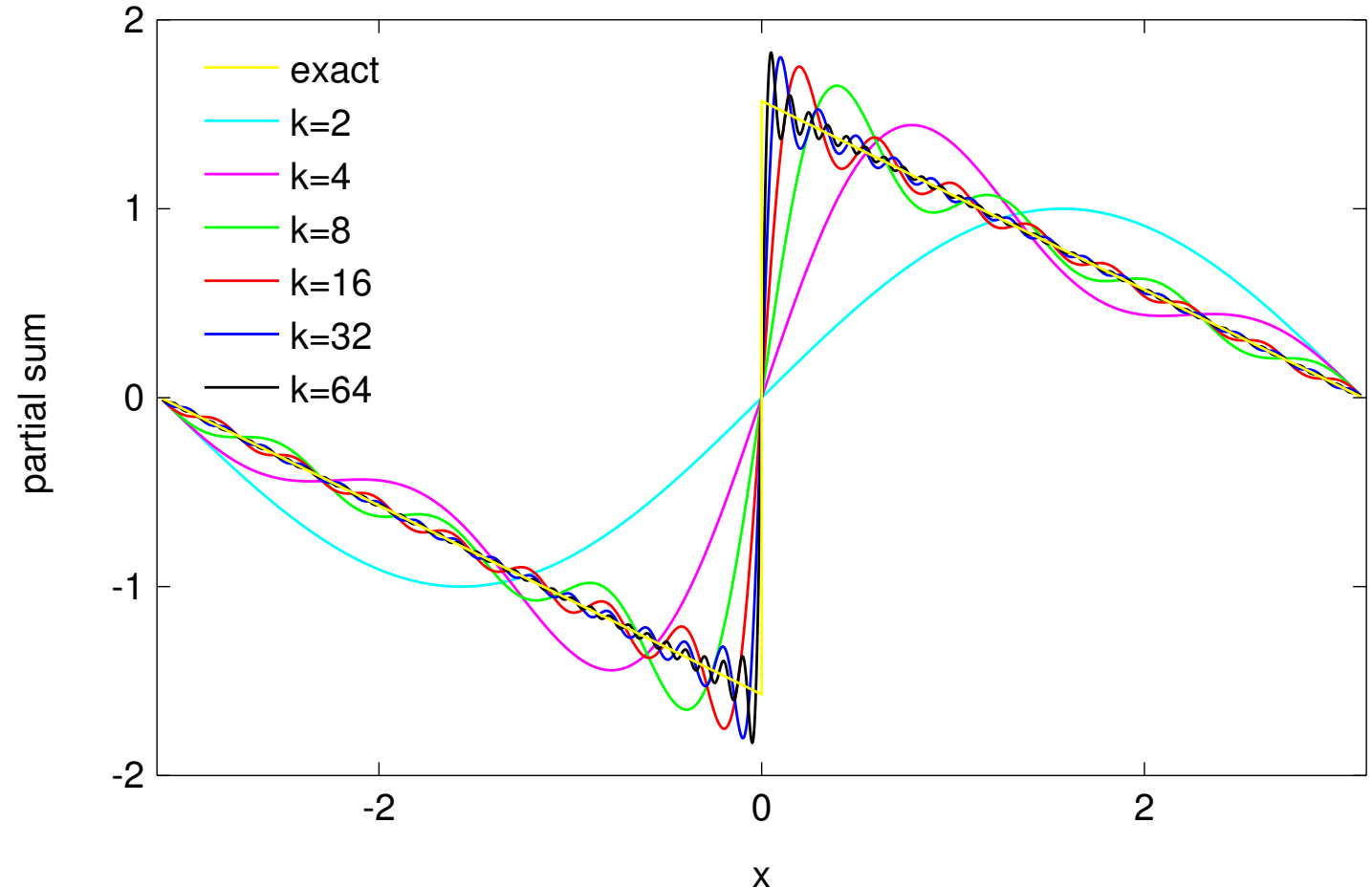
$$\text{pila: } \frac{\pi}{2} - \pi \left[ \frac{x}{2\pi} - \text{floor} \left( \frac{x}{2\pi} \right) \right] = \sum_{i=1}^k \frac{\sin(ix)}{i}$$

## Gibbsův jev:

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

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

krát velikost skoku



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:

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

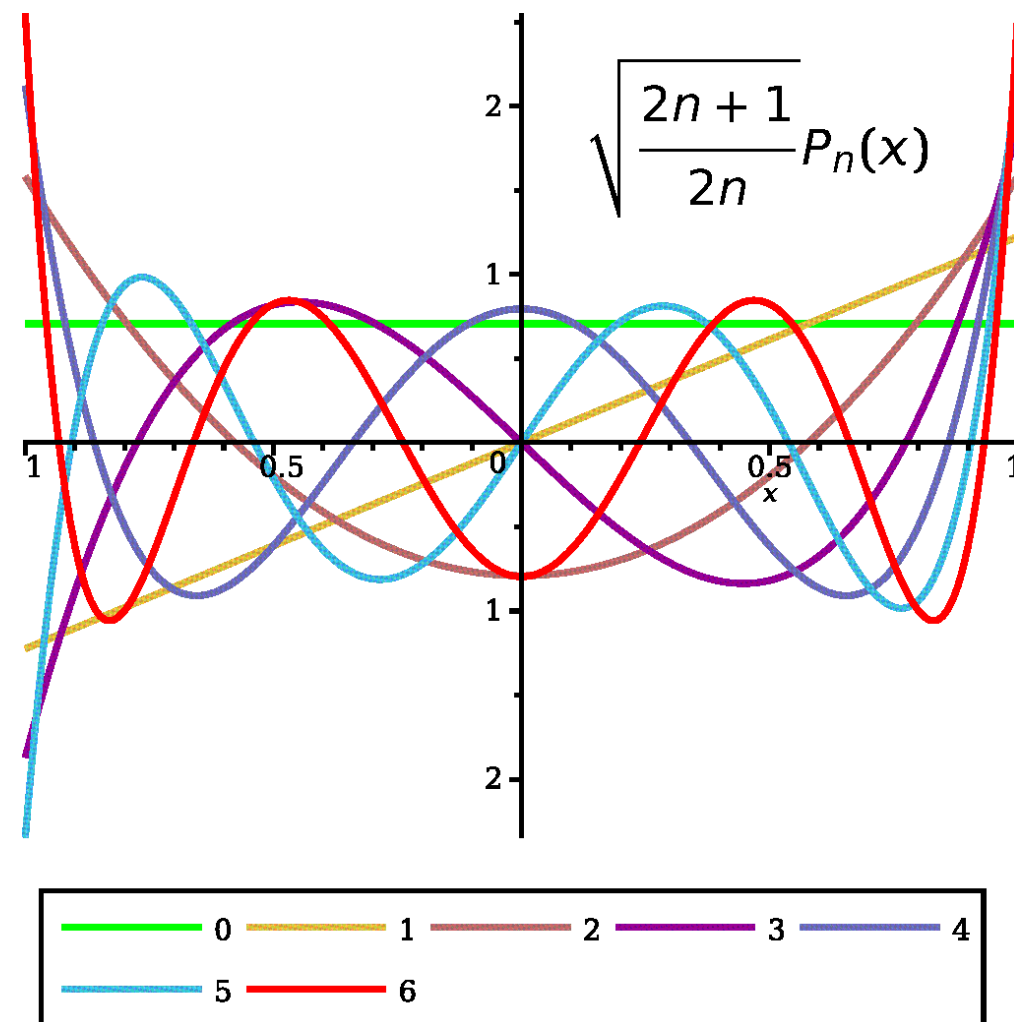
Pak normalizace je:

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

**Rozvoj:**

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

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



● aproximace minimalizuje integrál kvadrátu odchylek (2)

● obvykle numericky nevhodné – větší chyba na krajích intervalu

Anglicky: Pafnuty Lvovich Chebyshev

Rusky: Пафну́тий Льво́вич Чебышёв

Česky: Pafnutij Lvovič Čebyšov (často nesprávně Čebyšev)

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

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

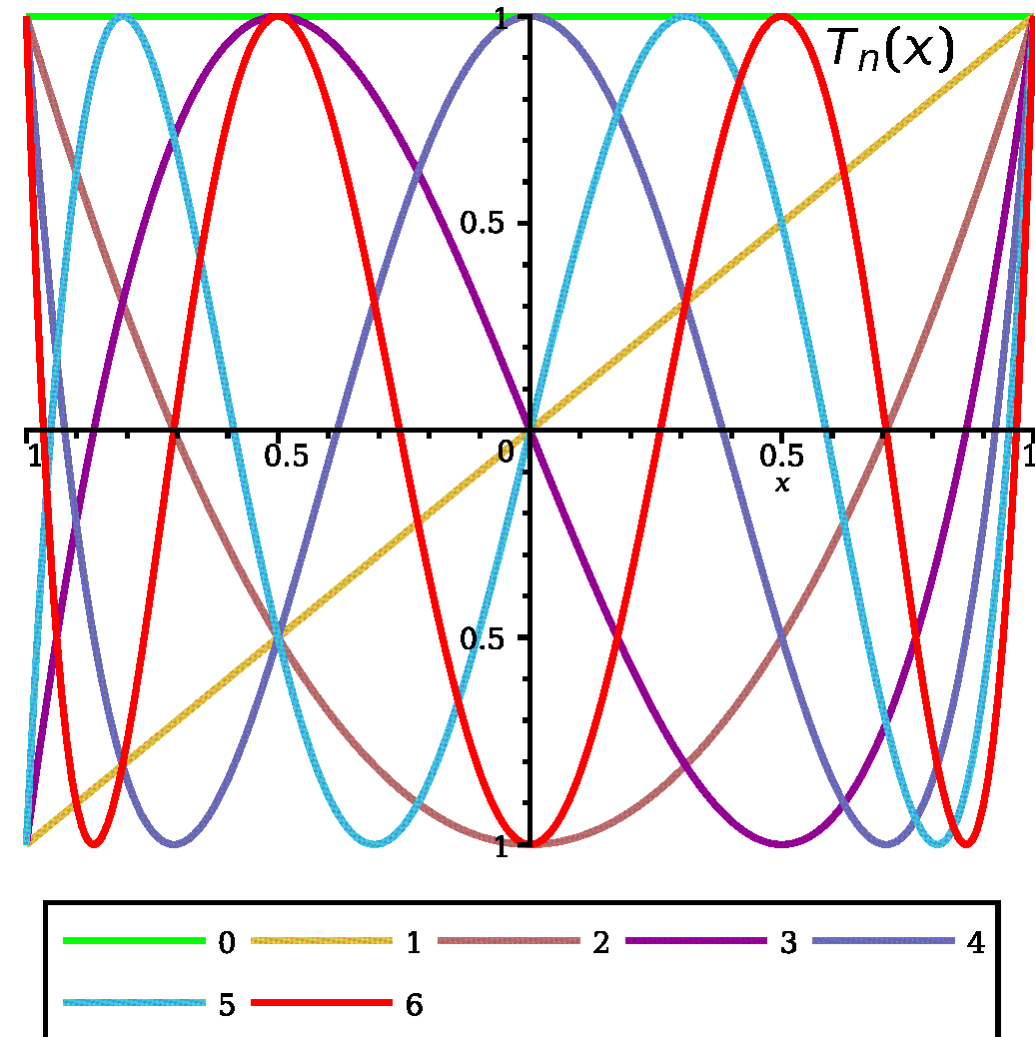
$$\int_{-1}^1 \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } n \neq m \\ \pi & \text{pro } n = m = 0 \\ \pi/2 & \text{pro } n = m \neq 0 \end{cases}$$

**Rozvoj:**

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

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

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



● blízko nejlepší (minimax) aproximace

mmfch3.mw: Chebyshev 2x

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):

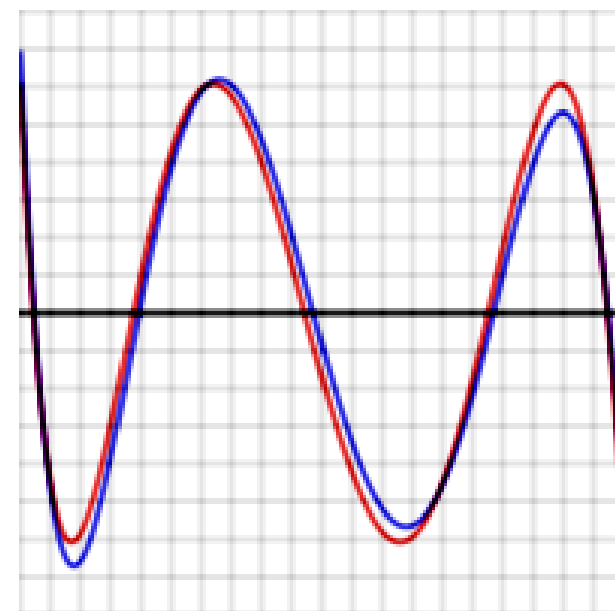
●  $n + 2$  extrémů, kde se střídají maxima a minima = **alternanta**

●  $n + 1$  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



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**:

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

- Lze zjednodušit pro ekvidistantní argumenty
- Nepřesné u krajních bodů v případě ekvidistantních dělicích bodů
- Lze rozšířit pro známé derivace

Funkci známe v diskrétních 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)

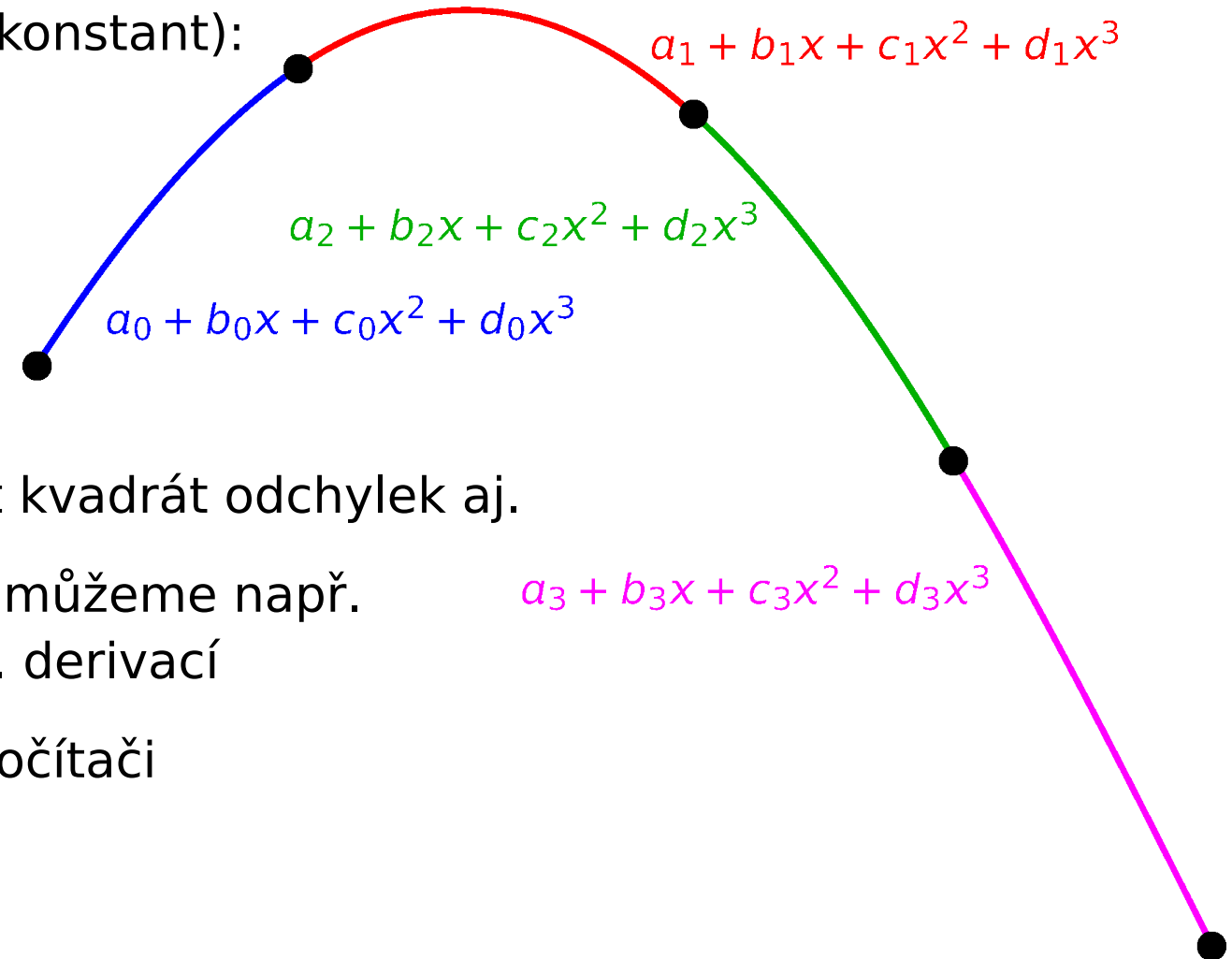
Zbývají 2 konstanty, můžeme např. požadovat druhé derivace na konci = 0 nebo minimalizovat kvadrát odchylek aj.

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 neekvidistantní  $x_i$ )  
rozsáhlé tabulky se nemusí vejít do cache



## Case study: hyperbolické splajny

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

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

kde  $\alpha$  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

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

