Aproximace funkcí v počítači

- nutnost reprezentace funkcí diskrétně
  - ovšem řada možností – na gridu, v určité bázi (polynomy apod.), řetězovým zlomkem atd.
  - nejčastěji polynomy, případně racionálními funkcemi
    → snadná vyčíslitelnost pomocí základních operací
- ovšem i když použijeme např. polynomy, máme několik možností, jak danou funkci aproximovat, nejběžnější <u>metody aproximace</u> jsou

1) <u>interpolace</u> – hodnoty funkce (případně její derivace) jsou zadány v bodech $x_0, \dots, x_n$ a hledáme funkci $\phi(x)$ z určité třídy funkcí (nejčastěji polynomů) takovou, že $\phi(x_i) = f(x_i)$, pro $i = 0, \dots, n$,
(Lagrangeova interpolace)
případně navíc $\phi^{(k)}(x_i) = f^{(k)}(x_i)$, pro $i = 0, \dots, n$,
(Hermiteova interpolace)
která aproximuje původní funkci $f(x)$ mezi body x_i (interpolace), případně i vně intervalu $\langle x_0, x_n \rangle$ (extrapolace)

2) <u>metoda nejmenších čtverců</u>
- opět hledáme aproximaci $\phi(x)$ funkce $f(x)$ zadané v bodech $x_0, \dots, x_n$, ovšem nyní takovou, že

$$\sum_{i=0}^{n} w_i \left(f(x_i) - \phi(x_i)\right)^2 = \min_{\substack{\text{přes} \\ \forall \psi \text{ z jisté třídy funkcí}}} \sum_{i=0}^{n} w_i \left(f(x_i) - \psi(x_i)\right)^2$$

kde $w_i > 0$ jsou váhy jednotlivých funkčních hodnot

- někdy lze minimalizovat i

$$\int_a^b w(x)\,(f(x)-\phi(x))^2\,dx = \min_{\psi} \int_a^b w(x)\,(f(x)-\phi(x))^2\,dx$$

kde $w(x)$ je (skoro všude) kladná na intervalu $\langle a,b\rangle$

$w \in L^2(\langle a,b\rangle)$

3) <u>Čebyševova aproximace</u> – hledáme $\phi(x)$ takové, že

$$\max_{x\in\langle a,b\rangle} |\phi(x)-f(x)| \le \max_{x\in\langle a,b\rangle} |\psi(x)-f(x)| \text{ pro } \forall \psi$$

z prostoru, kde hledáme ϕ

- volbou různých norem, příp. seminorem, kterými poměřujeme blízkost funkcí, dostáváme různé aproximace
- <u>nejčastěji</u> se používá aproximace <u>polynomy</u> (případně funkcemi, které jsou po částech polynomy – splajny) do určitého stupně n

[Pozn.: z analýzy znáte jednak Taylorův rozvoj

jednak platí Weierstrassova věta:

Nechť $\langle a,b\rangle$ je konečný uzavřený interval a f je spojitá funkce na $\langle a,b\rangle$, tj. $f \in C(\langle a,b\rangle)$, a nechť $\varepsilon > 0$ je libovolně malé. Pak $\exists$ polynom $p(x)$ takový, že $|f(x)-p(x)| < \varepsilon$ pro $\forall x \in \langle a,b\rangle$

- v obou případech ovšem nic nevíme o stupni n polynomu, chceme-li aproximaci s určitou přesností
- stačí spojitost!, i funkce jako $|x|$ lze aproximovat polynomem lib. přesně]

- budeme se zabývat především interpolací, k metodě nejmenších čtverců se vrátíme, až se budeme zabývat přeurčenými systémy lineárních rovnic

Polynomiální interpolace

- nejjednodušší metoda aproximace funkce zadané v bodech
  $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, \dots, n$
  ovšem jde o špatně podmíněnou úlohu a zvláště pro velká n můžeme dostat velmi „divoké" polynomy (Rungeův jev)
- využívá se také např. při odvozování vztahů pro numerickou aproximaci derivace funkce a intergraci funkcí (později)
- obecně platí, že máme-li $f(x)$ zadanou v $n+1$ bodech $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, \dots, n$, které jsou navzájem různé,

  pak existuje jediný polynom stupně n
  $$L_n(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n,$$
  který prochází všemi těmito body, tj. $L_n(x_i) = f(x_i)$,
  neboť pro koeficienty a_i lze sestavit soustavu $n+1$ rovnic
  $$Va = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \vdots & & & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{pmatrix}}_{\text{tzv. Vandermodeho matice,}} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}, \quad \text{kde } f_i = f(x_i)$$
  pro níž platí
  $$\det V = \prod_{i>j} (x_i - x_j) \neq 0 \quad \text{pro } x_i \neq x_j \text{ pro } \forall i,j$$
  a tedy soustava má jediné řešení.

  [Pozn: $\det V$ je totiž polynomem v x_i a má nuly tam, kde je determinant nulový, tj. právě když pro jisté i a j platí $x_i = x_j$ a máme $n(n+1)/2$ možností]

- polynom $L_n(x)$ se obvykle nazývá <u>Lagrangeův interpolační polynom</u> a obvykle se uvádí ve tvaru
  $$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \, l_i(x), \quad \text{kde } l_i(x) = \frac{\prod_{j=0, j\neq i}^{n} (x - x_j)}{\prod_{j=0, j\neq i}^{n} (x_i - x_j)}, \text{ pro něž } l_i(x_j) = \delta_{ij}$$

• Aitkenovo-Nevillovo schéma

- chceme-li spočítat $L_n(x)$ v jednom, nebo v malém počtu bodů, není nutné počítat koeficienty $L_n(x)$, ale lze použít Aitkenovo-Nevillovo schéma, které počítá $L_n(\tilde{x})$ pro konkrétní $\tilde{x}$ přímo z hodnot x_i a f_i pomocí tabulky

$$\begin{array}{c|cccc}
\text{stupeň} & 0 & \xrightarrow{k} 1 & 2 & 3 \\
\hline
x_0 & f_0 = P_0^{(0)} & & & \\
x_1 & f_1 = P_0^{(1)} & P_1^{(01)} & & \\
x_2 & f_2 = P_0^{(2)} & P_1^{(12)} & P_2^{(012)} & \\
x_3 & f_3 = P_0^{(3)} & P_1^{(23)} & P_2^{(123)} & P_3^{(0123)} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \quad \ddots
\end{array}$$

$i \downarrow$

kde na i-tém řádku a v k-tém sloupci je hodnota

$$P_k^{(i-k,\dots,i)} = L_k^{(i-k,\dots,i)}(\tilde{x})$$

Lagrangeova interpolačního polynomu v $x=\tilde{x}$ k-tého stupně daného body $(x_{i-k}, f_{i-k}), \dots, (x_i, f_i)$, přičemž používáme rekurentní vztah

$$L_{k+1}^{(i-(k+1),\dots,i-1,i)}(x) = \frac{(x-x_i)L_k^{(i-(k+1),\dots i-1)}(x) + (x_{i-(k+1)}-x)L_k^{(i-k,\dots i)}(x)}{x_{i-(k+1)}-x_i}$$

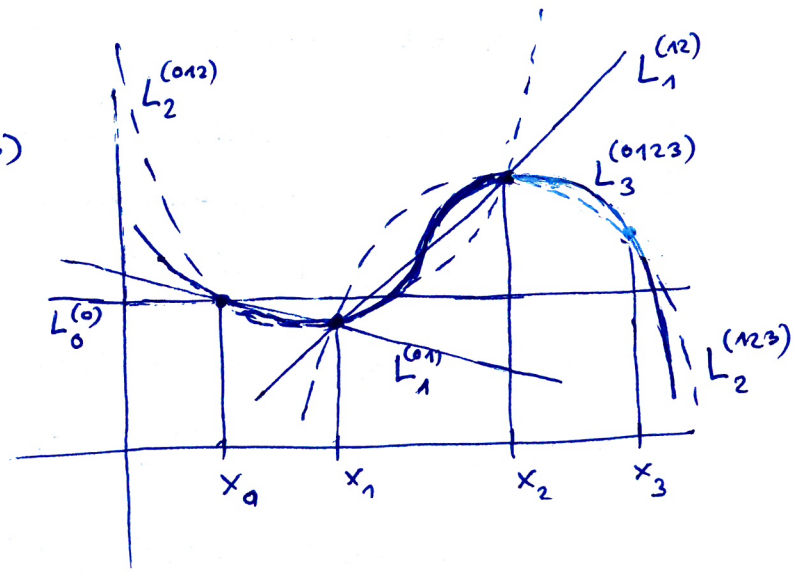
pro $k = 0, 1, \dots n$ a $i = 0, 1, 2 \dots$, $i \geq k$

- jde o vážený průměr dvou sousedních polynomů zajišťující, že L_{k+1} prochází body $x_{i-(k+1)}, \dots, x_i$

Př.

$$P_2^{(012)} \xrightarrow{\frac{(x-x_3)}{(x_0-x_3)}} P_3^{(0123)}$$

$$P_2^{(123)} \xrightarrow{\frac{(x_0-x)}{(x_0-x_3)}} P_3^{(0123)}$$



- <u>Chyba polynomiální interpolace</u>

- nechť $x_0, \dots, x_n$ jsou různé body z $\langle a,b\rangle$ a $f \in C^{n+1}(\langle a,b\rangle)$, pak pro každé $x \in \langle a,b\rangle$ $\exists\, \xi \in \langle a,b\rangle$ takové, že

$$f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\, \omega_{n+1}(x)$$

kde $\omega_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$

[Dk: viz Segethová, využívá se Rollova věta pro funkci $\tilde{\varphi}(x) = f(x) - L_n(x) - \tilde{K}\, \omega_{n+1}(x)$, kde $\tilde{K} = \frac{f(\tilde{x}) - L_n(\tilde{x})}{\omega_{n+1}(\tilde{x})}$ pro $\tilde{x} \neq x_i$]

- <u>chyba závisí na rozložení bodů</u> přes $\omega_{n+1}(x)$!

pro ekvidistantní rozložení x_i může nabývat mnohem větších hodnot než pro jiná rozložení, zvláště pro optimální rozložení

$$x_i^{čeb} = \cos \frac{\pi}{2} \frac{2i+1}{n+1} \quad \text{na int. } \langle -1, 1\rangle$$

což jsou kořeny Čebyševova polynomu T_{n+1}, neboli po přeškálování na interval $\langle a,b\rangle$ pro

$$x_i^{opt} = \frac{a+b}{2} + \frac{(b-a)}{2} \cos \frac{\pi(2i+1)}{2(n+1)}$$

kdy $\omega_{n+1}(x) = \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} t_{n+1}\left(\left(x - \frac{a+b}{2}\right)\frac{2}{b-a}\right)$

kde t_{n+1} je Čebyševův polynom s koeficientem 1 u x^{n+1}

a maximum je

$$\max_{x \in \langle a,b\rangle} |\omega_{n+1}(x)| = \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}}$$

- <u>proč zrovna kořeny Čebyševova polynomu?</u>

Čebyševův polynom $t_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$ s koeficientem 1 u x^n má totiž tu význačnou vlastnost, že <u>minimalizuje ∞-normu na $\langle -1, 1\rangle$</u> mezi polynomy p_n stupně n, které mají u x^n koeficient 1

neboli

$$\max_{x \in \langle -1,1\rangle} |p_n(x)| \geq \max_{x \in \langle -1,1\rangle} |t_n(x)| = \frac{1}{2^{n-1}}$$

Dk: z vyjádření $t_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} \cos(n \arccos x)$ (viz poznámky o ortogonálních polynomech)

plyne $|t_n(x)| \leq \frac{1}{2^{n-1}}$ pro $x \in \langle -1, 1 \rangle$

přitom body, kde platí rovnost, jsou ty, pro které

bude $n \arccos x_k = k\pi$, $k = 0, \dots, n$

neboli $x_k = \cos \frac{k\pi}{n}$ a tedy $t_n(x_k) = \frac{(-1)^k}{2^{n-1}}$

Nechť nyní existuje $q_n(x)$ mezi všemi $p_n(x)$ takový, že

$$\max_{x \in \langle -1,1 \rangle} |q_n(x)| < \frac{1}{2^{n-1}},$$

pak $r(x) = t_n(x) - q_n(x)$ má stupeň menší než n a je nenulový, neboť v bodech x_k je nenulový a navíc má v x_k stejné znaménko jako t_n a tedy by měl mít n kořenů, což je spor s předpokladem, že má stupeň $< n$.

- <u>Hermiteova interpolace</u>
  - kromě funkčních hodnot zadáváme i derivace do řádu $\alpha_i - 1$ v bodě x_i, dostaneme tak polynom $H_m(x)$ m-tého stupně, přičemž $m = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i - 1$
  - koeficienty $H_m(x)$ by šlo opět určit řešením soustavy $m+1$ rovnic pro $m+1$ neznámých
  - chyba: pro $f \in C^{m+1}(\langle a,b \rangle)$ je dána vztahem

$$f(x) - H_m(x) = \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!} \omega_{m+1}(x) \quad \text{pro jisté } \xi \in \langle a,b \rangle$$

kde nyní $\omega_{m+1}(x) = (x-x_0)^{\alpha_0}(x-x_1)^{\alpha_1} \dots (x-x_n)^{\alpha_n}$

  - pro $\alpha_0 = \alpha_1 = \dots \alpha_n = 1$ by šlo o standardní Lagrangeovu interpolaci
  - pro $n = 0$, $\alpha_0 = m+1$ dostaneme Taylorův rozvoj v okolí x_0 do řádu m
- speciálně pro $\alpha_0 = \dots = \alpha_n = 2$ (zadáváme funkční hodnoty a 1. derivace) lze psát

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n} s_i(x) f_i + \sum_{i=0}^{n} t_i(x) f_i'$$

kde $s_i(x) = [1 - 2(x - x_i) \ell_i'(x_i)] \ell_i^2(x) \Rightarrow s_i(x_j) = \delta_{ij}, \; s_i'(x_j) = 0$

$t_i(x) = (x - x_i) \ell_i^2(x) \Rightarrow t_i(x_j) = 0, \; t_i'(x_j) = \delta_{ij}$

Interpolace pomocí splajnů

- namísto jediného interpolačního polynomu skrze body $(x_i, f_i)_{i=0,\dots,n}$ který může značně oscilovat (Rungeův jev) budeme hledat po částech polynomy nižších řádů na každém podintervalu $\langle x_{i-1}, x_i\rangle$, $i=1,\dots,n$
- přitom budeme chtít, aby byla výsledná fce (splajn) spojitá i s derivacemi do jistého řádu

<u>Splajn</u> (z angl. spline, které označuje dřevěný pás, který se používal k prokládání křivek mezi body při konstrukcích lodí)

<u>Obyčejný splajn řádu k pro uzly $x_0 < x_1 < \dots < x_n$</u>

je funkce, která je na $\forall \langle x_{i-1}, x_i\rangle$, $i=1,\dots,n$, polynomem stupně nejvýše k a která má na <u>celém</u> intervalu $\langle x_0, x_n\rangle$ spojité derivace do řádu $k-1$

- používají se nejen k interpolaci, ale také např. ke konstrukci bází s kompaktním nosičem (B-splajny) pro řešení PDR apod.

- v praxi se využívají především <u>kubické splajny</u> pro své dobré „vyhlazovací" vlastnosti $\left(\int_{x_0}^{x_n} |s''(x)|^2 dx \leq \int_{x_0}^{x_n} |\psi''(x)|^2 dx \text{ pro } \forall \psi \in C^{(n)}_{\langle x_0, x_n\rangle} \text{ pro něž } \psi(x_i) = S(x_i),\ i=0,\dots,n \right)$

  a zároveň relativně jednoduchou konstrukci

- výhoda oproti Lagrangeovým interpolačním polynomům je, že pro $f \in C^4_{\langle x_0, x_n\rangle}$ stejnoměrně konvergují k interpolované fci f, pokud zmenšujeme $\max_{i=1,\dots,n} |x_{i-1} - x_i|$

  (pro ekvidistantní uzly lze ukázat, že $\exists C$ nezávislá na x taková, že
  $$|f(x) - S(x)| \leq Ch^4 \quad \text{pro } \forall x \in \langle x_0, x_n\rangle$$

<u>Interpolační kubický splajn</u> je splajn 3. řádu procházející interpolovanými body (x_i, f_i), $i=0,\dots,n$

- <u>není určen jednoznačně</u> máme $4n-2$ podmínek

$$\left.\begin{aligned} S_i(x_{i-1}) &= f_{i-1} \\ S_i(x_i) &= f_i \\ S_i'(x_i) &= S_{i+1}'(x_i) \\ S_i''(x_i) &= S_{i+1}''(x_i) \end{aligned}\right\} \text{ zde bez krajních bodů } x_0 \text{ a } x_n \qquad (*)$$

  ale máme $4n$ neznámých koeficientů polynomů stupně 3 na každém $\langle x_{i-1}, x_i\rangle$

$\Rightarrow$ nutné dodatečné 2 podmínky

<u>přirozený</u> (natural) <u>interpolační kubický splajn</u> $\quad S''(x_0) = S''(x_n) = 0$

<u>obyčejný</u> — " — $\quad S'(x_0) = f'(x_0)$, $S'(x_n) = f'(x_n)$

(clamped = upnutý = na okrajích nasměrujeme)

přechází na koncích do rovné čáry

ale i další, např. periodický $\quad S'(x_0) = S'(x_n)$, $S''(x_0) = S''(x_n)$ + musí být $S(x_0) = S(x_n)$

Přirozený kubický splajn jdoucí body (x_i, f_i), $i=0,\dots,n$

- bylo by možné z podmínek (*) sestavit $4n$ rovnic, ovšem efektivnější je na to jít nepřímo:
  a) určíme druhé derivace $z_i = S''(x_i)$ ze tridiagonální soustavy lineárních rovnic
  b) určíme $S(x)$ ze známých x_i, f_i a z_i, $i=0,\dots,n$

- <u>rovnice pro z_i</u> (druhé derivace)
  - pokud by byly druhé der. z_i známé, pak $S_i''(x)$ je lineární fce

$$S_i''(x) = \frac{z_i}{h_i}(x-x_{i-1}) + \frac{z_{i-1}}{h_i}(x_i - x) \quad , \text{kde } h_i = x_i - x_{i-1}, \; i=1,\dots,n$$

  - dvojí integrací dostaneme (s vhodně zvolenými integr. konstantami)

$$S_i(x) = \frac{z_i}{6h_i}(x-x_{i-1})^3 + \frac{z_{i-1}}{6h_i}(x_i-x)^3 + C_i(x-x_{i-1}) + D_i(x_i - x) \qquad (**)$$

kde integrační konstanty C_i a D_i se určí z podmínek

$$S_i(x_{i-1}) = f_{i-1} \quad \text{a} \quad S_i(x_i) = f_i \quad \Rightarrow \quad C_i = \frac{f_i}{h_i} - \frac{z_i h_i}{6}, \quad D_i = \frac{f_{i-1}}{h_i} - \frac{z_{i-1} h_i}{6}$$

$\Rightarrow$ pokud známe z_i, můžeme určit $S(x)$ z rovnice (**) pro $x \in \langle x_{i-1}, x_i \rangle$
i když je vhodnější vyčíslit jako $S_i(x) = a_i + b_i(x-x_{i-1}) + c_i(x-x_{i-1})^2 + d_i(x-x_{i-1})^3$

kde
$a_i = f_{i-1}$
$b_i = -\frac{h_i}{3}\left(z_{i-1} + \frac{z_i}{2}\right) + \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i}$
$c_i = z_{i-1}/2$
$d_i = \frac{z_i - z_{i-1}}{6h_i}$

- $S_i(x)$ zatím zkonstruované splňuje $S_i(x_{i-1}) = f_{i-1}$, $S_i(x_i) = f_i$, $i=0,\dots,n$
  a $S_i''(x_i) = S_{i+1}''(x_i)$ $\quad i=1,\dots,n-1$

nyní použijeme $S_i'(x_i) = S_{i+1}'(x_i)$, $i=1,\dots,n-1$ k určení z_i

dostaneme $$S_i'(x) = \frac{z_i}{2h_i}(x-x_{i-1})^2 - \frac{z_{i-1}}{2h_i}(x_i - x)^2 + C_i - D_i$$

a tedy $$z_{i-1}h_i + 2z_i(h_i + h_{i+1}) + z_{i+1}h_{i+1} = 6(b_{i+1} - b_i)$$

kde $b_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i}$ pro $i=1,\dots,n-1$

a navíc položíme $z_0 = 0$ a $z_n = 0$ $\Rightarrow$ tridiagonální systém navíc symetrický

$$\begin{pmatrix} u_1 & h_2 & & & 0 \\ h_2 & u_2 & h_3 & & \\ & h_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & h_{n-2} & u_{n-2} & h_{n-1} \\ 0 & & & & h_{n-1} & u_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-1} \end{pmatrix}$$

kde $u_i = 2(h_i + h_{i+1})$
$v_i = 6(b_{i+1} - b_i)$

Lze řešit přímou Gaussovou eliminací na $O(n)$ operací

u_i nahradíme $u_i - \frac{h_i^2}{u_{i-1}}$ pro $i=2,\dots,n-1$

v_i — " — $v_i - \frac{h_i v_{i-1}}{u_{i-1}}$

a zpětnou substitucí

$$z_{n-1} = \frac{v_{n-1}}{u_{n-1}}, \quad z_i = \frac{v_i - h_{i+1} z_{i+1}}{u_i}$$
$i = n-2, n-3, \dots, 1$

Vše OK, neboť $u_i > h_{i+1} > 0$

neboť $u_1 > h_2 > 0$

a indukcí $u_i = 2(h_{i+1} + h_i) - \frac{h_i^2}{u_{i-1}} >$
$> 2(h_{i+1} + h_i) - h_i > h_{i+1} > 0$