Aproximace funkcí

Chceme „vzoreček“

Známe:

- celý průběh funkce
- hodnoty ve vybraných bodech, příp. i derivace

Kvalita údajů:

- známe přesně (máme algoritmus)
- známe přibližně (experiment či simulace) – fitování, korelace, regrese

Metody:

- Taylor (McLaurin) / Padé (racionální lomená funkce), Thiele
- interpolace
- splajny
- orthogonální systémy funkcí
- Čebyševova (nejlepší) aproximace
- metoda nejmenších čtverců

Taylor (MacLaurin)

MacLaurin (po posunutí $x = 0 \to x = x_0$ Taylor)
Musí existovat všechny derivace, v $\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$, . . . :

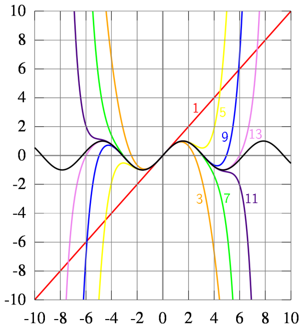
$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n$$

- přesné blízko $x = 0$
- čím větší x, tím menší přesnost
- konvergence není zaručena, např.:

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

je hladká (všechny derivace v $x = 0$ jsou 0), ale není analytická (nulový poloměr konvergence Taylorovy řady)

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



credit: Wikipedia

Padé

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

$$f(x) \approx \frac{P_k(x)}{P_{n-k}(x)}, \qquad P_l(x) = \sum_{i=0}^{l} a_i x^i$$

která má stejné derivace 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)

Řetězový zlomek

Lze převést na racionální lomenou funkci a zpět.

Např.:

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

Nekonečný řetězový zlomek (příklad)

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

Taylorův rozvoj:

$$\arctan x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - + \cdots \qquad \text{konverguje pro } x \leqslant 1$$

Výpočet

Vypočti polynom (přímo):

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_n x^n = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + \ldots)) \quad n \text{ multiplications and } n \text{ additions}$$

NB: pro P_4 stačí 3 násobení a 5 sčítání, pro P_5 stačí 4 násobení a 5 sčítání

Řetězový zlomek (rekurzivně):

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

algoritmus pro jakékoliv n:

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

NB: A_j, B_j mohou přetéct, jsou i další metody

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:

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

Příklad: $\ln(1+x)$

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

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

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

Aproximace pomocí orthogonálních funkcí

Buď $b_n(x)$ úplný systém reálných orthonormálních funkcí (báze) na intervalu $[a, b]$. Pak

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n b_n(x), \qquad \text{kde } a_n = \int_a^b f(x) b_n(x) dx$$

Označme částečné součty jako $f_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i b_i(x)$

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

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

Poznámky:

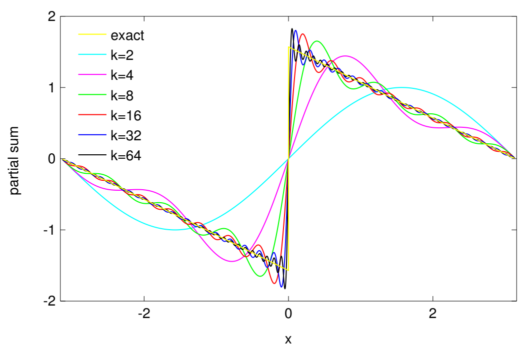
- Pro aproximaci jisté třídy ubývajících funkcí lze uvažovat nevlastní interval, viz `mat-lin2.mw`.
- Lze použít i skalární součin s váhou (viz Čebyšev dále)

Příklad – Fourierova řada

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

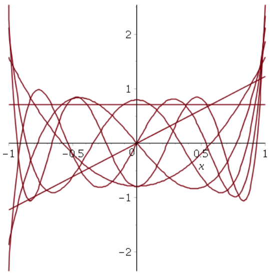
- báze $= \{1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x \ldots\}$
- dobré pro “dostatečně hladké” periodické funkce
- pro numerické účely málokdy vhodné (pomalé sin, cos)

$$\sum_{i=1}^{k} \frac{\sin(ix)}{i}$$



Aproximace pomocí orthogonálních funkcí poprvé

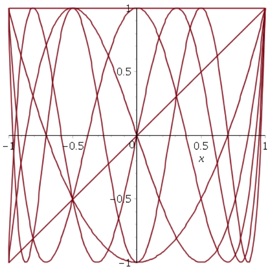
Zvolme interval $[-1,1]$ a zkusme ortho-normalizovat polynomy $\{1, x, x^2, \ldots\}$ (Gram--Schmidt). Získáme Legendreovy polynomy (viz Maple).



- aproximace minimalizuje integrál kvadrátu odchylek (1)
- obvykle numericky nevhodné – větší chyba na krajích intervalu

Čebyševovy polynomy

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



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

Rozvoj:

$$\begin{aligned} f(x) &\approx \frac{c_0}{2} + \sum_{i=1}^{n} c_i T_n(x) \\ c_i &= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^{1} \frac{f(x) T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,dx \end{aligned}$$

Anglicky: Pafnuty Lvovich Chebyshev
Rusky: Пафну́тий Льво́вич Чебышёв
Česky: Pafnutij Lvovič Čebyšev

- blízko nejlepší (minimax) aproximace

Čebyševova nejlepší (minimax) aproximace

Je to aproximace minimalizující maximální chybu:

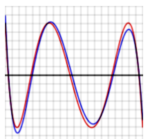
$$\min_{a_i} \left[\max_x |f(x) - P_n(x)| \right]$$

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:
  - $n+2$ extrémů, kde se střídají maxima a minima (alternanta)
  - $n+1$ nulových bodů
  - aproximace pomocí Čebyševových polynomů je obvykle dost blízko

Obdobně pro racionální lomenou funkci

Příklad: $\ln(x)$ v intervalu $[2,4]$ aproximovaná Čebyševovými polynomy do x^4 (—) a nejlepší aproximace ($\mathbb{R}$—); zobrazena je odchylka od přesné funkce



credit: Wikipedia

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**:

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

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

Splajny (splines)

Funkci známe v diskrétních bodech, (x_i, y_i), $i = 1..n$.
Chceme proložit po částech polynomy na intervalech $[x_i, x_{i+1}]$.
Pro nejčastější kubické splajny (celkem $4n$ konstant):

- prochází body ($2n$ podmínek)
- má spojité derivace ($n-1$ podmínek)
- má spojité 2. derivace ($n-1$ 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 (celou část reálného čísla) – někdy pomalé
rozsáhlé tabulky se nemusí vejít do cache