Vybrané slajdy k přednášce z předmětu

**NUMERICKÉ METODY (12NME1, 12NMEA)**

na KFE FJFI ČVUT v Praze

# 3. Aproximace funkcí

*Pracovní verze, 1. března 2024. Bude průběžně aktualizováno.*

**!!! TOTO NEJSOU SKRIPTA !!!**

Tento dokument není náhradou přednášek, pouze doplňkem.
Neobsahuje všechna vysvětlení a odvození. Nepokrývá veškerou
náplň předmětu, jejíž zvládnutí je nutné ke složení zkoušky.

Primárním zdrojem informací jsou přednášky, účast na nich důrazně doporučuji.

Opravy a připomínky prosím na `pavel.vachal@fjfi.cvut.cz`

## Příklady aproximujících funkcí

- Polynom

$$\Phi_m(x) \;=\; c_0 + c_1\, x + c_2\, x^2 + \cdots + c_m\, x^m$$

- Zobecněný polynom

$$\Phi_m(x) \;=\; c_0\, g_0(x) + c_1\, g_1(x) + \cdots + c_m\, g_m(x),$$

kde $g_0(x), \ldots, g_m(x)$ je báze $m+1$ lineárně nezávislých funkcí.
(Ty by měly být jednoduché a dostatečně hladké.)

- Racionální lomená funkce

$$\Phi_m(x) \;=\; \frac{a_0 + a_1\, x + a_2\, x^2 + \cdots + a_k\, x^k}{b_0 + b_1\, x + b_2\, x^2 + \cdots + b_l\, x^l}, \qquad m = k + l$$

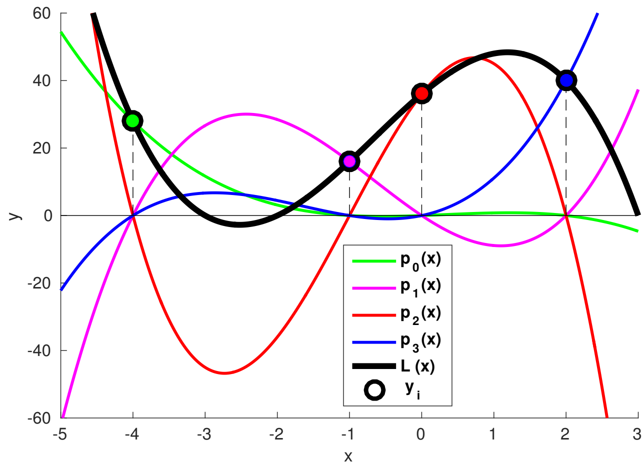
# Typy aproximací

- Interpolační
  - *Globální* (Lagrange, Newton, Hermite) vs. *lokální* (např. spline)
  - *Interpolace* vs. *extrapolace*
- Čebyševovy ("nejlepší stejnoměrná aproximace")
  - minimalizujeme
    $$\max_{x\in[a,b]}|f(x)-\Phi(x)|$$
  - $\Phi(x_i)$ obecně $\neq f(x_i)$
  - vhodné pro výpočet hodnot funkcí i jejich derivací
  - volíme optimální polohy uzlů $x_0,\ldots,x_n$ - tedy nejsou dané předem!
- Aproximace metodou nejmeších čtverců
  - minimalizujeme (spojitě)
    $$\int_a^b w(x)\left[f(x)-\Phi(x)\right]^2 \mathrm{d}x$$
    nebo (diskrétně)
    $$\sum_{i=0}^{n} w_i\left[f(x_i)-\Phi(x_i)\right]^2$$
  - $\Phi(x_i)$ obvykle $\neq f(x_i)$

# Lagrangeova interpolace

$$L_3(x) = \sum_{i=0}^{3} p_i(x),$$

$$p_i(x_j) = \begin{cases} y_i & \text{pro} \quad i = j \\ 0 & \text{pro} \quad i \neq j \end{cases}$$




Jak najít $p_i(x)$ ?

- $p_0(x) = (?) \cdot \llcorner\!\lrcorner (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$

$$p_0(x_0) \overset{!}{=} y_0 \qquad \Rightarrow \qquad (?) = \frac{y_0}{\llcorner\!\lrcorner (x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3)}$$

- $p_1(x) = (?) \cdot (x - x_0) \llcorner\!\lrcorner (x - x_2)(x - x_3)$

$$p_1(x_1) \overset{!}{=} y_1 \qquad \Rightarrow \qquad (?) = \frac{y_1}{(x_1 - x_0) \llcorner\!\lrcorner (x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}$$

$$\vdots$$

## Lagrangeův polynom

- Zavedeme pomocnou funkci

$$\begin{aligned}\Gamma_i(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}\\ &= \frac{\omega_n(x)}{(x-x_i)\,\omega'_n(x_i)},\end{aligned}$$

  kde

$$\omega_n(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)\,.$$

- POZN.: Vidíme, že v $n+1$ uzlech $x_0,\dots,x_n$ platí $\Gamma_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{pro } i=j \\ 0 & \text{pro } i\neq j \end{cases}$ .

- Pak Lagrangeův interpolační polynom $n$-tého stupně je

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i\,\Gamma_i(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i\,\frac{\omega_n(x)}{(x-x_i)\,\omega'_n(x_i)}.$$

- Pro ekvidistantní uzly, tedy když $h = x_{i+1}-x_i$, definujeme proměnnou $t = \frac{x-x_0}{h}$ a máme

$$L_n(x) = L_n(x_0+th) = \sum_{i=0}^{n} y_i\,\frac{t(t-1)\dots(t-n)}{(t-i)i!(n-i)!(-1)^{n-i}}.$$

## Lagrangeova interpolace - alternativa?

$$
\begin{gathered}
a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_n x_0^n = y_0 \\
a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_n x_1^n = y_1 \\
\ldots \\
a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots + a_n x_n^n = y_n
\end{gathered}
\quad \Leftrightarrow \quad
\begin{pmatrix}
1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\
1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\
1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}
$$

## **Nevillův algoritmus** (*“iterovaná interpolace”*)

---

Pro postupná přiblížení

$$L_{i,k}(x) = L_i(x;\ x_i, x_{i-1}, \dots, x_{i-k},\ y_i, y_{i-1}, \dots, y_{i-k})$$

platí rekurentní vztah

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

Mezivýsledky zapisujeme do tabulky

| x | y | k=0 | k=1 | ... | k=i | k=i+1 | ... | k=n |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $x_0$ | $y_0$ | $L_{0,0}$ | | | | | | |
| $x_1$ | $y_1$ | $L_{1,0}$ | $L_{1,1}$ | | | | | |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\ddots$ | | | | |
| $x_i$ | $y_i$ | $L_{i,0}$ | $L_{i,1}$ | $\dots$ | $L_{i,i}$ | | | |
| $x_{i+1}$ | $y_{i+1}$ | $L_{i+1,0}$ | $L_{i+1,1}$ | $\dots$ | $L_{i+1,i}$ | $L_{i+1,i+1}$ | | |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | | $\vdots$ | $\vdots$ | $\ddots$ | |
| $x_n$ | $y_n$ | $L_{n,0}$ | $L_{n,1}$ | $\dots$ | $L_{n,i}$ | $L_{n,i+1}$ | $\dots$ | $L_{n,n}$ |

$$L_n(x) = L_{n,n}(x)$$

nebo

$$\begin{array}{llccc}
x_0: & y_0 = L_{0,0} & & & \\
 & & L_{1,1} & & \\
x_1: & y_1 = L_{1,0} & & L_{2,2} & \\
 & & L_{2,1} & & L_{3,3} \\
x_2: & y_2 = L_{2,0} & & L_{3,2} & \\
 & & L_{3,1} & & \\
x_3: & y_3 = L_{3,0} & & &
\end{array}$$

## Nevillův algoritmus - praktická implementace

pro diference

$$C_{m,i} = L_{i+m,m} - L_{i+m-1,m-1},$$
$$D_{m,i} = L_{i+m,m} - L_{i+m,m-1},$$

platí rekurentní vztah

$$C_{m+1,i} = \frac{(x_i - x)\,(C_{m,i+1} - D_{m,i})}{x - x_{i+m+1}} = (x_i - x)\,\frac{C_{m,i+1} - D_{m,i}}{x - x_{i+m+1}},$$
$$D_{m+1,i} = \frac{(x_{i+m+1} - x)\,(C_{m,i+1} - D_{m,i})}{x - x_{i+m+1}} = (x_{i+m+1} - x)\,\frac{C_{m,i+1} - D_{m,i}}{x - x_{i+m+1}}.$$

- $y_0(x) = L_{i,0} = C_{0,i} = D_{0,i} = y_i$
- $y_{m+1}(x) = y_m + \delta y_{m+1},$ za $\delta y_{m+1}$ vezmeme $C_{m+1,k}$ nebo $D_{m+1,k}$
- $y(x) = y_n(x)\ \ \delta y_n$

Značení v Numerical Recipes:

$$\begin{array}{llllll}
x_1: & y_1 = P_1 & & & \\
 & & P_{12} & & \\
x_2: & y_2 = P_2 & & P_{123} & \\
 & & P_{23} & & P_{1234} \\
x_3: & y_3 = P_3 & & P_{234} & \\
 & & P_{34} & & \\
x_4: & y_4 = P_4 & & &
\end{array}$$

## Odhad chyby polynomiální interpolace

- Nechť
  - $f(x)$ má na intervalu $\langle a, b\rangle$ spojité derivace až do $n$-tého řádu včetně
  - $f^{(n+1)}(x)$ existuje na všech bodech intervalu $(a, b)$
  - $L_n(x)$ je interpolační polynom pro funkci $f(x)$
  - $x_0, \ldots, x_n \in \langle a, b\rangle$ jsou uzlové body.

  Potom je chyba aproximace dána vztahem

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

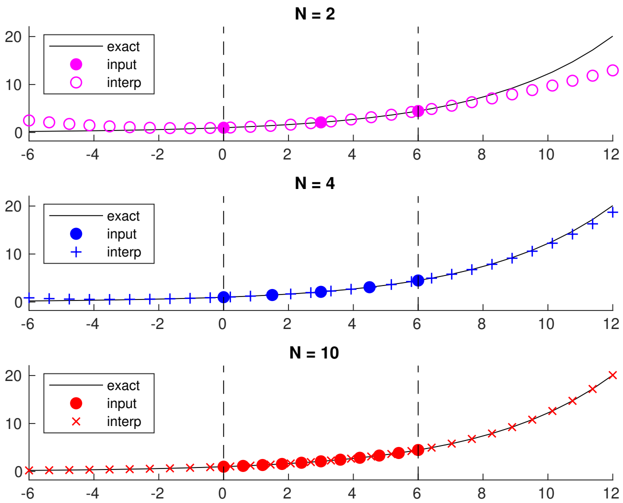
  kde $\quad \xi \in \langle\, \min(x, x_0, \ldots, x_n)\ ,\ \max(x, x_0, \ldots, x_n)\,\rangle.$

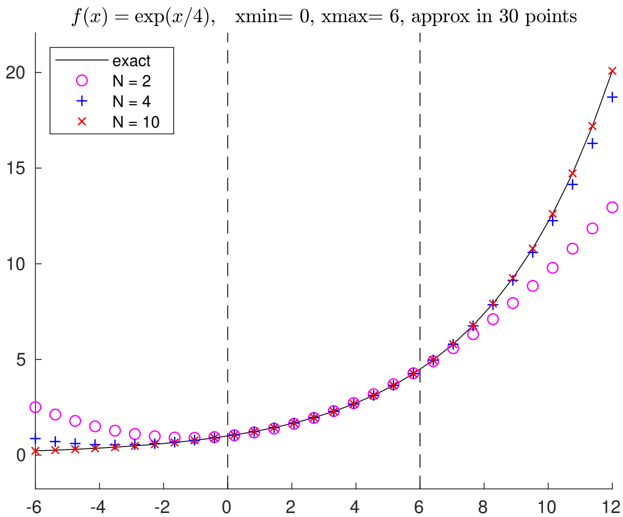
- Protože $\xi$ neznáme, použijeme odhad:

  Jestliže existuje konstanta $M_{n+1}$ taková, že $\quad \forall x \in \langle a, b\rangle, \quad \left|f^{(n+1)}(x)\right| \leq M_{n+1}$,
  potom

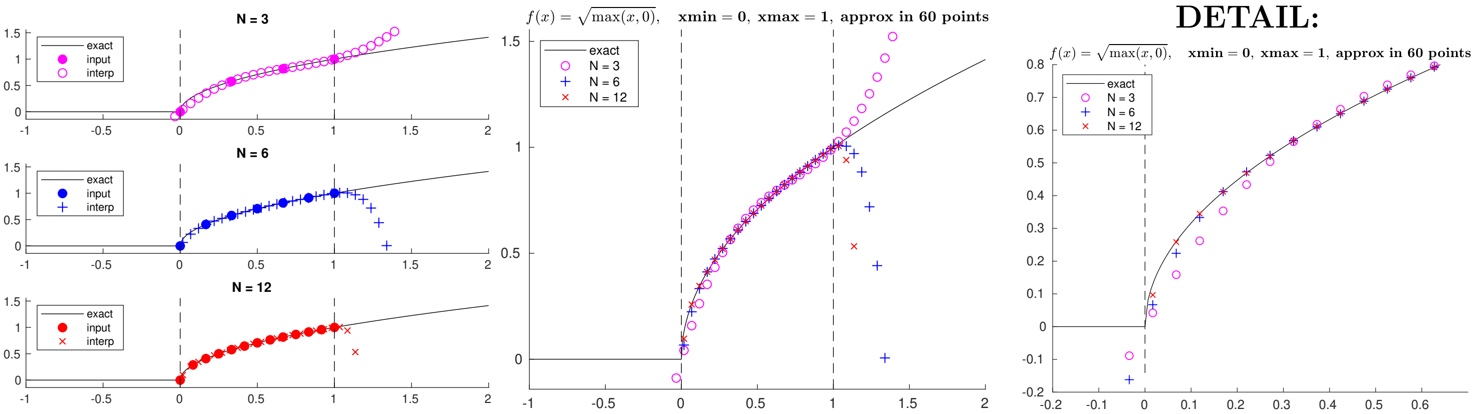
$$|R(x)| \ \leq\ \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\ \max_{x\in\langle a,b\rangle} |\omega_n(x)|.$$

# Lagrangeova interpolace - příklad I

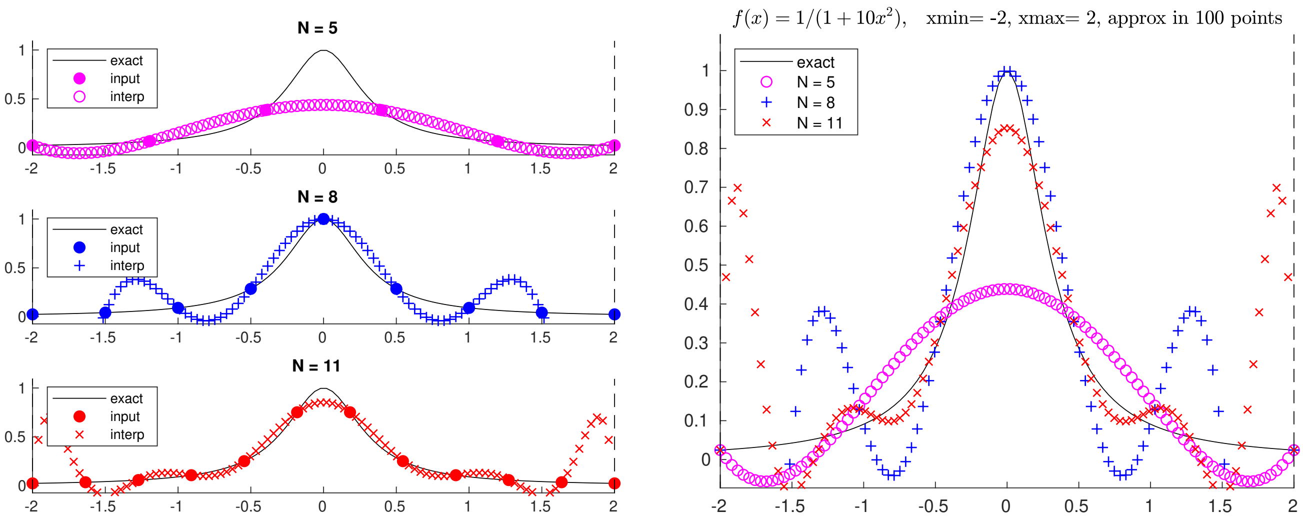


# Lagrangeova interpolace - příklad II



# Lagrangeova interpolace - příklad III



## Konvergence polynomiální interpolace

- Pro *ekvidistantní* uzly:
  - Uvažujme konstantní interval $\langle a, b\rangle$
  - Nechť počet ekvidistantních uzlů $(n+1) \to \infty$, tedy $h = \frac{b-a}{n} \to 0$
  - Pak konvergence $L_n(x) \to f(x)$ je zaručena pro funkce analytické (mající komplexní derivaci) v celé komplexní rovině s výjimkou $\infty$
  - Jinak není zaručena ani bodová konvergence interpolačního polynomu k funkci
- Pro *neekvidistantní* uzly může být situace lepší:
  - Např. pro uzly volené tak, že

$$x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi\right), \qquad \text{kde } i = 0, 1, \ldots, n,$$

    konverguje pro $n \to \infty$ interpolační polynom k funkci pro všechny funkce třídy $C^1$ na intervalu $\langle a, b\rangle$.

    (Touto volbou uzlů totiž minimalizujeme $\max\limits_{x\in\langle a,b\rangle} |\omega_n(x)|$. )

    $\rightarrow$ aproximace Čebyševovými polynomy, viz později

## Newtonův interpolační polynom

- Analyticky se jedná o Lagrangeův polynom zapsaný v jiném tvaru

$$\begin{aligned} N_n(x) = \quad & a_0 + \\ & + a_1 (x - x_0) + \\ & + a_2 (x - x_0)(x - x_1) + \\ & + \ldots + \\ & + a_n (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_{n-1}) \,, \end{aligned}$$

  kde koeficienty $a_i$ jsou vyjádřeny pomocí konečných diferencí - viz dále

- Způsob numerického výpočtu příslušný k tomuto zápisu má ovšem řadu výhod

## Poměrné a obyčejné diference

- Poměrné diference
  - ◇ 1. řádu: $$f(x_i, x_{i+1}) = \frac{y_{i+1}-y_i}{x_{i+1}-x_i}$$
  - ◇ $k$-tého řádu rekurentně: $$f(x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}) = \frac{f(x_{i+1},\ldots,x_{i+k})-f(x_i,\ldots,x_{i+k-1})}{x_{i+k}-x_i},$$

    tedy např. poměr. dif. 2. řádu: $$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \frac{\frac{y_{i+2}-y_{i+1}}{x_{i+2}-x_{i+1}} - \frac{y_{i+1}-y_i}{x_{i+1}-x_i}}{x_{i+2}-x_i}.$$
  - ◇ POZN.: vzorec pro $k$-tou poměrnou diferenci lze zapsat jako $$f(x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}) = \sum_{j=0}^{k} \frac{y_{i+j}}{\prod\limits_{\substack{m=0\\ m\neq j}} (x_{i+j}-x_{i+m})}.$$
- Obyčejné diference
  - ◇ 1. řádu: $$\Delta^1 f_i = y_{i+1} - y_i$$
  - ◇ $k$-tého řádu rekurentně: $$\Delta^k f_i = \Delta^{k-1} f_{i+1} - \Delta^{k-1} f_i,$$

    tedy např. obyč. dif. 2. řádu: $$\Delta^2 f_i = (y_{i+2} - y_{i+1}) - (y_{i+1} - y_i) = y_{i+2} - 2\,y_{i+1} + y_i.$$

## Newtonův interpolační polynom

- Zápis Newtonova polynomu pomocí poměrných diferencí:

$$\begin{aligned} N_n(x) = f(x_0)\ + & \\ & +\ (x-x_0)\ f(x_0,x_1)\ + \\ & +\ (x-x_0)(x-x_1)\ f(x_0,x_1,x_2)\ + \\ & +\ \ldots\ + \\ & +\ (x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1})\ f(x_0,x_1,\ldots,x_n) \end{aligned}$$

- V případě ekvidistantních uzlů se vzorec zjednoduší pomocí obyčejných diferencí na

$$\begin{aligned} N_n(x) = f(x_0) + & \\ & +\ \tfrac{t}{1!}\ \Delta^1 f_0 + \\ & +\ \tfrac{t(t-1)}{2!}\ \Delta^2 f_0\ +\ \ldots \\ & \ldots\ +\ \tfrac{t(t-1)(t-n+1)}{n!}\ \Delta^n f_0 \end{aligned}$$

- POZN.: Newtonův interp. polynom pro uzly předcházející $x_0$ (“Newtonův polynom vzad”):

$$\begin{aligned} N_n(x) = f(x_0) + & \\ & +\ (x-x_0)\ f(x_{-1},x_0)\ + \\ & +\ (x-x_0)(x-x_{-1})\ f(x_{-2},x_{-1},x_0)\ + \\ & +\ \ldots\ + \\ & +\ (x-x_0)(x-x_{-1})\ldots(x-x_{-n+1})\ f(x_{-n},\ldots,x_{-1},x_0) \end{aligned}$$

## Interpolace racionální lomenou funkcí

Je zadáno $n+1$ bodů. Pak můžeme interpolovat funkcí

$$R_{s,t}(x) = \frac{P_s(x)}{Q_t(x)} = \frac{p_0 + p_1 x + \cdots + p_s x^s}{q_0 + q_1 x + \cdots + q_t x^t},$$

kde $s + t = n$.

# Hermiteova interpolace

$$H_n(x) = \overbrace{L_m(x)}^{\text{prochází uzly } x_i} + \overbrace{\omega_m(x)\, H_{n-m-1}(x)}^{\text{nulový v uzlech} \Leftarrow \omega_m(x_i)=0}$$

$$y_i' \overset{!}{=} H_n'(x_i) = L_m'(x_i) + \omega_m'(x_i)\, H_{n-m-1}(x_i) + \underbrace{\overbrace{\omega_m(x_i)}^{=0} H_{n-m-1}'(x_i)}_{\text{a proto} \quad =0}$$

$$H_{n-m-1}(x_i) = \underbrace{\frac{y_i' - L_m'(x_i)}{\omega_m'(x_i)}}_{\text{ozn. } z_i}$$

- $H_n(x)$ splňuje podmínku

$$H_n(x_i) = y_i \qquad \text{pro všechny uzly} \qquad i = 0, \ldots, m \tag{1}$$

- dále chceme splnit

$$\left.\begin{aligned} H_n'(x_i) &= y_i', \\ H_n''(x_i) &= y_i'', \\ &\vdots \\ H_n^{(\alpha_i)}(x_i) &= y_i^{(\alpha_i)} \end{aligned}\right. \qquad \text{pro všechny uzly} \qquad i = 0, \ldots, m \tag{2}$$

neboli chceme

$$\begin{aligned}
y_i' &= H_n'(x_i) = L_m'(x_i) + \omega_m'(x_i)\, H_{n-m-1}(x_i)\,, \\
y_i'' &= H_n''(x_i) = L_m''(x_i) + \omega_m''(x_i)\, H_{n-m-1}(x_i) + 2\,\omega_m'(x_i)\, H_{n-m-1}'(x_i)\,, \\
&\vdots \\
y_i^{(\alpha_i)} &= H_n^{(\alpha_i)}(x_i) = L_m^{(\alpha_i)}(x_i) + \omega_m^{(\alpha_i)}(x_i)\, H_{n-m-1}(x_i) + \ldots
\end{aligned}$$

Z toho vyjádříme derivace $H_{n-m-1}(x_i)$ a dostaneme rovnice

$$\begin{aligned}
H_{n-m-1}(x_i) &= \frac{y_i' - L_m'(x_i)}{\omega_m'(x_i)} \overset{\text{ozn.}}{\equiv} \boxed{z_i}, \\
H_{n-m-1}'(x_i) &= \frac{y_i'' - L_m''(x_i) - \omega_m''(x_i)\, H_{n-m-1}(x_i)}{2\,\omega_m'(x_i)} \\
&= \frac{y_i'' - L_m''(x_i) - \omega_m''(x_i)\, \boxed{z_i}}{2\,\omega_m'(x_i)} \overset{\text{ozn.}}{\equiv} \boxed{z_i'}, \\
&\vdots \\
H_{n-m-1}^{(\alpha_i-1)}(x_i) &= \frac{y_i^{(\alpha_i)} - L_m^{(\alpha_i)}(x_i) - \ldots}{\alpha_i\, \omega_m'(x_i)} \overset{\text{ozn.}}{\equiv} \boxed{z_i^{(\alpha_i-1)}}
\end{aligned}$$

pro sestrojení polynomu $H_{n-m-1}(x)$. Ty jsou analogické rcím (1),(2) pro sestrojení $H_n(x)$.

## Interpolační spline

- Lokální interpolace taková, že
  - prochází všemi uzly, tedy $\forall i,\ f(x_i) = y_i$
  - v uzlech má spojitou alespoň první derivaci, tedy $\forall i,\ \lim_{x \to x_{i-}} f'(x) = \lim_{x \to x_{i+}} f'(x)$
- V každém subintervalu $[x_i, x_{i+1}]$ tedy klademe 4 podmínky:

  - ▶ hodnota $y_i$
  - ▶ hodnota $y_{i+1}$
  - ▶ $y'_{i+} = y'_{i-}$
  - ▶ $y'_{(i+1)+} = y'_{(i+1)-}$

  Proto použijeme bazické funkce se čtyřmi volitelnými parametry
- Okraje
  - pojem spojitosti derivací zde nemá smysl $\Rightarrow$ musíme dodefinovat 2 podmínky
  - ideální je když známe přesné hodnoty derivací: $y'(x_0) = y'_0$ a/nebo $y'(x_n) = y'_n$
  - když je neznáme, zadáme $y''{}_0 = 0$, resp. $y''{}_n = 0$
  - *Přirozený spline*: $y''_0 = y''_n = 0$

## Odvození konstrukce kubického splinu

- Druhá derivace v intervalu $[x_j, x_{j+1}]$ je lineární funkce, tedy

$$\begin{aligned} y'' &= y''_j + \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}\left(y''_{j+1} - y''_j\right) = \underbrace{\frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j}}_{\text{ozn. } A(x)} y''_j + \underbrace{\frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}}_{\text{ozn. } B(x) = 1 - A(x)} y''_{j+1} \\ &= A(x) y''_j + B(x) y''_{j+1}. \end{aligned}$$

- Všimněme si, že

$$\begin{aligned} A\left(x_j\right) &= 1, & A\left(x_{j+1}\right) &= 0, \\ B\left(x_j\right) &= 0, & B\left(x_{j+1}\right) &= 1. \end{aligned}$$

- Hodnoty $y''_j$ a $y''_{j+1}$ nyní bereme jako konstanty. Dále označíme $\Delta_j = x_{j+1} - x_j$. Protože

$$\begin{aligned} \int A(x)\,\mathrm{d}x &= -\frac{\Delta_j}{2} A(x)^2 + Q_{A1}, & \int\left(\int A(x)\,\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}x &= \frac{\Delta_j^2}{6} A(x)^3 + Q_{A1} x + Q_{A2} \\ \int B(x)\,\mathrm{d}x &= \frac{\Delta_j}{2} B(x)^2 + Q_{B1}, & \int\left(\int B(x)\,\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}x &= \frac{\Delta_j^2}{6} B(x)^3 + Q_{B1} x + Q_{B2} \end{aligned}$$

(kde $Q$ jsou konstanty), máme po dvou integracích

$$y = \frac{\Delta_j^2}{6} A(x)^3 y''_j + \frac{\Delta_j^2}{6} B(x)^3 y''_{j+1} + Kx + L, \tag{3}$$

kde $Kx + L$ zahrnuje $Q_{A1}$, $Q_{A2}$, $Q_{B1}$ a $Q_{B2}$.

◇ Po dosazení $y\left(x_j\right)=y_j$ a $y\left(x_{j+1}\right)=y_{j+1}$ dostaneme

$$\begin{aligned} y_j &= \tfrac{\Delta_j^2}{6}\cdot 1\cdot y_j''+0+Kx_j+L &&= \tfrac{\Delta_j^2}{6}y_j''+Kx_j+L \\ y_{j+1} &= 0+\tfrac{\Delta_j^2}{6}\cdot 1\cdot y_{j+1}''+Kx_{j+1}+L &&= \tfrac{\Delta_j^2}{6}y_{j+1}''+Kx_{j+1}+L, \end{aligned}$$

odkud vyjádříme $K$ a $L$ jako

$$\begin{aligned} K &= \frac{y_{j+1}-y_j}{\Delta_j}-\frac{\Delta_j}{6}\left(y_{j+1}''-y_j''\right) \\ L &= \frac{x_{j+1}y_j-x_jy_{j+1}}{\Delta_j}+\frac{\Delta_j}{6}\left(x_jy_{j+1}''-x_{j+1}y_j''\right) \end{aligned}$$

a tedy

$$Kx+L=-\tfrac{\Delta_j^2}{6}\Big(A(x)y_j''+B(x)y_{j+1}''\Big)+A(x)y_j+B(x)y_{j+1}.$$

◇ Po dosazení zpět do (3) máme

$$\begin{aligned} y &= \underbrace{\Delta_j^2\frac{A(x)^3-A(x)}{6}}_{\text{ozn. } C(x)}y_j''+\underbrace{\Delta_j^2\frac{B(x)^3-B(x)}{6}}_{\text{ozn. } D(x)}y_{j+1}''+A(x)y_j+B(x)y_{j+1} \\ &= A(x)y_j+B(x)y_{j+1}+C(x)y_j''+D(x)y_{j+1}''. \end{aligned} \tag{4}$$

◇ Derivace je $\quad y'(x)=-\dfrac{1}{\Delta_j}y_j+\dfrac{1}{\Delta_j}y_{j+1}-\Delta_j\dfrac{3A(x)^2-1}{6}y_j''+\Delta_j\dfrac{3B(x)^2-1}{6}y_{j+1}''.$

- Hodnoty konstant $y''_j$ a $y''_{j+1}$ určíme z podmínky spojitosti první derivace: $y'(x_j)_- = y'(x_j)_+$ pro $\forall j$. Po dosazení máme

$$\frac{y_{j+1}-y_j}{\Delta_j} - \Delta_j \frac{3\cdot 1^2 - 1}{6} y''_j + \Delta_j \frac{3\cdot 0^2 - 1}{6} y''_{j+1} =$$

$$= \frac{y_j - y_{j-1}}{\Delta_{j-1}} - \Delta_{j-1}\frac{3\cdot 0^2 - 1}{6} y''_{j-1} + \Delta_{j-1}\frac{3\cdot 1^2 - 1}{6} y''_j$$

neboli

$$\frac{y_{j+1}-y_j}{\Delta_j} - \frac{\Delta_j}{3} y''_j - \frac{\Delta_j}{6} y''_{j+1} \;=\; \frac{y_j - y_{j-1}}{\Delta_{j-1}} + \frac{\Delta_{j-1}}{6} y''_{j-1} + \frac{\Delta_{j-1}}{3} y''_j$$

a po převedení výrazů s druhými derivacemi na jednu stranu máme

$$\frac{\Delta_{j-1}}{6} y''_{j-1} + \frac{\Delta_{j-1}+\Delta_j}{3} y''_j + \frac{\Delta_j}{6} y''_{j+1} \;=\; \frac{y_{j+1}-y_j}{\Delta_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{\Delta_{j-1}}$$

pro $j = 1, \ldots, n-1$, což je lineární systém s tridiagonální, diagonálně dominantní maticí. Ten vyřešíme a získáme $y''_j$ pro $j = 0, \ldots, n$.

- Vypočtené hodnoty $y''_j$ dosadíme do (4), čímž je spline hotov. Můžeme jej tedy vyhodnotit pro libovolné $x \in [x_0, x_n]$.

# Konvergence kubického splinu

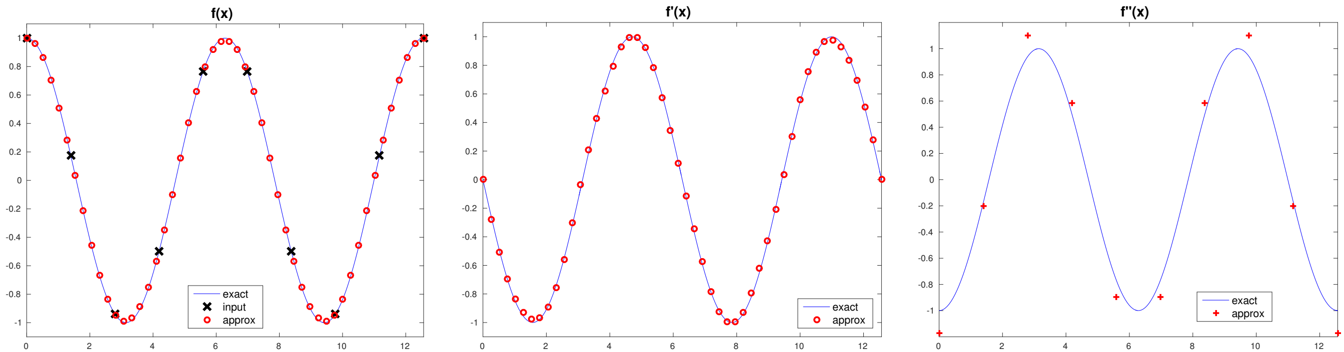
- Nechť $f(x)$ je třídy $\mathcal{C}^q$ na intervalu $[a,b]$ (tzn. má spojité derivace až do $q$-té včetně), kde $q = 0, 1, 2, 3, 4$.
- Dále nechť interval $[a,b]$ je rozdělen na podintervaly délky $h_i$, kde $i = 1, \dots, n$ a $\max_i h_i = h$.
- Dále mějme konstantu $K$, pro kterou platí $K \geq \frac{\max_i h_i}{\min_i h_i}$.
- Je-li $S(x)$ kubický interpolační spline, pak pro $p = 0, 1, 2, 3$ platí

$$\left| f^{(p)}(x) - S^{(p)}(x) \right| \leq C\, K\, h^{q-p},$$

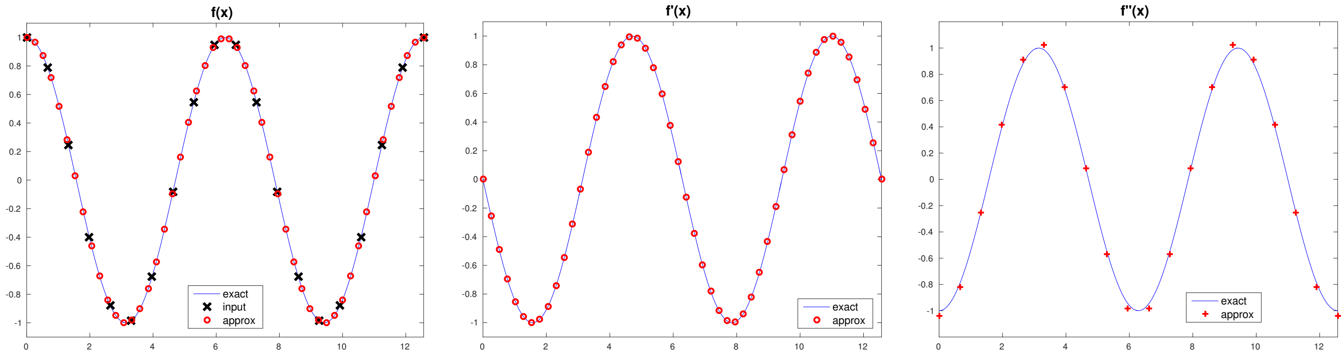
kde konstanta $C$ nezávisí na $x$ ani na způsobu dělení intervalu $[a,b]$.

# Interpolace funkce $f = \cos(x)$ kubickým splinem

## Zadáno 10 bodů:



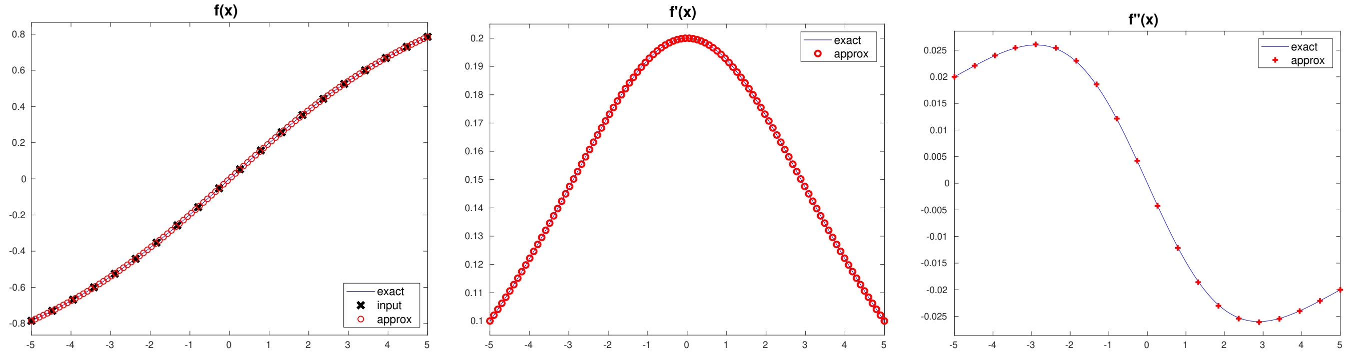

## Zadáno 20 bodů:



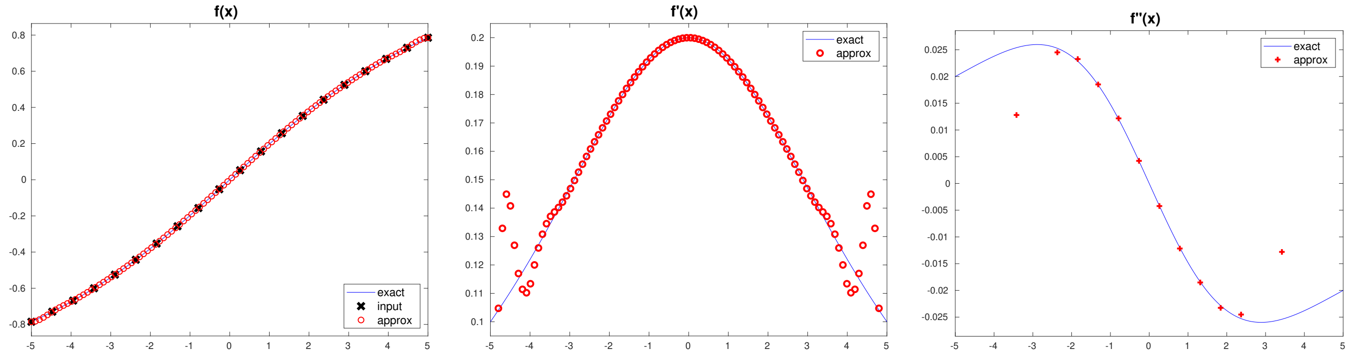
**Interpolace funkce** $f(x) = \arctan\left(\frac{x}{\alpha}\right)$ **kub. splinem,** $\alpha = 5,\quad f'(x) = \frac{\alpha}{\alpha^2+x^2}$.

---

Zadáno 20 bodů a SPRÁVNÉ okr. podmínky $y_0' = y_n' = 0.1$:

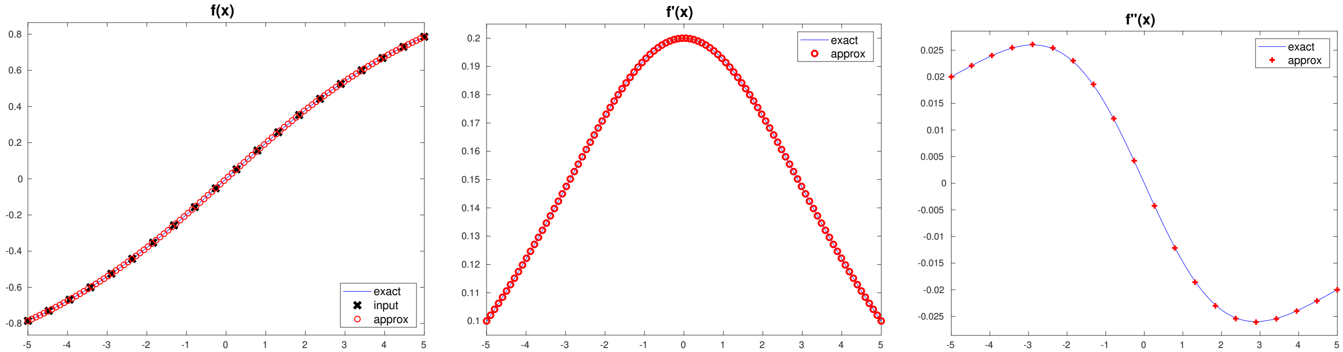



Zadáno 20 bodů a NESPRÁVNÉ okr. podmínky $y_0' = y_n' = 0$:

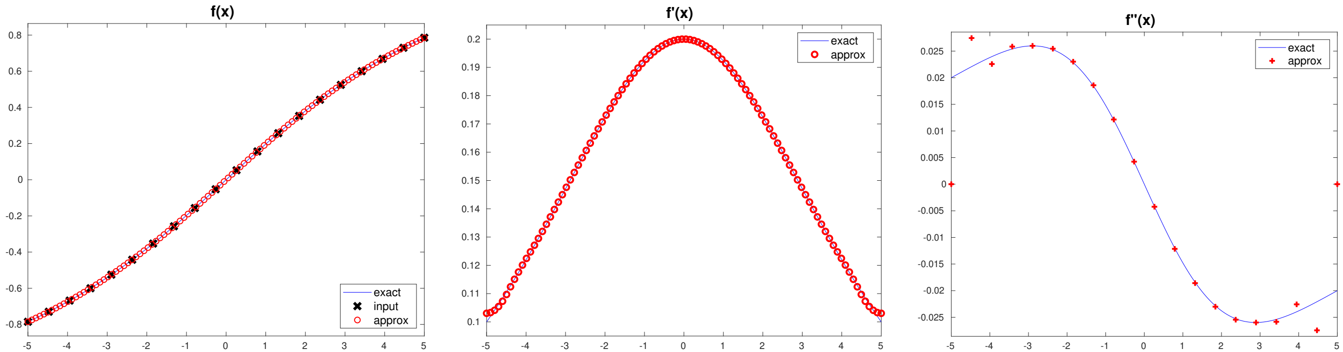


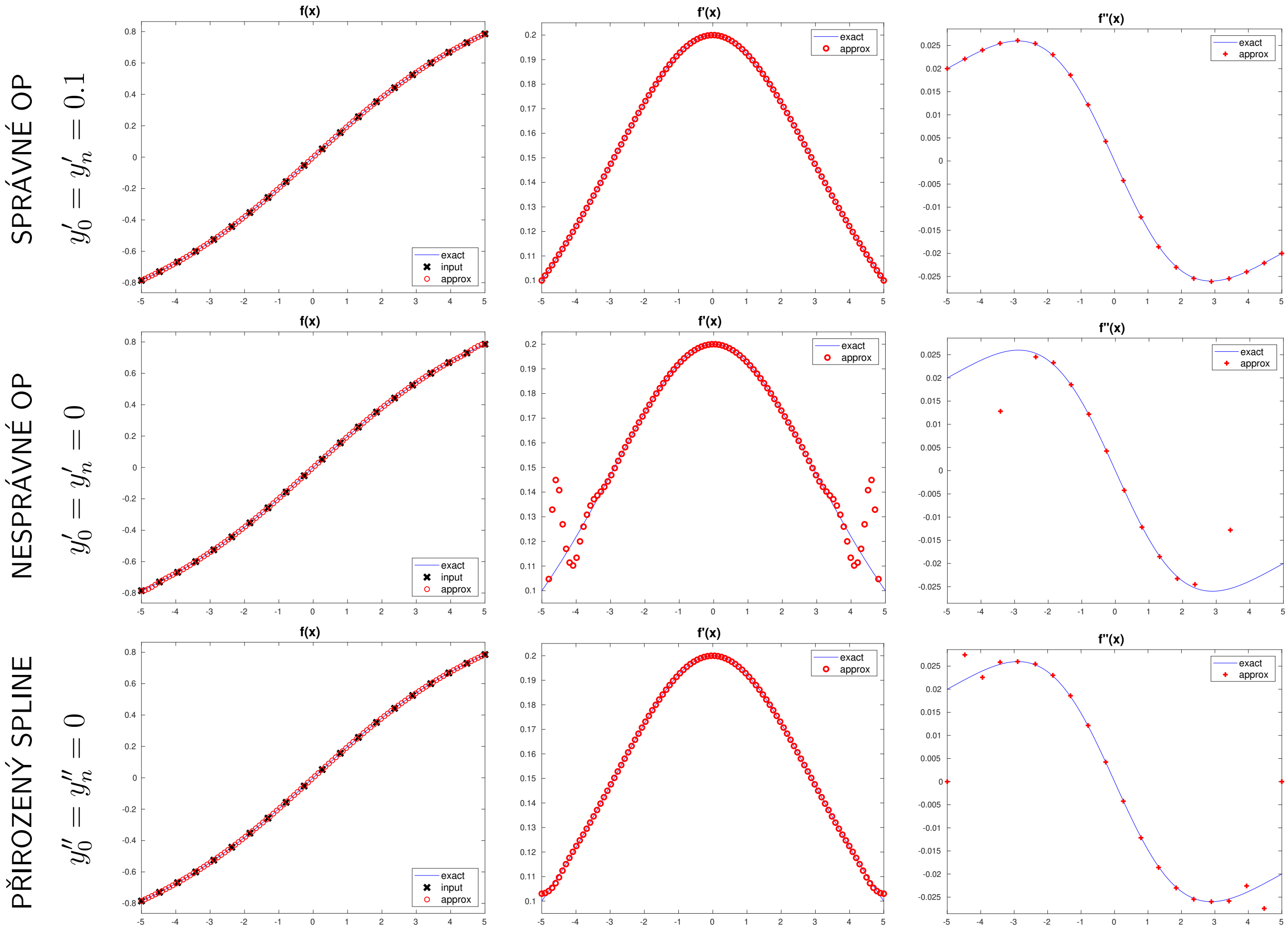
# **Interpolace funkce** $f(x) = \arctan\left(\frac{x}{\alpha}\right)$ **kub. splinem,** $\alpha = 5,\quad f'(x) = \frac{\alpha}{\alpha^2+x^2}$.

## Zadáno 20 bodů a SPRÁVNÉ okr. podmínky $y_0' = y_n' = 0.1$:




## Zadáno 20 bodů a PŘIROZENÝ SPLINE $y_0'' = y_n'' = 0$:

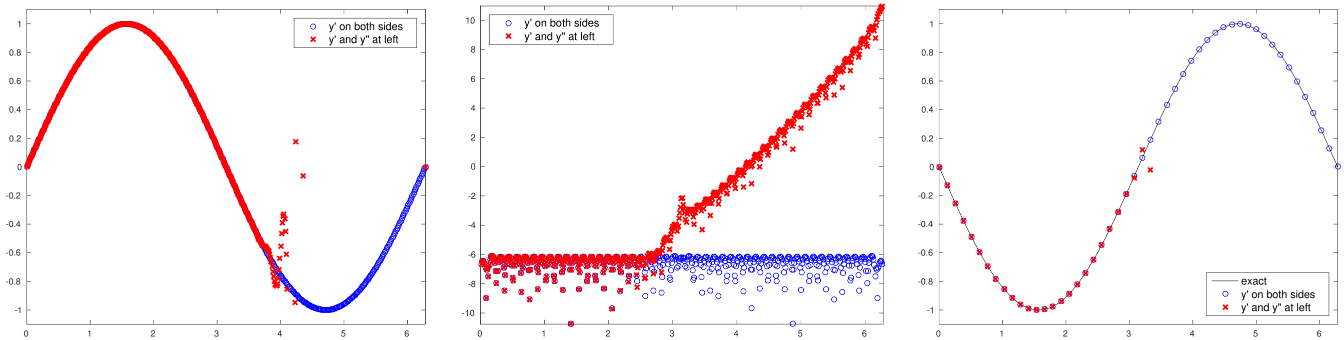




SPRÁVNÉ OP
$y'_0 = y'_n = 0.1$
NESPRÁVNÉ OP
$y'_0 = y'_n = 0$
PŘIROZENÝ SPLINE
$y''_0 = y''_n = 0$
f(x)
f'(x)
f''(x)
exact
input
approx

## Interpolace funkce $f = \sin(x)$ kubickým splinem, zadáno 50 bodů

Interpolace $y(x) \approx f(x)$ | $\log_{10}$ relativní $L_1$ chyby $y$ | $f''(x)$ a hodnoty $y_i''$




**MODŘE:** okr. podm. zadány prvními derivacemi na obou stranách: $y_0'$ a $y_n'$

**ČERVENĚ:** zadána první a druhá derivace vlevo: $y_0'$ a $y_0''$

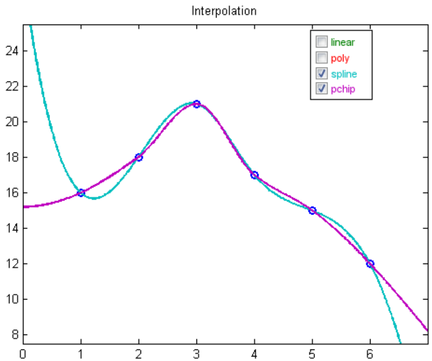
**Porovnání kubického splinu a jiné po částech kubické interpolace**

*(příklad převzat z Cleve's Corner na* `mathworld.com`*)*

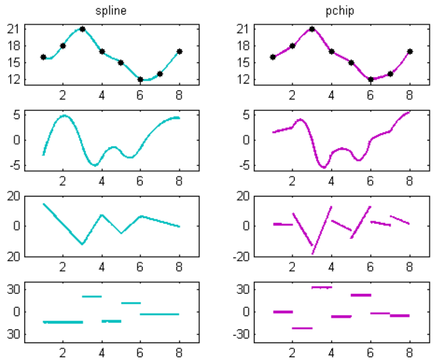
---

- Typický představitel třídy PCHIP (Piecewise Cubic Hermite Interpolating Polynomial)

| $x_i$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $y_i$ | 16 | 18 | 21 | 17 | 15 | 12 |

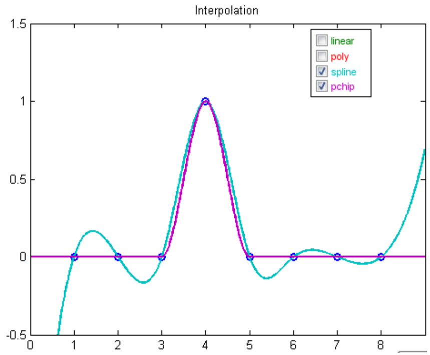



Interpolace kubickým splinem vs. typickým PCHIPem




Průběh interpolační funkce a její 1. až 3. derivace

| $x_i$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $y_i$ | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |

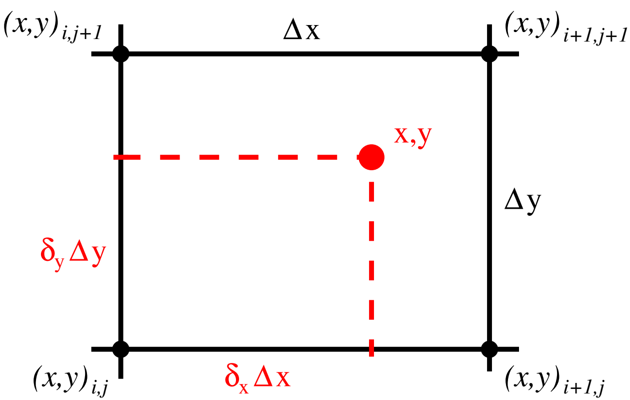



PCHIP se chová "lokálně", kubický spline "globálně"

## 2D interpolace - spojitá lokální (bilineární)

- Na intervalu $[x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$ známe hodnoty v uzlech, tedy $f_{i,j}$, $f_{i+1,j}$, $f_{i,j+1}$ a $f_{i+1,j+1}$
- Interpolujeme lokální funkcí

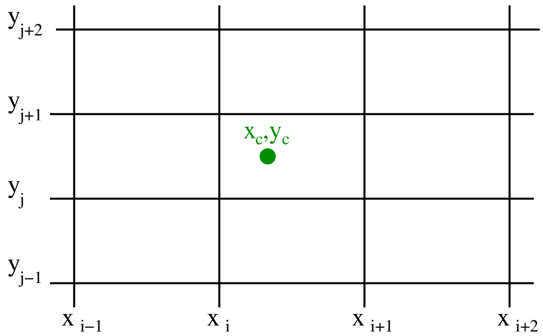
$$\begin{aligned}
\Phi(x,y) = \; & \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}\,\frac{y_{j+1}-y}{y_{j+1}-y_j}\,f_{i,j} + \frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\,\frac{y_{j+1}-y}{y_{j+1}-y_j}\,f_{i+1,j} \\
& + \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}\,\frac{y-y_j}{y_{j+1}-y_j}\,f_{i,j+1} + \underbrace{\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}}_{\text{ozn. } \delta_x}\,\underbrace{\frac{y-y_j}{y_{j+1}-y_j}}_{\text{ozn. } \delta_y}\,f_{i+1,j+1} \\
= \; & (1-\delta_x)\,(1-\delta_y)\; f_{i,j} + \delta_x\,(1-\delta_y)\; f_{i+1,j} + (1-\delta_x)\,\delta_y\; f_{i,j+1} + \delta_x\delta_y\; f_{i+1,j+1}
\end{aligned}$$

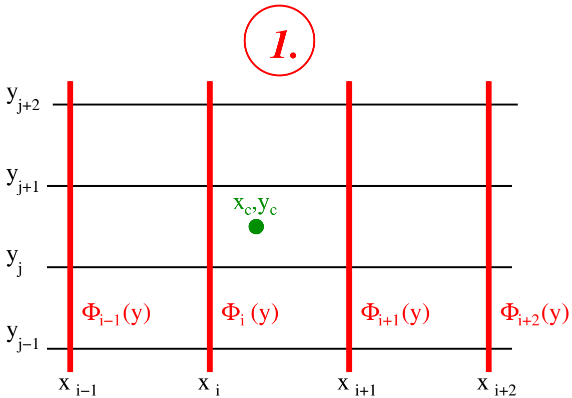


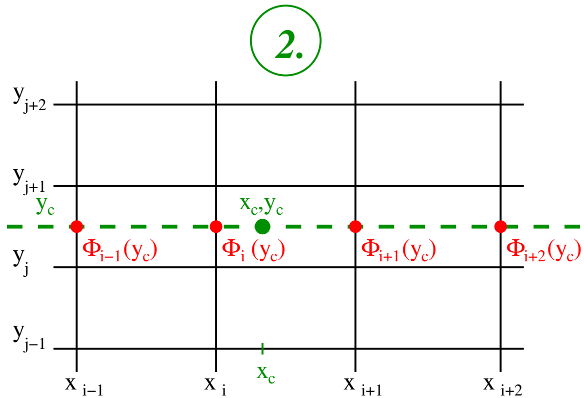

$$\Delta\, x = x_{i+1} - x_i$$

$$\Delta\, y = y_{j+1} - y_j$$

# 2D interpolace - globální, po směrech




$$\Phi_k(y) = \Phi(x_k, y)$$

$$\Phi(x_k, y_c) = \Phi_k(y_c)$$

# 2D interpolace - lokální

- Bikubická interpolace
  - Lokální interpolace Hermiteova typu
  - V každém bodu $(x_i, y_j)$ máme zadány 4 hodnoty: $f(x,y)$, $\frac{\partial f}{\partial x}$, $\frac{\partial f}{\partial y}$ a $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$.
  - Pro interval se 4 uzly tedy máme 16 podmínek, z nichž najdeme 16 parametrů $c_{k,m}$ bikubické interpolace

$$f\,(x,y) = \sum_{k=1}^{4} \sum_{m=1}^{4} c_{k,m}\, \delta_x^{k-1}\, \delta_y^{m-1} \qquad \text{pro} \qquad (x,y) \in [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$$

  - Funkce je bikubická, t.j. kubická vzhledem ke každé proměnné $x$, $y$

- Bikubický spline
  - Lokální interpolace
  - Spojité parciální derivace v obou směrech na hranicích intervalů
  - Postup stejný jako u bilineární:
    nejdříve spočítáme spline např. ve směru $y$ a pak interpolujeme splinem hodnoty $\Phi\,(x_i, y_c)$, $\forall i$ ve směru $x$, abychom získali aproximovanou hodnotu v bodu $(x_c, y_c)$

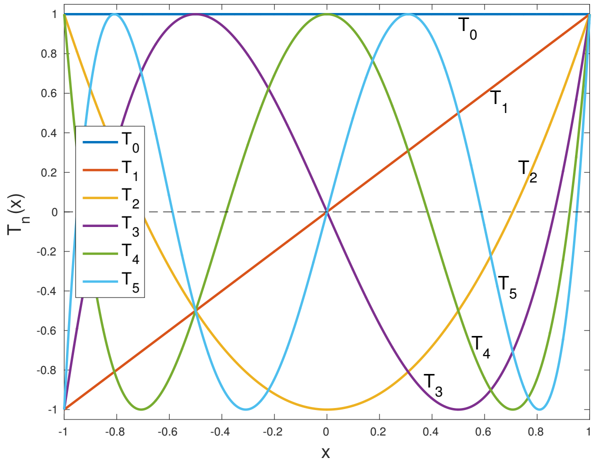
- Analogicky ve více dimenzích

## Čebyševovy polynomy

- Definice Čebyševova polynomu:

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

tedy vidíme, že $T_0 = 1$ a $T_1 = x$




- Pomocí trigonom. identit se dá ukázat, že

$$\begin{aligned} T_2(x) &= 2x^2 - 1, \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x, \\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1, \\ &\dots \end{aligned}$$

- Platí rekurentní vztah

$$\begin{aligned} T_0 &= 1 \\ T_1 &= x \\ T_{n+1}(x) &= 2x\, T_n(x) - T_{n-1}(x) \end{aligned}$$

Platí rekurentní vztah

$$
\begin{aligned}
T_0 &= 1\\
T_1 &= x\\
T_{n+1}(x) &= 2x\,T_n(x) - T_{n-1}(x)
\end{aligned}
$$

$\boxed{\text{DK}}$:

- Z identity $\cos(A+B) = \cos A \cos B - \sin A \sin B$ zjevně platí

$$
\begin{aligned}
&\cos\Big((n+1)\theta\Big) + \cos\Big((n-1)\theta\Big) = \\
&\quad = \Big(\cos(n\theta)\cos\theta - \sin(n\theta)\sin\theta\Big) + \Big(\cos(n\theta)\cos\theta + \sin(n\theta)\sin\theta\Big) = \\
&\quad = 2\cos(n\theta)\cos\theta.
\end{aligned}
$$

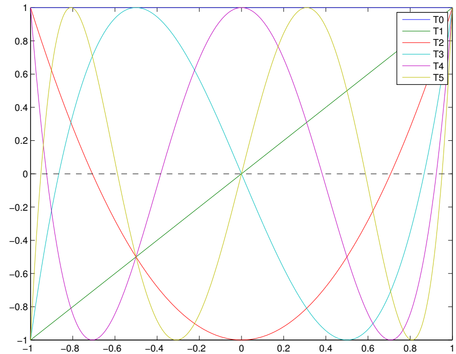
- Provedu substituci $x = \cos\theta$, neboli $\theta = \arccos x$:

$$
\underbrace{\cos\Big((n+1)\arccos x\Big)}_{T_{n+1}(x)} + \underbrace{\cos\Big((n-1)\arccos x\Big)}_{T_{n-1}(x)} = 2\,x\,\underbrace{\cos\Big(n\arccos x\Big)}_{T_n(x)}. \qquad \square
$$

# Čebyševovy polynomy

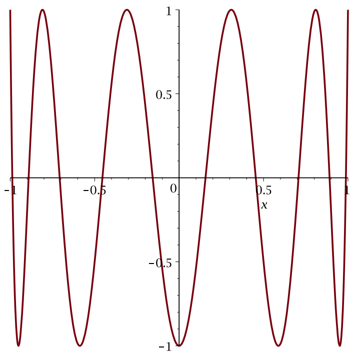
- Matlab:

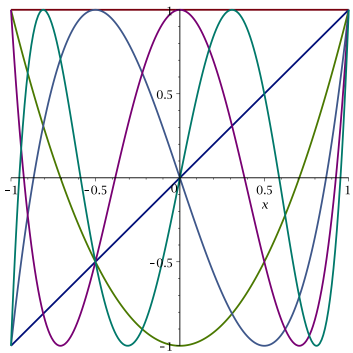
  $\boxed{\boxed{\text{skript}\quad \texttt{cheb\_poly.m}}}$:




- Maple:

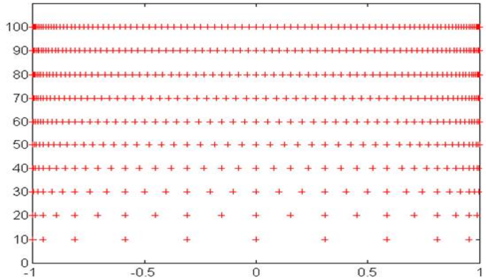
```
> plot(ChebyshevT(10,x),x=-1..1,thickness=2);
> plot([seq(ChebyshevT(i,x),i=0..5)],x=-1..1,thickness=2);
```



# Vlastnosti Čebyševových polynomů

- $T_n$ má $n$ kořenů v bodech $\quad x = \cos\left(\frac{(k-\frac{1}{2})\pi}{n}\right) \quad$ pro $k = 1, \ldots, n$.
- $T_n$ má $n+1$ extrémů $|T_n(x)| = 1$ v bodech $\quad x = \cos\left(\frac{k\pi}{n}\right) \quad$ pro $k = 0, \ldots, n$.
  - Tyto extrémy nejsou ekvidistantní
  - Všechna maxima jsou $T_n(x) = 1$, všechna minima $T_n(x) = -1$




- Ortogonalita
  - spojitě: ČP jsou OG s vahou $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ na intervalu $[-1, 1]$:

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_i(x)T_j(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x = \begin{cases} 0 & \text{pro } i \neq j \\ \frac{\pi}{2} & \text{pro } i = j \neq 0 \\ \pi & \text{pro } i = j = 0 \end{cases}$$

  - diskrétně: Nechť $x_k$ $(k = 1, \ldots, m)$ jsou kořeny $T_m(x)$. Potom pro $\forall i, j < m$ platí

$$\sum_{k=1}^{m} T_i(x_k)\, T_j(x_k) = \begin{cases} 0 & \text{pro } i \neq j \\ \frac{m}{2} & \text{pro } i = j \neq 0 \\ m & \text{pro } i = j = 0 \end{cases}$$

## Aproximace funkce pomocí Čebyševových polynomů

---

- Hodnotu funkce $f(x)$ aproximujeme z $N$ známých diskrétních hodnot této funkce v kořenech $x_k$ Čebyševova polynomu $T_N(x)$, a to lineární kombinací

$$f(x) \approx T(x) = \frac{c_0}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} c_j T_j(x),$$

kde

$$\begin{aligned} c_j &= \frac{2}{N} \sum_{k=1}^{N} f\left(x_k\right) T_j\left(x_k\right) \\ &= \frac{2}{N} \sum_{k=1}^{N} f\left[\cos\left(\frac{\pi\left(k-\frac{1}{2}\right)}{N}\right)\right] \cos\left(\frac{\pi j\left(k-\frac{1}{2}\right)}{N}\right). \end{aligned}$$

- Hodnoty funkce $f(x)$ jsou rovny hodnotám funkce $T(x)$ ve všech $N$ kořenech (nulových bodech) polynomu $T_N(x)$.

## Clenshawova formule

= Algoritmus pro rekurentní výpočet lineární kombinace funkcí, zadaných rekurentně
*- v našem případě pro výpočet Čebyševova polynomu* $\sum c_j T_j(x)$.

Mějme řadu funkcí zadánu rekurentně jako

$$F_{k+1}(x) = \alpha(k,x)\, F_k(x) + \beta(k,x)\, F_{k-1}(x),$$

Potom sumu

$$f(x) = \sum_{k=0}^{N} c_k\, F_k(x)$$

můžeme vypočítat postupně jako

$$\begin{aligned} b_{N+2} &= 0, \\ b_{N+1} &= 0, \\ b_k &= \alpha(k,x)\, b_{k+1} + \beta(k+1,x)\, b_{k+2} + c_k, \qquad\qquad k = N, N-1, \ldots, 1, \end{aligned}$$

$$f(x) = \beta(1,x)\, F_0(x)\, b_2 + F_1(x)\, b_1 + F_0(x)\, c_0.$$

*(*$b_k$ *jsou pomocné hodnoty spočítané "zpětnou rekurzí")*

- `http://en.wikipedia.org/wiki/Clenshaw_algorithm`

## Integrál a derivace pomocí Čebyševových polynomů

---

Jako bázové funkce použijeme opět Čebyševovy polynomy, stejně jako když jsme aproximovali původní funkci $f$.

- Při integraci funkce $f$ místo koeficientů $c_j$ použijeme $C_j$, kde

  $$C_j = \frac{c_{j-1} - c_{j+1}}{2j} \qquad \text{pro} \quad j \geq 1.$$

  $C_0$ můžeme zvolit libovolné, odpovídá integrační konstantě.

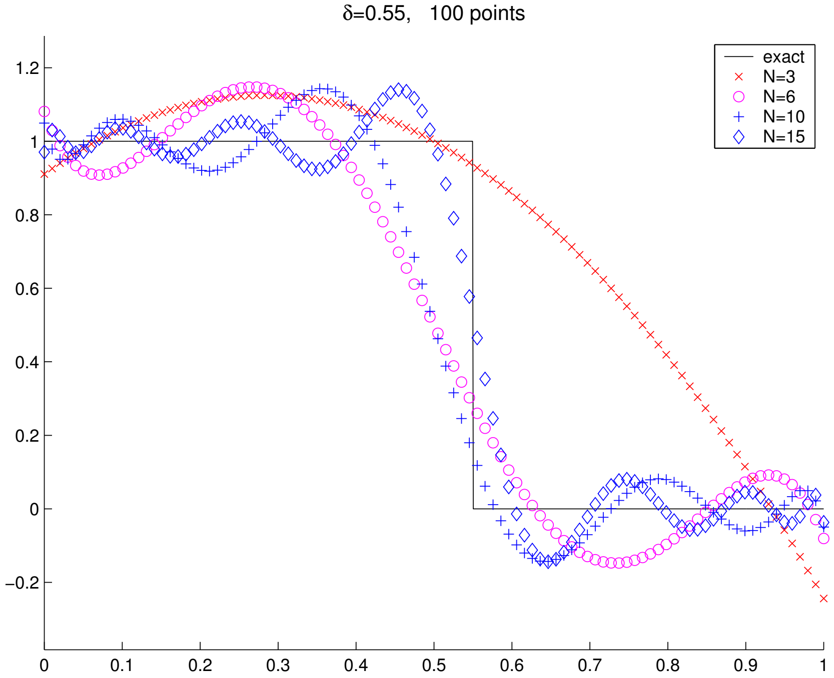
- Při derivování funkce $f$ místo $c_j$ použijeme koeficienty $c'_j$, kde

  $$c'_{j-1} = c'_{j+1} + 2\,j\,c_j, \qquad j = N-1, N-2, \ldots, 1.$$

  Rekurzi začínáme $c'_N = c'_{N-1} = 0$.

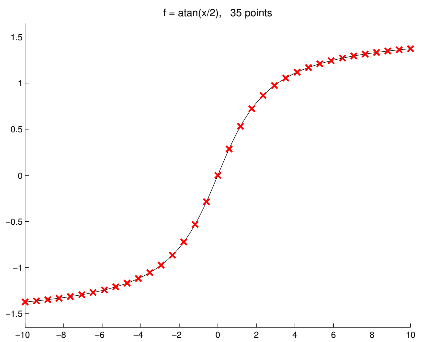
# Aproximace Čebyševovými polynomy - příklad I

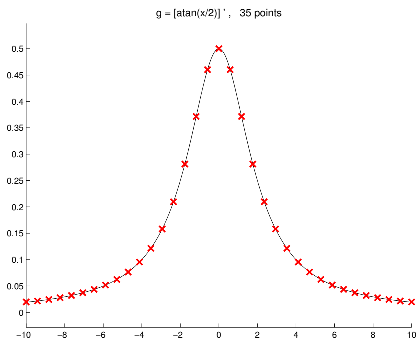
$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{pro } x < \delta \\ 0 & \text{pro } x \geq \delta \end{cases}$$

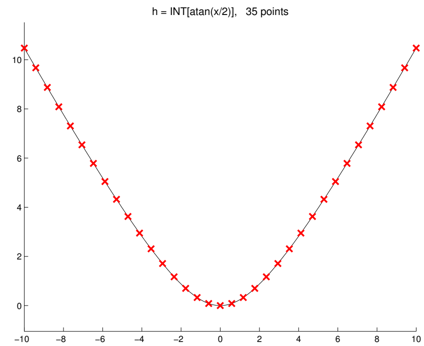


# Aproximace Čebyševovými polynomy - příklad II

$$f(x) = \arctan\left(\frac{x}{\alpha}\right), \qquad f'(x) = \frac{\alpha}{x^2+\alpha^2}, \qquad F(x) = x\arctan\left(\frac{x}{\alpha}\right) - \frac{\alpha}{2}\ln\left(1+\frac{x^2}{\alpha^2}\right)$$

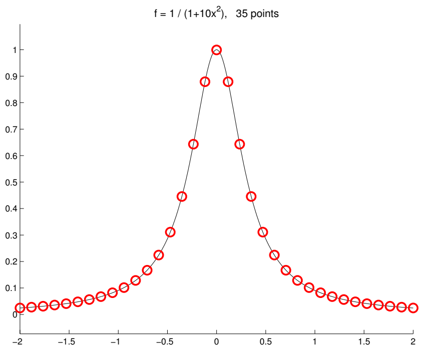


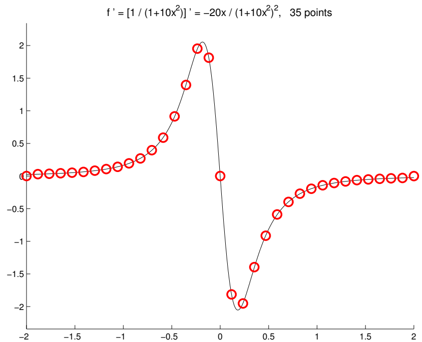



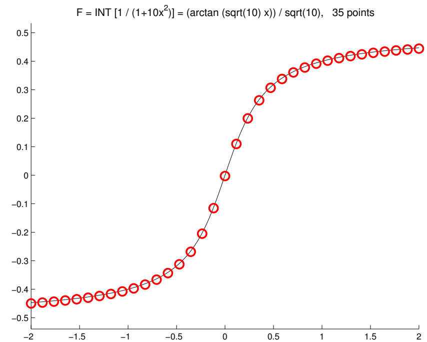



# Aproximace Čebyševovými polynomy - příklad III

$$f(x) = \frac{x}{1+\alpha x^2}, \qquad f'(x) = -\frac{2\alpha x}{\left(1+\alpha x^2\right)^2}, \qquad F(x) = \frac{\arctan\left(\sqrt{\alpha} x\right)}{\sqrt{\alpha}}$$



## Aproximace metodou nejmenších čtverců

- Diskrétní případ:
  - Funkce $f$ zadána v diskrétních bodech $x_i,\ i = 0, \ldots, N$
  - Hledáme funkci $\Phi_M(x_i)$, která v určité třídě minimalizuje funkcionál

    $$\rho_N = \sum_{i=0}^{N} w_i \left[f\left(x_i\right) - \Phi_M\left(x_i\right)\right]^2,$$

    kde $w_x$ je váhová funkce, často $w_i = 1$, $\forall i$.

- Spojitý případ:
  - Funkce $f(x)$ zadána v celém intervalu $[a, b]$
  - Hledáme funkci $\Phi_M(x)$, která v určité třídě minimalizuje funkcionál

    $$\rho_N = \int_a^b w\left(x\right)\left[f\left(x\right) - \Phi_M\left(x\right)\right]^2 \mathrm{d}x,$$

    kde $w(x)$ je váhová funkce, často $w(x) = 1$.

- Tvar funkce $\Phi_M(x)$ obvykle zadán předem až na $M$ parametrů $c_j$. Funkce může být
  - lineární: $\Phi_M(x) = \sum_{j=1}^{M} c_j\, g_j(x)$ se zadanými bázovými funkcemi $g_j(x)$

    (tzn. $\Phi_M(x)$ je zobecněný polynom)
  - nelineární vzhledem ke koeficientům $c_j$: $\Phi_M = \Phi_M\left(x; c_1, \ldots, c_M\right)$

## Aproximace metodou nejmenších čtverců - diskrétní postup

Máme zadáno $M$ bázových funkcí $g_1(x), \ldots, g_M(x)$. Koeficienty $c_j$ lze nalézt řadou metod:

1. Pro $N$ bodů $x_k$ položíme $\quad f\left(x_k\right) = \sum\limits_{j=1}^{M} c_j\, g_j\left(x_k\right), \quad$ kde $M < N$

   $\rightarrow$ máme $N$ rovnic pro $M$ neznámých koeficientů $c_j$

   $\rightarrow$ tuto soustavu řešíme SVD metodou (ve smyslu nejmenších čtverců)

2. Gradientní metody - vhodné pro funkce mnoha parametrů

3. Hledáme minimum $\rho_N^2$, tedy nulový bod derivace podle parametrů

   – Pro jednoduchost předpokládejme $w_i = 1$, $\forall i$.

   – Chceme $\partial/\partial c = 0$. Neboli: v minimu platí $\operatorname{grad} \rho_N(c_1, \ldots, c_M) = \vec{0}$

   a proto pro všechna $k = 1, \ldots, M$ položíme $\frac{\partial \rho_N}{\partial c_k} = 0$:

$$\frac{\partial \rho_N}{\partial c_k} = \frac{\partial}{\partial c_k} \sum_{i=0}^{N} \left[ f\left(x_i\right) - \sum_{j=1}^{M} c_j g_j\left(x_i\right) \right]^2 = \sum_{i=0}^{N} \left[ -2 g_k\left(x_i\right) \left( f\left(x_i\right) - \sum_{j=1}^{M} c_j g_j\left(x_i\right) \right) \right] \stackrel{!}{=} 0$$

   – Řešíme tedy soustavu tzv. *normálních rovnic* ($M$ rovnic o $M$ neznámých $c_j$)

$$\sum_{j=1}^{M} c_j \left(g_j, g_k\right) = \left(f, g_k\right), \qquad \text{kde} \qquad (f, g) = \sum_{i=1}^{N} f\left(x_i\right) g\left(x_i\right) \qquad \text{je skalární součin.}$$

## Bázové funkce pro MNČ - diskrétní případ

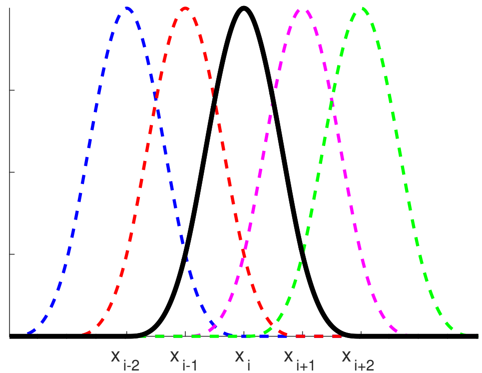
- Bázové funkce $1, x, \dots, x^{M-1}$, (tzn. aproximace polynomem)
  - Pro velká $M$ přibližně rovnoběžné
    $\Rightarrow$ špatná podmíněnost soustavy norm. rovnic $\Rightarrow$ velká chyba $c_j$
    Proto vhodné jen pro malá $M$
- Ortogonalizované polynomy (Gram-Schmidtovým procesem)
  - Odpadá zde výše jmenovaný problém pro velká $M$
- Trigonometrické polynomy: $1, \cos(x), \sin(x), \cos(2x), \sin(2x), \dots$
  - Ortogonální pro všechny body $x_j = \frac{2\pi j}{2N+1}$, kde $j = 0, \dots, 2N$
- Zvonové spliny
  - Dána ekvidistantní síť bodů s krokem $h$
  - Chceme hladkou aprox. bez konstrukce modelu

$$B_\mu(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro } q \le 0 \\ q^3 & \text{pro } p \le 0 \\ q^3 - 4\,p^3 & \text{pro } p \ge 0 \end{cases},$$

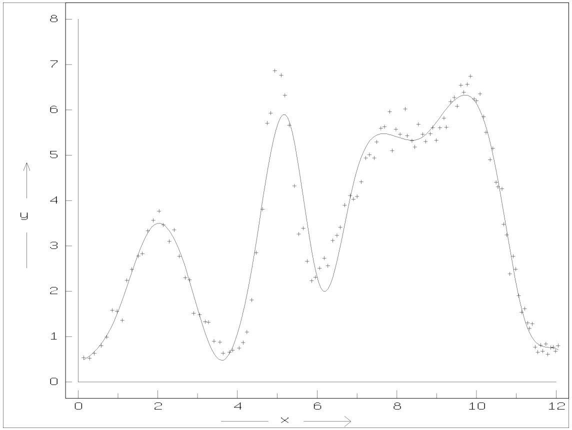
kde $$p = h - |x - \mu|, \quad q = 2h - |x - \mu|.$$

  - Koeficienty hledáme řešením lineární soustavy s pásovou maticí

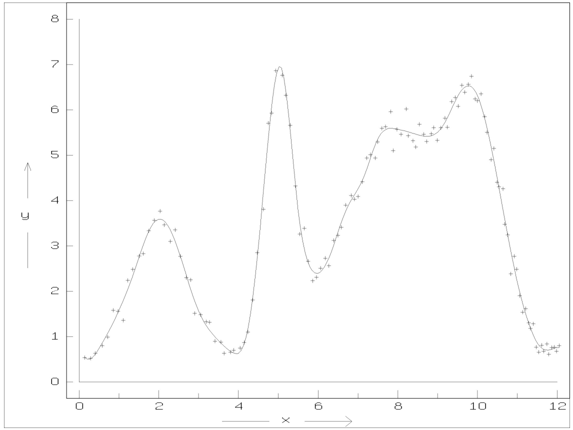
*Pro středy $\mu$ v uzlech $x_k$:*



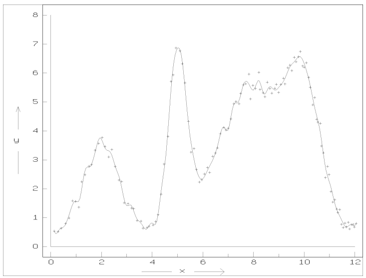
## Metoda nejmenších čtverců: příklad aproximace zvonovými spliny



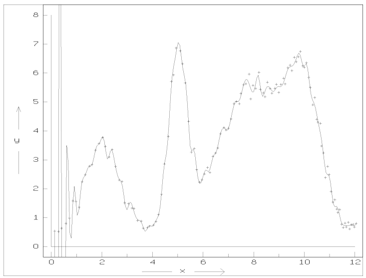

15 zvonů



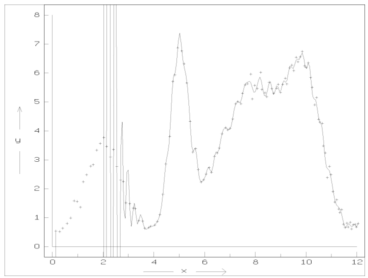

30 zvonů



60 zvonů



81 zvonů



94 zvonů

## Aproximace metodou nejmenších čtverců - spojitý postup

– Normální rovnice jsou opět $\sum_{j=1}^{M} c_j\,(g_j, g_k) = (f, g_k)$,

tentokrát se skalárním součinem (včetně vah) $(f,g) = \int_a^b w(x)\,f(x)\,g(x)\,\mathrm{d}x.$

– Bázové funkce (pro spojitý případ) volíme podle toho, jakou chceme váhu

∗ Ortogonální polynomy

| OG na intervalu | váha | polynomy |
|---|---|---|
| $x \in \langle -1, 1 \rangle$ | $w = 1$ | *Legendreovy* $P_n(x)$ |
| $x \in \langle -1, 1 \rangle$ | $w = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ | *Čebyševovy* $T_n(x)$ |
| $x \in \langle 0, \infty)$ | $w = e^{-x}$ | *Laguerrovy* $L_n(x)$ |
| $x \in (-\infty, \infty)$ | $w = e^{-x^2}$ | *Hermiteovy* $H_n(x)$ |

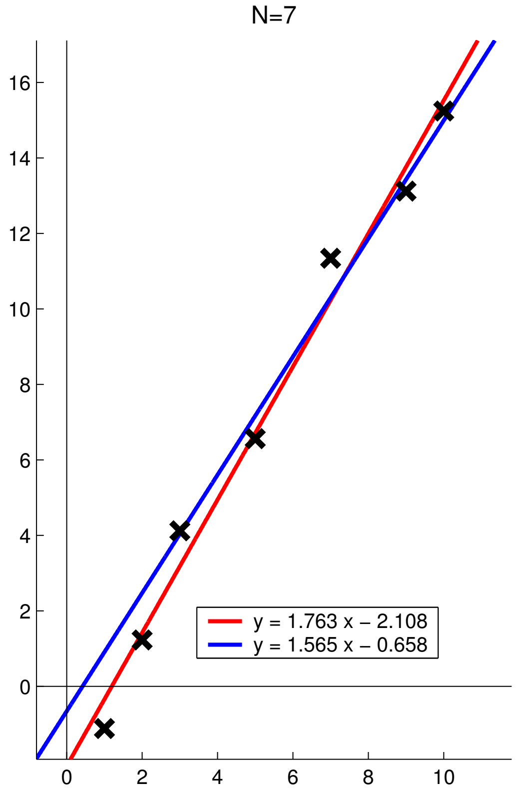
⋄ Např. chceme váhu $w = 1$ a polynomy OG v intervalu $x \in \langle -1, 1 \rangle$:
zvolíme *Legendreovy polynomy* $P_k(x) = \frac{1}{2^k\,k!}\,\frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^k$,
tzn. $P_0 = 1, \quad P_1 = x, \quad P_2 = \frac{1}{2}(3\,x^2 - 1), \quad P_3 = \frac{1}{2}(5\,x^3 - 3\,x), \ \ldots$

∗ Trigonometrické funkce $1,\ \sin(x),\ \cos(x),\ \sin(2x),\ \cos(2x),\ \ldots$

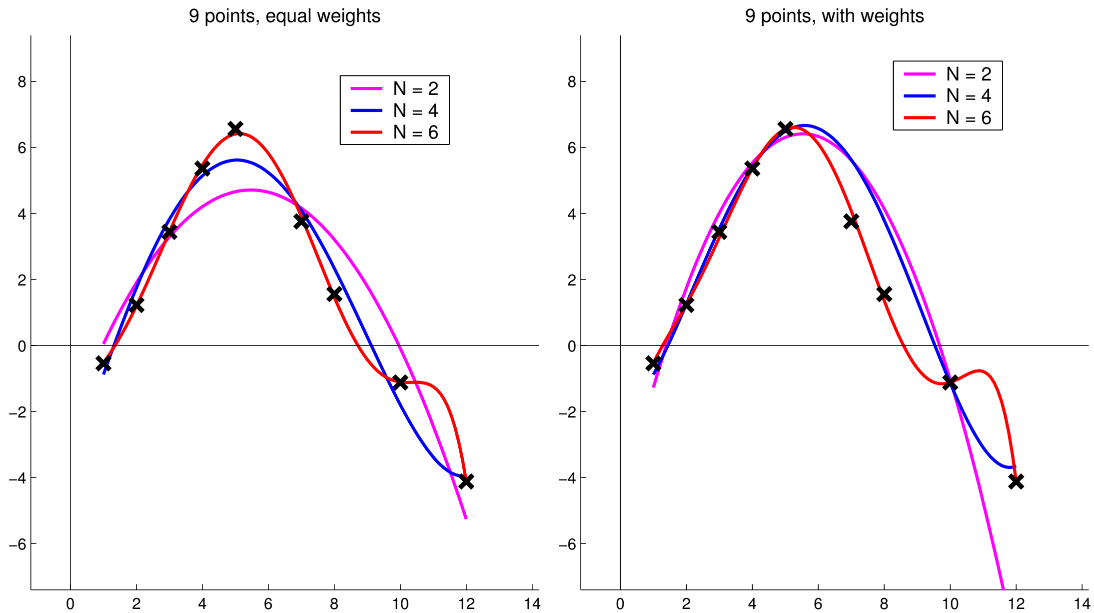
⋄ V podstatě se jedná o aproximaci Fourierovou řadou.

⋄ Ortogonální na $\langle a, a+2\pi \rangle$ pro libovolné $a$. Váhu volíme $w = 1$.

# Metoda nejmenších čtverců: Aproximace lineární funkcí



## Metoda nejmenších čtverců: Aproximace polynomy různého stupně



## Anscombova čtveřice

- Čtyři sady diskrétních dat po 11 bodech:

| 1. sada | | 2. sada | | 3. sada | | 4. sada | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $x$ | $y$ | $x$ | $y$ | $x$ | $y$ | $x$ | $y$ |
| 10.0 | 8.04 | 10.0 | 9.14 | 10.0 | 7.46 | 8.0 | 6.58 |
| 8.0 | 6.95 | 8.0 | 8.14 | 8.0 | 6.77 | 8.0 | 5.76 |
| 13.0 | 7.58 | 13.0 | 8.74 | 13.0 | 12.74 | 8.0 | 7.71 |
| 9.0 | 8.81 | 9.0 | 8.77 | 9.0 | 7.11 | 8.0 | 8.84 |
| 11.0 | 8.33 | 11.0 | 9.26 | 11.0 | 7.81 | 8.0 | 8.47 |
| 14.0 | 9.96 | 14.0 | 8.10 | 14.0 | 8.84 | 8.0 | 7.04 |
| 6.0 | 7.24 | 6.0 | 6.13 | 6.0 | 6.08 | 8.0 | 5.25 |
| 4.0 | 4.26 | 4.0 | 3.10 | 4.0 | 5.39 | 19.0 | 12.50 |
| 12.0 | 10.84 | 12.0 | 9.13 | 12.0 | 8.15 | 8.0 | 5.56 |
| 7.0 | 4.82 | 7.0 | 7.26 | 7.0 | 6.42 | 8.0 | 7.91 |
| 5.0 | 5.68 | 5.0 | 4.74 | 5.0 | 5.73 | 8.0 | 6.89 |

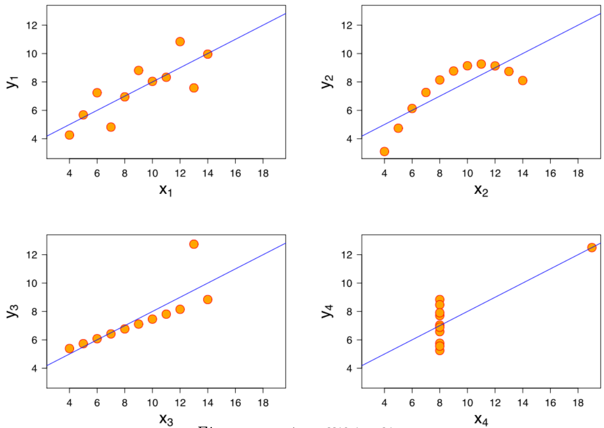


*Figure courtesy* `Wikipedia.org`

- Shodné statistické charakteristiky:

| Vlastnost | Hodnota | Přesnost |
|---|---|---|
| Střední hodnota $x$ | 9 | přesně |
| Rozptyl (stř.kv.odch.) $x$ | 11 | přesně |
| Střední hodnota $y$ | 7.50 | na 2 desetinná místa |
| Rozptyl (stř.kv.odch.) $y$ | 4.125 | $\pm 0.003$ |
| Korelace mezi $x$ a $y$ | 0.816 | na 3 desetinná místa |
| Přímka lineární regrese | $y = 3.00 + 0.500\,x$ | na 2 resp. 3 des. místa |

- [Anscombe, F. J.: Graphs in Statistical Analysis. *American Statistician* **27**(1): 17–21, 1973.]

## Hornerovo schéma

---

- Polynom $\quad P(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} a_n\, x^n \;=\; a_n\, x^n + \cdots + a_2\, x^2 + a_1\, x + a_0$

  vyhodnotíme v pořadí

$$P(x) = \Big( (\ldots \{ \, [\, (a_n\, x + a_{n-1})\, x + a_{n-2}]\, x + a_{n-3}\} x + \cdots + a_1 \Big)\; x + a_0$$

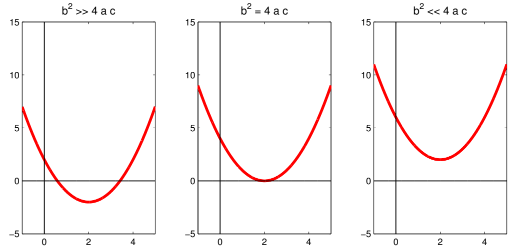
  a jeho hodnotu tedy můžeme vypočítat pomocí rekurzivního algoritmu

$q_n(x) = a_n$
`for i=n-1:-1:0`
$\quad q_i(x) = x\, q_{i+1}(x) + a_i$ $\qquad\qquad \leftarrow$ *POZN.: v tomto cyklu lze zároveň počítat derivace $P(x)$*
`end`
$p(x) = q_0(x)\,.$

- Ověříme zpětnou substitucí:

$$
\begin{aligned}
P(x) &= \Big( \ldots \{ \, [\, (\underbrace{a_n}_{q_n}\, x + a_{n-1})\, x + a_{n-2}]\, x + a_{n-3}\} x + \cdots + a_1 \Big)\, x + a_0 \\
&= \Big( \ldots \{ \, [\, \underbrace{(q_n\, x + a_{n-1})}_{q_{n-1}}\, x + a_{n-2}]\, x + a_{n-3}\} x + \cdots + a_1 \Big)\, x + a_0 \\
&= \Big( \ldots \{ \, \underbrace{[\, q_{n-1}\, x + a_{n-2}]}_{q_{n-2}}\, x + a_{n-3}\} x + \cdots + a_1 \Big)\, x + a_0 \\
&= \quad \ldots \quad = \underbrace{\Big( q_2\, x + a_1 \Big)}_{q_1} x + a_0 \;=\; \underbrace{q_1 x + a_0}_{q_0} \;=\; q_0.
\end{aligned}
$$

## Výpočet kořenů kvadratické rovnice $\quad ax^2 + bx + c = 0$




- Analyticky:
  - Vypočítáme diskriminant $\quad D = \frac{b^2}{4} - ac$
  - Pokud $D > 0$, jsou kořeny $\quad x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$
- Obtíže při numerickém výpočtu pokud $\quad |ac| \ll b^2 \quad$ a tedy $\quad \sqrt{b^2 - 4ac} \simeq |b|$
  - V čitateli odečítáme dvě podobná čísla $\Rightarrow$ velká chyba jednoho z kořenů
  - Lepší postup:
    - $\boxed{\text{LEMMA:}}$ Jsou-li $x_1, x_2$ kořeny rovnice $ax^2+bx+c=0$, potom $c = a\,x_1\,x_2$
    - Pokud $D > 0,\ b < 0$:

$$x_2 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4\,a\,c}}{2\,a}$$
$$x_1 = \frac{c}{a\,x_2}$$

V opačném případě $(D > 0,\ b > 0)$:

$$x_1 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4\,a\,c}}{2\,a}$$
$$x_2 = \frac{c}{a\,x_1}$$

- Další problém nastává pro $b^2 \simeq 4ac$, tedy pro $D \simeq 0$, to je ale jiný typ chyby

## Rekurentně zadané funkce - příklad nestabilní metody

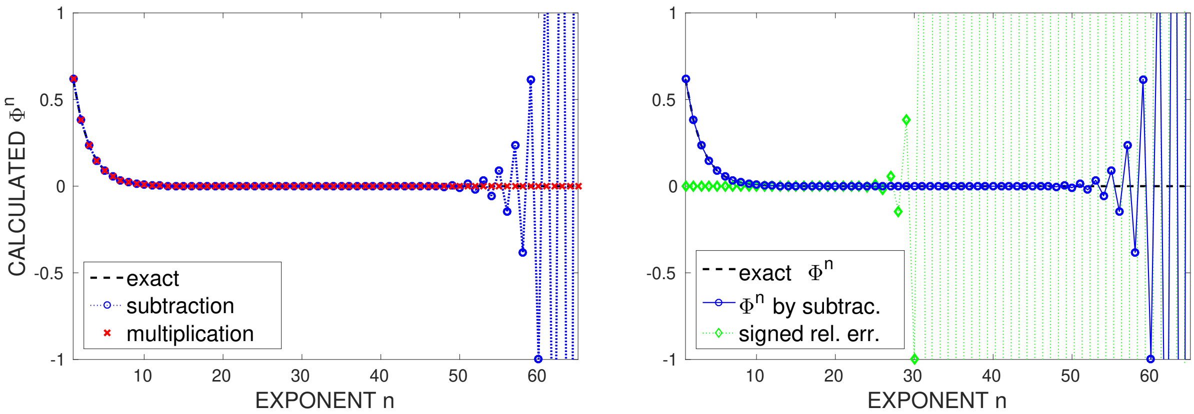
- Chceme počítat mocniny "zlatého řezu:" $\Phi = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \simeq 0.61803398$
- Platí rekurentní vztah $\Phi^{n+1} = \Phi^{n-1} - \Phi^n$
- Dva způsoby výpočtu mocniny $\Phi^k$:

  $\boxed{\text{A}}$ $\Phi^i = \Phi \cdot \Phi^{i-1} \quad \text{pro} \quad i = 1, \ldots, k$

  $\boxed{\text{B}}$ odčítáním $\Phi^{i+1} = \Phi^{i-1} - \Phi^i \quad \text{pro} \quad i = 1, \ldots, k-1$

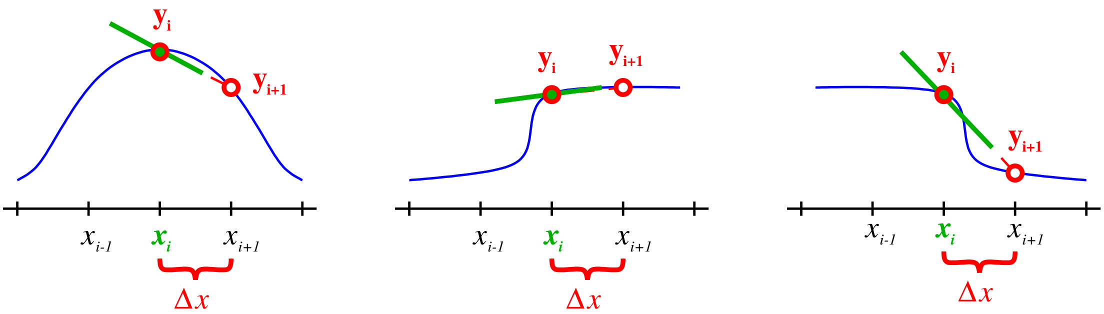
  *(Obvykle rychlejší než násobení. Můžeme, protože známe* $\Phi^0 = 1$*,* $\Phi^1 = 0.61803398$*)*

- Výsledek v jednoduché přesnosti (4B, single precision) a chyba:



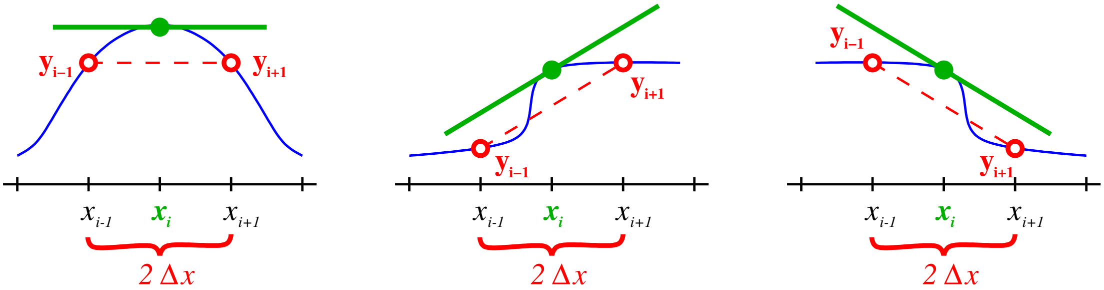
## Aproximace první derivace konečnými diferencemi

- Dopředná diference: $y'(x_i) \approx \tilde{y}'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$




$$\begin{aligned}
\tilde{y}'_i &= \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x} = \frac{y(x_i + \Delta x) - y(x_i)}{\Delta x} = \frac{y(x_i) + y'(x_i)\Delta x + y''(x_i)\frac{\Delta x^2}{2} + \ldots - y(x_i)}{\Delta x} \\
&= y'(x_i) + \frac{\Delta x}{2} y''(x_i) + \ldots \qquad \Rightarrow \text{1. řád přesnosti}
\end{aligned}$$

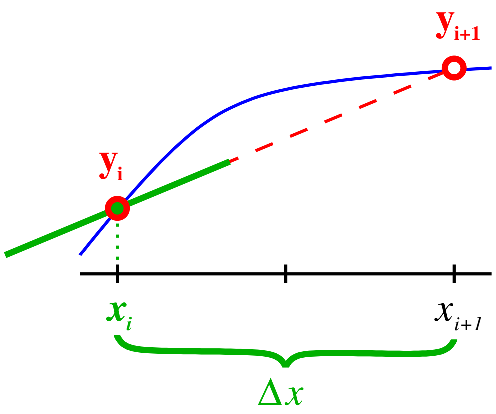
- Centrální diference: $y'(x_i) \approx \tilde{y}'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\,\Delta x}$



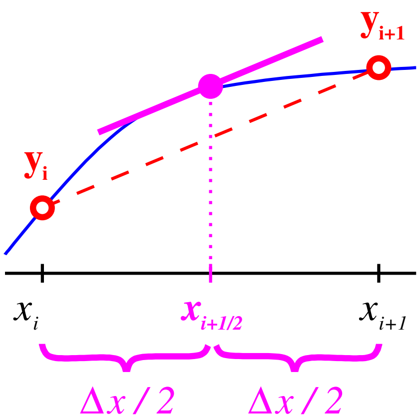

$$
\begin{aligned}
\tilde{y}'_i &= \frac{y(x_i + \Delta x) - y(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} \\
&= \frac{\left(y(x_i) + y'(x_i)\Delta x + y''(x_i)\frac{\Delta x^2}{2!} + y'''(x_i)\frac{\Delta x^3}{3!} + \ldots\right) - \left(y(x_i) - y'(x_i)\Delta x + y''(x_i)\frac{\Delta x^2}{2!} - y'''(x_i)\frac{\Delta x^3}{3!} + \ldots\right)}{2\Delta x} \\
&= y'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{6}\, y'''(x_i) + \ldots \qquad \Rightarrow \text{ 2. řád přesnosti}
\end{aligned}
$$

- POZN.: Dopředná diference je 1. řádu vzhledem k bodu $x_i$, ale 2. řádu vzhledem k $x_i + \frac{1}{2}\Delta x$. (Vzhledem k němu je totiž centrální.)

$$y'(x_i) \approx \tilde{y}'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$$

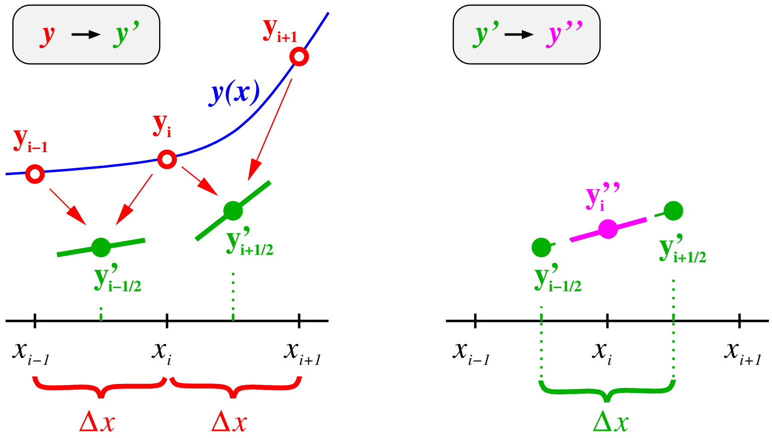



$$y'(x_i + \tfrac{1}{2}\Delta x) \approx \tilde{y}'_{i+\frac{1}{2}} = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$$



## Aproximace druhé derivace konečnými diferencemi

- Centrální diference: $$y''(x_i) \quad \approx \quad \tilde{y}_i'' = \frac{\frac{y_{i+1}-y_i}{\Delta x} - \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{\Delta x^2}$$




$$\tilde{y}_i'' = \frac{y''(x_i)\frac{\Delta x^2}{2!} + y^{(4)}(x_i)\frac{\Delta x^4}{4!} + \cdots + y''(x_i)\frac{\Delta x^2}{2!} + y^{(4)}(x_i)\frac{\Delta x^4}{4!} + \ldots}{\Delta x^2}$$

$$= y''(x_i) + y^{(4)}(x_i)\frac{\Delta x^2}{12} + \ldots \qquad \Rightarrow \text{ 2. řád přesnosti}$$

- Chceme aproximovat první derivaci pomocí konečné diference na 5 bodech

$$
\begin{aligned}
y'(x_i) &= Ay_{i-2} + By_{i-1} + Cy_i + Dy_{i+1} + Ey_{i+2} \\
&= \quad A\left[y_i - 2\Delta x y_i' + \frac{4}{2!}\Delta x^2 y_i'' - \frac{8}{3!}\Delta x^3 y_i''' + \frac{16}{4!}\Delta x^4 y_i^{(4)} + \mathcal{O}\left(\Delta x^5\right)\right] + \\
&\quad + B\left[y_i - \Delta x y_i' + \frac{1}{2!}\Delta x^2 y_i'' - \frac{1}{3!}\Delta x^3 y_i''' + \frac{1}{4!}\Delta x^4 y_i^{(4)} + \mathcal{O}\left(\Delta x^5\right)\right] + \\
&\quad + Cy_i + \\
&\quad + D\left[y_i + \Delta x y_i' + \frac{1}{2!}\Delta x^2 y_i'' + \frac{1}{3!}\Delta x^3 y_i''' + \frac{1}{4!}\Delta x^4 y_i^{(4)} + \mathcal{O}\left(\Delta x^5\right)\right] + \\
&\quad + E\left[y_i + 2\Delta x y_i' + \frac{4}{2!}\Delta x^2 y_i'' + \frac{8}{3!}\Delta x^3 y_i''' + \frac{16}{4!}\Delta x^4 y_i^{(4)} + \mathcal{O}\left(\Delta x^5\right)\right]
\end{aligned}
$$

Srovnáme podle koeficientů u derivací a máme

$$
\begin{aligned}
{\color{red}y'(x_i)} = &\quad (A + B + C + D + E)\, {\color{blue}y_i} \;+\; \Delta x\,(-2A - B + D + 2E)\, {\color{red}y_i'} \;+ \\
&+ \frac{\Delta x^2}{2!}(4A + B + D + 4E)\, {\color{blue}y_i''} \;+\; \frac{\Delta x^3}{3!}(-8A - B + D + 8E)\, {\color{blue}y_i'''} \;+ \\
&+ \frac{\Delta x^4}{4!}(16A + B + D + 16E)\, {\color{blue}y_i^{(4)}} \;+\; \mathcal{O}\left(\Delta x^5\right)
\end{aligned}
$$

Zanedbáme členy 5. a vyššího řádu a porovnáme koeficienty u derivací stejných řádů.

$$y'(x_i) \approx \tilde{y}'_i = (A+B+C+D+E)\, y_i + \Delta x\,(-2A-B+D+2E)\, y'_i + \frac{\Delta x^2}{2!}\,(4A+B+D+4E)\, y''_i + \\ + \frac{\Delta x^3}{3!}\,(-8A-B+D+8E)\, y'''_i + \frac{\Delta x^4}{4!}\,(16A+B+D+16E)\, y^{(4)}_i$$

Porovnáním koeficientů dostáváme soustavu 5 rovnic pro 5 neznámých

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ -8 & -1 & 0 & 1 & 8 \\ 16 & 1 & 0 & 1 & 16 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1!}{\Delta x} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\Delta x} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

s řešením $\frac{1}{\Delta x}\left(\frac{1}{12}, \frac{-2}{3}, 0, \frac{2}{3}, \frac{-1}{12}\right)^T$, takže první diference s přesností do 4. řádu bude

$$\tilde{y}'_i = \frac{y_{i-2} - 8y_{i-1} + 8y_{i+1} - y_{i+2}}{12\Delta x} \approx y'(x_i)$$

- Pro aproximaci druhé derivace symetrickou pětibodovou diferencí máme zjevně stejnou soustavu, jen pravá strana bude $(0, 0, \frac{2!}{\Delta x^2}, 0, 0)^T$, což dává řešení $\frac{1}{\Delta x^2}\left(\frac{-1}{12}, \frac{4}{3}, \frac{-5}{2}, \frac{4}{3}, \frac{-1}{12}\right)^T$, takže diference je

$$\tilde{y}''_i = \frac{-y_{i-2} + 16y_{i-1} - 30y_i + 16y_{i+1} - y_{i+2}}{12\Delta x^2} \approx y''(x_i)$$

s přesností 3. řádu

**Aproximace derivací pomocí interpolačního polynomu ($\equiv$ konečné diference)**

---

- Polynom stupně $n$ s uzly $x_0, \dots x_n$ má tvar

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)},$$

tedy polynom 2. stupně s ekvidistantními uzly $x_0$, $x_1$, $x_2$ je

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2\,\Delta x^2}\,y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{-\Delta x^2}\,y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2\,\Delta x^2}\,y_2$$

a jeho derivace

$$L_2'(x) = \frac{1}{2\,\Delta x^2}\Big([(x-x_2)+(x-x_1)]\,y_0 - 2[(x-x_2)+(x-x_0)]\,y_1 + [(x-x_1)+(x-x_0)]\,y_2\Big),$$

tedy v jednotlivých uzlech

$$\begin{aligned}
L_2'(x_0) &= \frac{1}{2\,\Delta x^2}\Big(-3\,\Delta x\,y_0 + 4\,\Delta x\,y_1 + \Delta x\,y_2\Big) &&= \frac{1}{2\,\Delta x}(-3\,y_0 + 4\,y_1 + y_2),\\
L_2'(x_1) &= \frac{1}{2\,\Delta x^2}\Big(-\Delta x\,y_0 + \Delta x\,y_2\Big) &&= \frac{1}{2\,\Delta x}(-\,y_0 + y_2),\\
L_2'(x_2) &= \frac{1}{2\,\Delta x^2}\Big(\Delta x\,y_0 - 4\,\Delta x\,y_1 + 3\,\Delta x\,y_2\Big) &&= \frac{1}{2\,\Delta x}(y_0 - 4\,y_1 + 3\,y_2).
\end{aligned}$$

- Derivace v jednotlivých bodech tedy bude

$$\begin{aligned} y'(x_0) &= \frac{1}{2\,\Delta x}\,(-3\,y_0 + 4\,y_1 - y_2) \quad + \quad \frac{\Delta x^2}{3}\,f'''(\xi), \\ y'(x_1) &= \frac{1}{2\,\Delta x}\,(-y_0 + y_2) \quad - \quad \frac{\Delta x^2}{6}\,f'''(\xi), \\ y'(x_2) &= \frac{1}{2\,\Delta x}\,(y_0 - 4\,y_1 + 3\,y_2) \quad + \quad \frac{\Delta x^2}{3}\,f'''(\xi). \end{aligned}$$

- Pro polynom 3. stupně (tedy na 4 bodech) máme v krajním bodu

$$y'(x_0) \;=\; \frac{1}{6\,\Delta x}\,(-11\,y_0 + 18\,y_1 - 9\,y_2 + 2\,y_3) \;-\; \frac{\Delta x^3}{4}\,f^{(4)}(\xi).$$

- Symetrické vzorce máme např. pro aproximaci derivace v prostředním z 5 bodů (což odpovídá polynomu 4. stupně)

$$y'(x_2) \;=\; \frac{1}{12\,\Delta x}\,(y_0 - 8\,y_1 + 8\,y_3 - y_4) \;+\; \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

  nebo v prostředním ze 7 bodů (polynom 6. stupně)

$$y'(x_3) \;=\; \frac{1}{60\,\Delta x}\,(-y_0 + 9\,y_1 - 45\,y_2 + 45\,y_4 - 9\,y_5 + y_6) \;+\; \mathcal{O}(\Delta x^6).$$