Aproximace funkcí

neděle 22. září 2019 13:08

aprox_pri...

Numerické metody: aproximace funkcí

Mirko Navara
http://cmp.felk.cvut.cz/~navara/
Centrum strojového vnímání, katedra kybernetiky FEL ČVUT
Karlovo náměstí, budova G, místnost 104a

http://math.feld.cvut.cz/nemecek/nummet.html

31. října 2018

Podmínky zápočtu

- Adekvátní docházka na cvičení v počítačové laboratoři (mnohé lze dělat i jinde, Maple si můžete instalovat)
- Zápočtové úlohy 5×6 bodů

Z toho postačuje 18 bodů

Literatura

Navara, M., Němeček, A.: *Numerické metody.* Skriptum ČVUT, Praha, dotisk 2005.
Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P.: *Numerical Recipes in C++ (The Art of Scientific Computing).* 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
Knuth, D.E.: *Fundamental Algorithms.* Vol. 1 of *The Art of Computer Programming,* Addison-Wesley, Reading, MA, 3rd ed. 1997.

Motivace

Úloha: Polynom rozložíme na kořenové činitele,
jenže to umíme jen do řádu 4.
Na řadu přichází přibližné numerické řešení,
jenže pak vydělení kořenovým činitelem nevyjde beze zbytku.

Úloha: (Čistý) matematik: „Soustava lineárních rovnic ve tvaru $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ má jediné řešení $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$, právě když $\det \mathbf{A} \neq 0$.“
Programátor: „Reálná čísla nesmíme testovat na rovnost!“
Numerický matematik: „Nepřesnost ve znalosti koeficientů se přenáší do nepřesnosti ve výsledku, která pro $\det \mathbf{A} \to 0$ roste nade všechny meze.“
Tomu říkáme **špatně podmíněná úloha**.

Úloha: (Čistý) matematik: „$\det \mathbf{A}$ je součet součinů

$$\sum_p (-1)^{\operatorname{sign}(p)} a_{1,p(1)} \cdot a_{2,p(2)} \cdot \ldots \cdot a_{n,p(n)} = \sum_p (-1)^{\operatorname{sign}(p)} \prod_{i \le n} a_{i,p(i)} \,,$$

kde sčítáme přes všechny permutace p indexů $1, \ldots, n$.“
Programátor i numerický matematik: „Jenže to je přibližně $n \cdot n!$ operací.“

n	2	3	4	5	10	20	30
počet operací	4	18	96	600	36 288 000	$4.8 \cdot 10^{19}$	$7.9 \cdot 10^{33}$

Stará dobrá Gaussova metoda má složitost úměrnou n^3.

APROXIMACE FUNKCÍ

Úloha: Odhadněte rychlost růstu průmyslové výroby v posledním období a nejlépe i v blízké budoucnosti.
Úloha: Ze známých hodnot burzovních indexů do dnešního dne odhadněte jejich zítřejší hodnoty.

Úloha: Náhodná veličina s normovaným normálním rozdělením je popsána distribuční funkcí

$$\Phi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{u} \exp\left(\frac{-t^2}{2}\right) dt\,.$$ — Gaussovo normální rozdělení

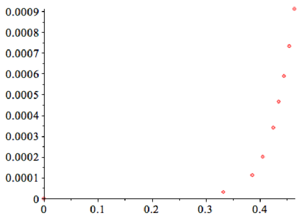
(Čistý) matematik: To je transcendentní funkce.
Numerický matematik: Numerická integrace dá přibližný výsledek s požadovanou přesností.
(Ve skutečnosti i exponenciální funkce je počítána jen numericky, procesor sám umí jen 4 základní početní úkony.)
Pro rychlejší opakovaný výpočet si připravíme tabulku Gaussova integrálu.

Úloha: Ze známého napětí baterie (v mobilu, v počítači) odhadněte zbývající kapacitu.
Vycházíme z konečně mnoha hodnot, ale aproximaci chceme použít na celém intervalu.
Zde navíc chceme, aby byla monotónní.

Úloha: Digitální obrázek zvětšíme, popř. otočíme. Změní se počet pixelů, popř. i jejich orientace.

Motivační úloha

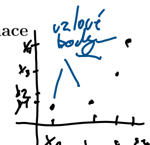
Máme nakreslit V-A charakteristiku diody na základě naměřených dat:



Motivační úlohy na aproximaci

1. **Úloha 1**: Závislost směnného kursu na čase na základě údajů z burzy.
2. **Úloha 2**: Rychlý odhad Gaussova integrálu (distribuční funkce normálního rozdělení) s využitím tabulkových hodnot.
3. **Úloha 3**: V-A charakteristika diody na základě naměřených hodnot.
4. **Úloha 4**: Teploty naměřené na meteorologické stanici.

Základní úloha aproximace



Dáno:
n různých bodů $x_0, \dots, x_{n-1} \in \mathbb{R}$ (**uzlové body**)
$y_0, \dots, y_{n-1} \in \mathbb{R}$
množina funkcí $\mathcal{F}$, definovaných alespoň v bodech $x_0, \dots, x_{n-1}$

2

Úkol:
najít funkci $\varphi \in \mathcal{F}$, která minimalizuje rozdíly $|y_i - \varphi(x_i)|$, $i = 0, \dots, n-1$
Předpoklad: $\mathcal{F}$ je lineární obal k *známých*, tzv. **aproximačních funkcí** $\varphi_0, \dots, \varphi_{k-1}$, $k \le n$: → povolené fce.

$$\mathcal{F} = \mathrm{Lin}\{\varphi_0, \dots, \varphi_{k-1}\} = \left\{ \sum c_j \varphi_j : c_j \in \mathbb{R} \right\}.$$

lineární kombinace pordených fcí

Zbývá určit reálné koeficienty
c_j, $j = 0, \dots, k-1$, lineární kombinace

$$\varphi = \sum_{j<k} c_j \, \varphi_j \, .$$

koeficient

Linearita aproximační úlohy

Většinou předpokládáme linearitu výstupu (princip superpozice), to souvisí s nezávislostí řešení na zvoleném lineárním měřítku.
Pak jakékoli řešení aproximační úlohy musí lineárně záviset na složkách aritmetického vektoru $\vec{y} = (y_0, \dots, y_{n-1}) \in \mathbb{R}^n$. Výsledná aproximace je

$$\vec{\varphi} = \sum_{j<k} c_j \, \vec{\varphi}_j \, ,$$

kde
$\vec{\varphi} = (\varphi(x_0), \dots, \varphi(x_{n-1})) \in \mathbb{R}^n$,
$\vec{\varphi}_j = (\varphi_j(x_0), \dots, \varphi_j(x_{n-1})) \in \mathbb{R}^n$, $j = 0, \dots, k-1$.
(Jiné hodnoty v aproximační úloze nefigurují.)

Vektorová formulace aproximační úlohy:
K danému vektoru $\vec{y}$ hledáme „co nejbližší" vektor $\vec{\varphi}$ z lineárního obalu **známých** vektorů $\vec{\varphi}_j$, $j = 0, \dots, k-1$.

Linearita aproximační úlohy

Vektor $\vec{y}$ má souřadnice $(y_0, \dots, y_{n-1})$ vzhledem ke **standardní bázi**

$$\vec{\psi}_0 = (1, 0, \dots, 0), \quad \vec{\psi}_1 = (0, 1, 0, \dots, 0), \quad \dots \quad , \quad \vec{\psi}_{n-1} = (0, \dots, 0, 1) \, ,$$

1. Můžeme pro $j = 0, \dots, n-1$ položit $\vec{y} = \vec{\psi}_j$ a najít aproximaci funkcí ϱ_j, resp. vektorem $\vec{\varrho}_j$.
2. Pro obecný vstupní vektor $\vec{y}$ je aproximace lineární kombinací výsledků speciálních případů:

$$\varphi = \sum_{j<n} y_j \, \varrho_j \, .$$

Funkce ϱ_j, $j = 0, \dots, n-1$, nám poskytují plnou informaci o řešení úlohy pro libovolné $\vec{y} = (y_0, \dots, y_{n-1})$.

Interpolace

Speciální případ aproximace, kdy požadujeme přesnou shodu v uzlových bodech

Dáno:
n různých uzlových bodů $x_0, \dots, x_{n-1} \in \mathbb{R}$
$y_0, \dots, y_{n-1} \in \mathbb{R}$
množina funkcí $\mathcal{F}$, definovaných alespoň v bodech $x_0, \dots, x_{n-1}$, z níž máme vybrat takovou funkci $\varphi \in \mathcal{F}$, že

$$\varphi(x_i) = y_i, \qquad i = 0, \dots, n-1$$

Prostá interpolace

ještě

Předpoklad:

$$\mathcal{F} = \mathrm{Lin}\{\varphi_0, \dots, \varphi_{n-1}\} = \left\{ \sum_{j<n} c_j \, \varphi_j : c_j \in \mathbb{R} \right\} .$$

moc

Dosazením dostáváme

$$\sum_{j<n} c_j \, \varphi_j(x_i) = y_i, \qquad i = 0, \dots, n-1 \, ,$$

což je soustava n lineárních rovnic pro neznámé c_j, $j = 0, \dots, n-1$.
Pro jednoznačnost řešení jsme položili $k = n$ a navíc potřebujeme, aby aritmetické vektory $\vec{\varphi}_j = (\varphi_j(x_0), \dots, \varphi_j(x_{n-1}))$, $j = 0, \dots, n-1$, byly lineárně nezávislé. (v uzlových bodech)
Složitost výpočtu úměrná n^3, u speciálních úloh dosáhneme menší.

Interpolace polynomem

Interpolujeme polynomem stupně menšího než n, tj. nejvýše $n-1$.
Má právě n koeficientů, což potřebujeme pro existenci a jednoznačnost řešení.
Interpolační funkce můžeme volit $\varphi_j(t) = t^j$, $j = 0, \dots, n-1$.
Výhodná může být i jiná volba báze n-rozměrného lineárního prostoru všech polynomů stupně menšího než n.

Výhody interpolace polynomem

- Polynomy lze snadno integrovat, derivovat...

- Řešitelnost:

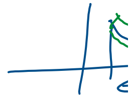
  Věta: Interpolační úlohu s n uzlovými body řeší právě jeden polynom stupně menšího než n.

- Univerzálnost:

  → tolerance chyb

  Weierstrassova věta: Nechť f je *spojitá* funkce na *uzavřeném* intervalu I a nechť je dáno číslo $\varepsilon > 0$. Pak existuje polynom φ takový, že

$$\forall t \in I : |f(t) - \varphi(t)| \le \varepsilon\,.$$



Nevýhody interpolace polynomem

- Weierstrassova věta neříká nic o potřebném stupni polynomu, takže výsledek nemusí být použitelný.

- Velmi málo skutečných závislostí je polynomiálních.

Lze řešit prostou interpolací, ale ukážeme si výhodnější postupy.

Lagrangeova konstrukce interpolačního polynomu

1. Vyřešíme speciální případy, kdy j-tá složka vektoru $\vec{y}$ je jednotková, ostatní nulové; výsledky jsou polynomy ϱ_j, $j = 0, \ldots, n-1$,

$$\varrho_j(x_i) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{pro } i = j, \\ 0 & \text{pro } i \ne j. \end{cases}$$

(δ_{ij} je tzv. **Kroneckerovo delta**)

x-ové souřadnice těch zadaných bo

→ obecný tvar

splň

Polynom ϱ_j stupně $\le n-1$ má $n-1$ kořenů $x_0, \ldots, x_{j-1}, x_{j+1}, \ldots, x_{n-1}$;

$$\begin{aligned} \varrho_j(t) &= e_j(t-x_0)\ldots(t-x_{j-1})(t-x_{j+1})\ldots(t-x_{n-1}) \\ &= e_j \prod_{i<n, i\ne j} (t-x_i)\,, \end{aligned}$$

konstanta

vynechali jsme j-tý člen

pokud: $t := x_j$: $(x_j - x_0) \ldots ($

kde e_j určíme ze vztahu $\varrho_j(x_j) = 1$:

$$e_j = \frac{1}{\prod_{i<n, i\ne j} (x_j - x_i)}\,, \qquad \varrho_j(t) = \frac{\prod_{i<n, i\ne j} (t-x_i)}{\prod_{i<n, i\ne j} (x_j - x_i)}\,.$$

≠ 0 protože body j

2. Obecné řešení úlohy interpolace polynomem je lineární kombinace

$$\varphi = \sum_{j<n} y_j\, \varrho_j\,,$$

y_j – hodnoty zadaných b

$$\varphi(t) = \sum_{j<n} y_j\, \varrho_j(t) = \sum_{j<n} y_j \frac{\prod_{i<n, i\ne j} (t-x_i)}{\prod_{i<n, i\ne j} (x_j - x_i)}\,.$$

Kontrola:

$$\varphi(x_i) = \sum_{j<n} y_j\, \varrho_j(x_i) = \sum_{j<n} y_j\, \delta_{ij} = y_i\,.$$

V praxi

Složitost úměrná n^2. $\Theta(n^2)$.

Myšlenka Lagrangeovy konstrukce interpolačního polynomu je použitelná i pro obecnější úlohy.

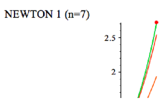
Motivace pro nespokojenost:

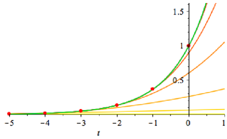
Při aproximaci vývoje na burze dostáváme průběžně nová data.
Musíme kvůli tomu počítat vše znova?
Některé mezivýsledky lze použít, pokud jsme si je nezapomněli zaznamenat.
Lze však vyjít z předchozího výsledku a jen jen opravit o určitý polynom:

Je paralelní – má prý i jiné

→ nepou

Newtonova konstrukce interpolačního polynomu





Prakt...

Jedná se stále o stejný polynom

n. uzlový bod

Konstantní polynom $c_0 = y_0$ má správnou hodnotu v uzlovém bodě x_0.
Hledaný polynom φ dostaneme přičtením vhodného polynomu ω_0 nulového v x_0: $t \mapsto (t - x_0)\,\omega_0(t)$, kde ω_0 je polynom stupně $\leq n - 2$:

$$\varphi(t) = c_0 + (t - x_0)\,\omega_0(t)\,, \qquad c_0 = y_0\,, \qquad \boxed{\omega_0(t) = \frac{\varphi(t) - c_0}{t - x_0}}$$

polynom s kořenem v x_0 (abys nezničil řešení (spíš se v uzlovém bodě nepřičte)

(zbývá vykrátit). Hodnoty v uzlových bodech: $\omega_0(x_i) = \dfrac{y_i - c_0}{x_i - x_0}$. Indukce:
Polynom ω_0 je tvaru (ω_1 je polynom stupně $\leq n - 3$):

$$\begin{aligned}
&\omega_0(t) = c_1 + (t - x_1)\,\omega_1(t)\,, && c_1 = \omega_0(x_1)\,, \quad \omega_1(t) = \frac{\omega_0(t) - c_1}{t - x_1}\,,\\
&\omega_1(t) = c_2 + (t - x_2)\,\omega_2(t)\,, && c_2 = \omega_1(x_2)\,, \quad \omega_2(t) = \frac{\omega_1(t) - c_2}{t - x_2}\,,\\
&\omega_2(t) = c_3 + (t - x_3)\,\omega_3(t)\,, && c_3 = \omega_2(x_3)\,, \quad \omega_3(t) = \frac{\omega_2(t) - c_3}{t - x_3}\,,\\
&\ldots\\
&\omega_{n-2}(t) = c_{n-1} = \omega_{n-3}(x_{n-2})\,.
\end{aligned}$$

5

Zpětným dosazením dostaneme

$$\begin{aligned}
\varphi(t) \quad = \quad & c_0 + (t - x_0)\cdot[c_1 + (t - x_1)\cdot[c_2 + \\
& + \ldots (t - x_{n-3})\cdot[c_{n-2} + (t - x_{n-2})\cdot c_{n-1}]\ldots]]\,.
\end{aligned}$$

„obdoba Hornerova schématu"

$$\begin{aligned}
\varphi(t) &= c_0 + (t - x_0)\,c_1 + (t - x_0)\,(t - x_1)\,c_2 + \ldots + c_{n-1}\prod_{i<n-1}(t - x_i)\\
&= \sum_{j<n} c_j \prod_{i<j}(t - x_i)\,.
\end{aligned}$$

Složitost výpočtu koeficientů $\sim n^2$, výpočtu jedné funkční hodnoty $\sim n$.

pr...

Fyzikální rozměr koeficientů?

zu...

Nevillův algoritmus

nebudeme probírat detailně

Zajímá nás hodnota interpolačního polynomu pouze pro jediný argument t, nikoli koeficienty.

„dědeč...

Jedním bodem (x_i, y_i) proložíme konstantní polynom s hodnotou y_i.
Dvěma body (x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1}) proložíme lineární polynom, jeho hodnota v t je lineární kombinací hodnot y_i, y_{i+1}, konkrétně

$$y_{i,i+1} = \frac{(t - x_{i+1})\,y_i + (x_i - t)\,y_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\,,$$

atd.

Výho...

$y_{i,i+1,\ldots,i+m-1}$ ... hodnota interpolačního polynomu s m uzlovými body $x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+m-1}$ v bodě t
$y_{i+1,\ldots,i+m-1,i+m}$ ... hodnota interpolačního polynomu s m uzlovými body $x_{i+1}, \ldots, x_{i+m-1}, x_{i+m}$ v bodě t
Interpolační polynom s $m + 1$ uzlovými body $x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+m}$ má v bodě t hodnotu

$$y_{i,i+1,\ldots,i+m} = \frac{(t - x_{i+m})\,y_{i,i+1,\ldots,i+m-1} + (x_i - t)\,y_{i+1,\ldots,i+m-1,i+m}}{x_i - x_{i+m}}$$

Postupujeme od hodnot $y_0, y_1, \ldots, y_{n-1}$ k hodnotě $y_{0,1,\ldots,n-1} = \varphi(t) =$ výsledek.
Numerické chyby uvedeného algoritmu lze omezit, budeme-li místo hodnot interpolačních polynomů počítat s jejich rozdíly,

$$\begin{aligned}
C_{i,m} &= y_{i,\ldots,i+m} - y_{i,\ldots,i+m-1}\,,\\
D_{i,m} &= y_{i,\ldots,i+m} - y_{i+1,\ldots,i+m}\,,
\end{aligned}$$

které lze počítat podle rekurentních vzorců

$$(x_i - t)\,(C_{i+1,m-1} - D_{i,m-1})$$

$$
\begin{aligned}
C_{i,m} &= \frac{\dots}{x_i - x_{i+m}}\,, \\
D_{i,m} &= \frac{(x_{i+m} - t)\,(C_{i+1,m-1} - D_{i,m-1})}{x_i - x_{i+m}}
\end{aligned}
$$

a výsledek např. jako

$$
y_{0,1,\ldots,n-1} = y_0 + \sum_{m=1}^{n-1} C_{0,m}\,.
$$

Chyba aproximace interpolačním polynomem

V uzlových bodech chyba metody nulová, pouze chyba zaokrouhlovací.

Chyba metody v ostatních bodech, nahrazujeme-li funkci f výsledkem její interpolace.

6

Odvození chyby aproximace interpolačním polynomem

není uzlový bod

Chyba metody $f - \varphi$ je v uzlových bodech nulová, zkoumáme její hodnotu $f(u) - \varphi(u)$ v $u \notin \{x_0, \ldots, x_{n-1}\}$.

Polynom $W(t) = \prod_{i<n} (t - x_i)$ stupně n je rovněž nulový v uzlových bodech a nenulový v u; od chyby metody odečteme jeho P_u-násobek, kde P_u je zvoleno tak, že funkce

$$
g_u = f - \varphi + P_u\,W
$$

je navíc nulová v u:

tu mě zajímá

$$
\begin{aligned}
0 = g_u(u) &= \overbrace{f(u) - \varphi(u)}^{\text{chyba v } u} - P_u\,W(u)\,, \\
P_u &= \frac{f(u) - \varphi(u)}{W(u)}\,.
\end{aligned}
$$

$$
g_u = f - \varphi - P_u\,W
$$

může být i 0 asi

má kořeny $u, x_0, \ldots, x_{n-1}$;
pokud má spojitou derivaci, pak mezi každými dvěma kořeny leží kořen její derivace

$n+1$ kořenů funkce g_u
$\geq n$ kořenů funkce g'_u,
$\geq n-1$ kořenů funkce g''_u,
...
≥ 1 kořen funkce $g_u^{(n)}$, označme jej ξ_u [ksí] (závisí na u)
(potřebovali jsme spojité derivace do řádu n)
S využitím $W^{(n)}(t) = (t^n)^{(n)} = n!$,

$$
0 = g_u^{(n)}(\xi_u) = f^{(n)}(\xi_u) - P_u\,n! = f^{(n)}(\xi_u) - \frac{f(u) - \varphi(u)}{W(u)}\,n!
$$

$$
f(u) - \varphi(u) = \frac{f^{(n)}(\xi_u)}{n!}\,W(u)
$$

CHYBA

$$
\boxed{|f(u) - \varphi(u)|} = \frac{|f^{(n)}(\xi_u)|}{n!}\,|W(u)|
$$

"velké číslo slibuje ma

$|f^{(n)}(\xi_u)|$ nahradíme horním odhadem na intervalu $I \supseteq \{u, x_0, \ldots, x_{n-1}\}$:
$M_n \geq \max_{t \in I} |f^{(n)}(t)|$

interval obsahující uzlové body

$$
|f(u) - \varphi(u)| \leq \frac{M_n}{n!}\,|W(u)|
$$

polynom

čím víc bodů, tím menší

Pomocí horního odhadu $\overline{W} \geq \max_{t \in I} |W(t)|$ dostaneme odhad chyby nezávislý na u:

horní odhad polynomu W

$$
|f(u) - \varphi(u)| \leq \frac{M_n}{n!}\,\overline{W}
$$

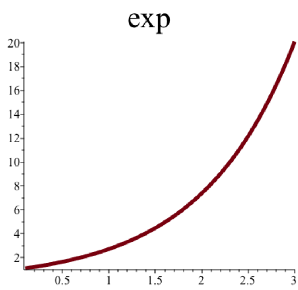
Předpoklad: f má spojité derivace do řádu n na *uzavřeném* intervalu $I \supseteq \{u, x_0, \ldots, x_{n-1}\}$.

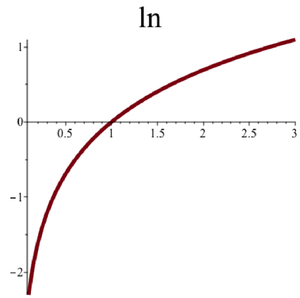
Co můžeme ovlivnit

Volíme

1. počet uzlových bodů $\implies$ koeficient $\dfrac{M_n}{n!}$
2. jejich rozložení $\implies \overline{W}$ → rozložení ovlivňuje polynom

Ad 1: $I = \langle 0.1, 3 \rangle$





f	exp	ln
$\lvert f^{(n)}(u) \rvert$	$\exp(u)$	$\frac{(n-1)!}{u^n}$
argmax	3	0.1
$\frac{M_n}{n!}$	$\frac{\exp(3)}{n!}$	$\frac{10^n}{n}$
$\frac{M_2}{2!}$	10	50
$\frac{M_4}{4!}$	0.84	2500
$\frac{M_8}{8!}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1.25 \cdot 10^7$
$\frac{M_{16}}{16!}$	10^{-12}	$6.25 \cdot 10^{14}$

n-krát derivujeme

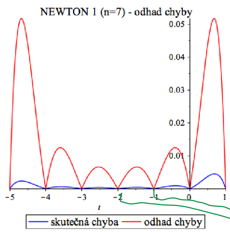
kde je n-tá derivace největší

u – body ve kterém počítáme

jde k 0.

roste → metoda dopadla špatně pro aproximaci logaritmu.

Chyba aproximace interpolačním polynomem



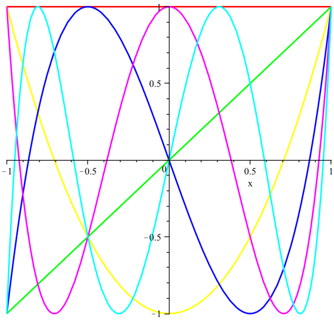
uzlové body – v nich chyba musí t

(Červeně odhad chyby, modře skutečná chyba.)

Rozlišujeme:

- **extrapolaci**, kdy aproximujeme mimo interval $I(x_0, \ldots, x_{n-1})$ vymezený uzlovými body → mívá větší chyby -
- **interpolaci (v užším smyslu)**, kdy aproximujeme na intervalu $I(x_0, \ldots, x_{n-1})$

Čebyševovy polynomy



(okolo nuly)
čtverec, vepisujeme do něj polynom ta[k] aby se do něj
→ extrémy: 1,
→ krajní body: 1,

$$\gamma_n(t) = \cos(n \arccos t)\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

není praktické takto počítat

Počítají se z rekurentního vztahu

$$\begin{aligned} \gamma_0(t) &= 1 = \cos(0 \arccos t), \\ \gamma_1(t) &= t = \cos(1 \arccos t), \\ \gamma_n(t) &= 2t\gamma_{n-1}(t) - \gamma_{n-2}(t), \qquad n \geq 2\,, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cos\alpha + \cos\beta &= 2\cos\frac{\alpha-\beta}{2}\cos\frac{\alpha+\beta}{2}\,, \quad \alpha := n\theta\,, \quad \beta := (n-2)\theta\,, \\ \cos n\theta + \cos(n-2)\theta &= 2\cos\theta\,\cos(n-1)\theta\,, \\ \cos n\theta &= 2\underbrace{\cos\theta}_{t}\cos(n-1)\theta - \cos(n-2)\theta\,, \quad \theta := \arccos t\,, \\ \underbrace{\cos(n\arccos t)}_{\gamma_n(t)} &= 2t\,\underbrace{(\cos(n-1)\arccos t)}_{\gamma_{n-1}(t)} - \underbrace{\cos((n-2)\arccos t)}_{\gamma_{n-2}(t)}\,. \end{aligned}$$

odvození

Obor hodnot funkcí γ_n, $n \geq 1$, na intervalu $\langle -1, 1\rangle$ je $\langle -1, 1\rangle$.

Kořeny $z_0, \ldots, z_{n-1}$ jsou řešení rovnice

$$\begin{aligned} \cos(n\arccos z_k) &= 0\,, \\ n\arccos z_k &= \frac{\pi}{2} + k\pi\,, \\ \arccos z_k &= \frac{1}{n}\left(\frac{\pi}{2} + k\pi\right) \in \langle 0, \pi\rangle\,, \\ z_k &= \cos\left(\frac{\pi}{n}\left(k + \frac{1}{2}\right)\right)\,, \qquad k = 0, 1, \ldots, n-1\,. \end{aligned}$$

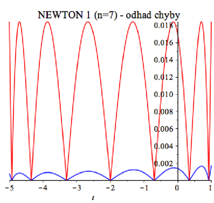
→ vezmeme za (

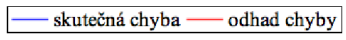
To je doporučené **kosinové** rozdělení uzlových bodů na intervalu $\langle -1, 1\rangle$; obecně na $\langle a, b\rangle$

$$x_k = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}z_k = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\cos\frac{\pi(k+\frac{1}{2})}{n}$$

Chyba aproximace při kosinovém rozdělení uzlových bodů

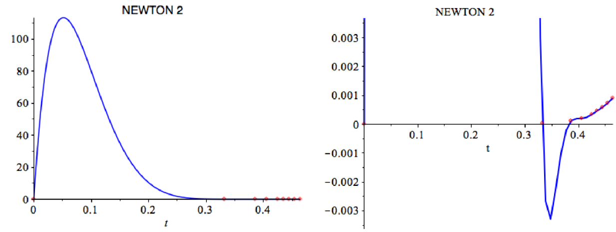
9



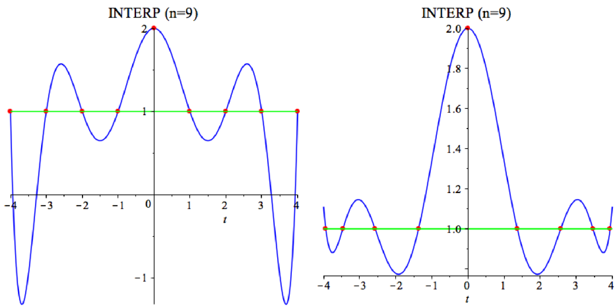


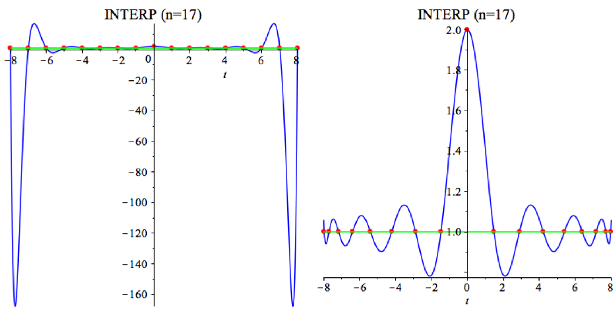
(Červeně odhad chyby, modře skutečná chyba.)

Motivační úloha - interpolační polynom



Vliv lokálních změn na interpolační polynom





Hermitův interpolační polynom

Příklad:
Dáno: $x_0 = 0, x_1 = 1$,
$y_{0,0}, y_{1,0}, y_{0,1}, y_{1,1} \in \mathbb{R}$

Hledáme polynom φ stupně nejvýše 3, splňující

$$\varphi(x_0) = y_{0,0}\,, \quad \varphi(x_1) = y_{1,0}\,, \quad \varphi'(x_0) = y_{0,1}\,, \quad \varphi'(x_1) = y_{1,1}$$

Stejně jako u Lagrangeovy konstrukce interpolačního polynomu sestrojíme nejdříve polynomy $\eta, \varrho, \sigma, \tau$ stupně 3:

ψ	$\psi(0)$	$\psi(1)$	$\psi'(0)$	$\psi'(1)$
η	1	0	0	0
ϱ	0	1	0	0
σ	0	0	1	0
τ	0	0	0	1

Polynom η má dvojnásobný kořen 1, je tedy tvaru

$$\eta(t) = (at + b)(t-1)^2\,,$$

kde a, b určíme z hodnot v bodě 0:

$$\begin{aligned} \eta(0) = b &= 1 \\ \eta'(0) = a - 2b &= 0 \end{aligned}$$

$$a = 2, \qquad b = 1, \qquad \eta(t) = (2t+1)(t-1)^2$$

ϱ má dvojnásobný kořen 0, je tedy tvaru

$$\varrho(t) = (a^* t + b^*)\, t^2\,,$$

kde a^*, b^* určíme z hodnot v bodě 1:

$$\begin{aligned} \varrho(1) = a^* + b^* &= 1 \\ \varrho'(1) = 3a^* + 2b^* &= 0 \end{aligned}$$

$$a^* = -2, \qquad b^* = 3, \qquad \varrho(t) = (-2t+3)t^2$$

σ má dvojnásobný kořen 1 a jednoduchý kořen 0, je tedy tvaru

$$\sigma(t) = c\,t\,(t-1)^2\,,$$

kde c určíme z hodnoty derivace v bodě 0:

$$\sigma'(0) = c = 1$$

$$\sigma(t) = t(t-1)^2$$

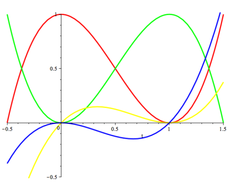
τ má dvojnásobný kořen 0 a jednoduchý kořen 1, je tedy tvaru

$$\tau(t) = c^*\, t^2 (t-1)\,,$$

kde c^* určíme z hodnoty derivace v bodě 1:

$$\tau'(1) = c^* = 1$$

$$\tau(t) = t^2(t-1)$$



φ dostaneme jako lineární kombinaci $\eta, \varrho, \sigma, \tau$,

$$\varphi = y_{0,0}\,\eta + y_{1,0}\,\varrho + y_{0,1}\,\sigma + y_{1,1}\,\tau$$

Aproximace Taylorovou řadou

(přesněji Taylorovým polynomem)

Speciální případ Hermitova interpolačního polynomu s jediným uzlovým bodem, v němž je zadáno prvních n derivací (včetně nulté).

Úloha: Dáno:
Uzlový bod x_0
n hodnot $y_{0,0}, y_{0,1}, \dots, y_{0,n-1} \in \mathbb{R}$

Hledáme polynom φ stupně menšího než n takový, že

$$\varphi^{(j)}(x_0) = y_{0,j}\,, \qquad j = 0, \dots, n-1\,.$$

Řešení je ve tvaru

$$\varphi = \sum_{j<n} y_{0,j}\,\psi_j\,, \qquad \psi_j^{(i)}(x_0) = \delta_{ij}\,, \qquad \psi_j(t) = \frac{1}{j!}\,(t-x_0)^j$$

$$\varphi(t) = \sum_{j<n} \frac{y_{0,j}}{j!}\,(t-x_0)^j\,.$$

Pokud jsou $y_{0,0}, y_{0,1}, \dots, y_{0,n-1}$ hodnoty derivací nějaké funkce f v bodě x_0, tj. $y_{0,j} = f^{(j)}(x_0)$, pak φ je konečná Taylorova řada se středem x_0:

$$\varphi(t) = \sum_{j<n} \frac{f^{(j)}(x_0)}{j!}\,(t-x_0)^j\,.$$

Pokud f má na intervalu $I(u, x_0)$ spojitou derivaci řádu n, pak

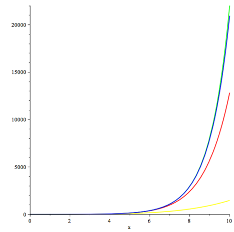
$$f(u) - \varphi(u) = \frac{f^{(n)}(\xi_u)}{n!}\,(u-x_0)^n\,,$$

kde $\xi_u \in I(u, x_0)$

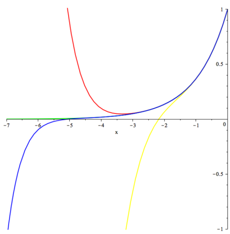
$$|f(u) - \varphi(u)| \le \frac{M_n}{n!}\,|(u-x_0)^n|\,.$$

Jediný rozdíl od chyby interpolačního polynomu je, že polynom $W(u)$ s kořeny $x_0, \dots, x_{n-1}$ je nahrazen polynomem $(u-x_0)^n$ (stejného stupně) s n-násobným kořenem x_0.

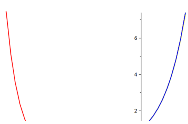
Aproximace Taylorovou řadou je velmi přesná v okolí x_0, na úkor chyby ve vzdálenějších bodech.

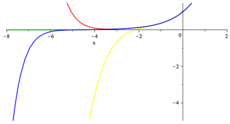


Aproximace exponenciály (zeleně) Taylorovými polynomy stupňů 5, 10, 15 pro kladné argumenty.



Aproximace exponenciály (zeleně) Taylorovými polynomy stupňů 5, 10, 15 pro záporné argumenty.





Aproximace exponenciály (zeleně) Taylorovými polynomy stupňů 5, 10, 15 pro kladné i záporné argumenty.

Interpolace spliny

Nevýhoda interpolace polynomem: malá změna vstupní hodnoty v jednom uzlovém bodě může zásadně ovlivnit výsledné hodnoty v místech značně vzdálených.

Spline je funkce po částech polynomiální. (Je dána různými polynomy nízkého stupně na jednotlivých intervalech.)

Nejjednodušším případem je náhrada po částech lineární funkcí, „lomenou čarou", **lineární spline**.

Kubický spline

Úloha: Dáno: n **vzestupně uspořádaných** uzlových bodů $x_0, \dots, x_{n-1}$,
n hodnot $y_0, \dots, y_{n-1}$.
Hledáme funkci φ, definovanou na intervalu $\langle x_0, x_{n-1}\rangle$, splňující:

- $\varphi(x_i) = y_i, \qquad i = 0, \dots, n-1$,
- φ se na intervalu $\langle x_{i-1}, x_i\rangle$ shoduje s nějakým polynomem φ_i stupně nejvýše 3, $\qquad i = 1, \dots, n-1$,
- φ má na intervalu $\langle x_0, x_{n-1}\rangle$ spojitou první a druhou derivaci.

(Toto zadání bude nutné ještě upřesnit.)

Spojitost derivací stačí zajistit v bodech $x_1, \dots, x_{n-2}$:

$$\begin{aligned} \varphi_i'(x_i) &= \varphi_{i+1}'(x_i), \qquad i = 1, \dots, n-2\,, \\ \varphi_i''(x_i) &= \varphi_{i+1}''(x_i), \qquad i = 1, \dots, n-2\,. \end{aligned}$$

Předpokládejme, že známe hodnoty $\varphi'(x_i) = \varphi_i'(x_i) = \varphi_{i+1}'(x_i)$, $i = 0, \dots, n-1$. Tím je zajištěna spojitost φ'.

Polynomy φ_i, $i = 1, \dots, n-1$ lze najít stejně jako Hermitův interpolační polynom v předchozí úloze, pouze uzlové body jsou x_{i-1}, x_i místo $0, 1$.

Obecný případ dostaneme lineární transformací

$$t = x_{i-1} + (x_i - x_{i-1})\,u\,, \qquad u = \frac{t - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}\,.$$

Na intervalu $\langle x_{i-1}, x_i\rangle$, $i = 1, \dots, n-1$, dostáváme

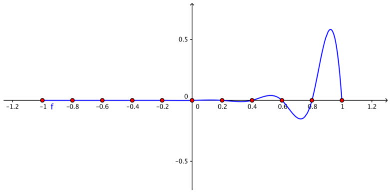
$$\varphi_i(t) = y_{i-1}\eta_i(t) + y_i\varrho_i(t) + \varphi'(x_{i-1})\sigma_i(t) + \varphi'(x_i)\tau_i(t)\,,$$

kde $\eta_i, \varrho_i, \sigma_i, \tau_i$ jsou polynomy stupně nejvýše 3 (určené stejně jako polynomy $\eta, \varrho, \sigma, \tau$ v úloze na Hermitův interpolační polynom).
Zbývá určit $\varphi'(x_i)$, $i = 0, \dots, n-1$:

$$\begin{aligned} & y_{i-1}\eta_i''(x_i) + y_i\varrho_i''(x_i) + \varphi'(x_{i-1})\sigma_i''(x_i) + \varphi'(x_i)\tau_i''(x_i) = \\ = \; & y_i\eta_{i+1}''(x_i) + y_{i+1}\varrho_{i+1}''(x_i) + \varphi'(x_i)\sigma_{i+1}''(x_i) + \varphi'(x_{i+1})\tau_{i+1}''(x_i)\,, \end{aligned}$$

kde $i = 1, \dots, n-2 \quad (n-2$ lineárních rovnic o n neznámých).

Zbývají 2 volitelné parametry. Obvykle se volí $\varphi''(x_0) = \varphi''(x_{n-1}) = 0$, tzv. **přirozený spline**. To znamená, že u první a poslední rovnice nahradíme jednu stranu nulou. Tato volba se projeví pouze na okrajích intervalu.



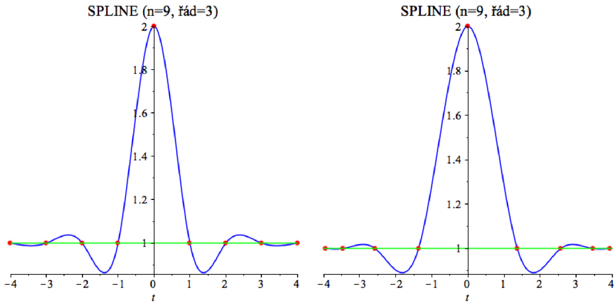
Výpočet má dvě části:
1. Výpočet koeficientů $\varphi'(x_i)$, $i = 0, \ldots, n-1$.
2. Výpočet funkčních hodnot.

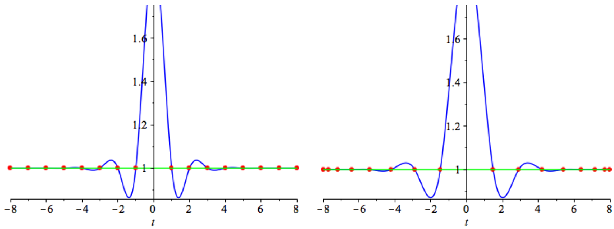
Matice soustavy je **třídiagonální** (lze využít pro efektivnější řešení).
Spliny nelze extrapolovat!

Přesto to většina implementací dovoluje.

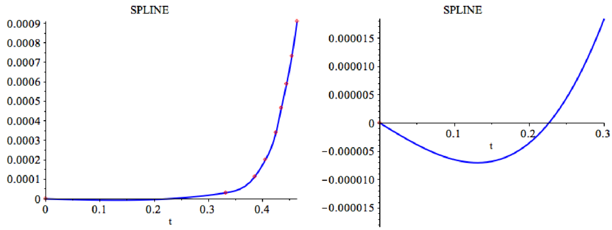
Poznámka: Volba rozdělení má v případě interpolace splinem výrazně menší vliv.

Vliv lokálních změn na spline





Motivační úloha - spline



Úloha: Dáno:
n uzlových bodů $x_0, \ldots, x_{n-1}$
příslušné hodnoty $y_0, \ldots, y_{n-1}$
k funkcí $\varphi_0, \ldots, \varphi_{k-1}$, $k \leq n$, definovaných alespoň ve všech uzlových bodech.
Hledáme: koeficienty $c_0, \ldots, c_{k-1} \in \mathbb{R}$ lineární kombinace funkcí φ_j

$$\varphi = \sum_{j<k} c_j \, \varphi_j$$

takové, abychom minimalizovali výraz

$$H_2 = \sum_{i<n} (\varphi(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i<n} \left(\sum_{j<k} c_j \, \varphi_j(x_i) - y_i \right)^2$$

Modifikovaná kritéria

$$H_{2w} = \sum_{i<n} w_i \, (\varphi(x_i) - y_i)^2$$

řeší se analogicky,

$$H_1 = \sum_{i<n} |\varphi(x_i) - y_i|$$

nevede na jednoznačné řešení, neužívá se,

$$H_0 = \max_{i<n} |\varphi(x_i) - y_i|$$

řeší se (tzv. Čebyševova aproximace), ale je obtížnější.

Řešení aproximace podle kritéria nejmenších čtverců

V $\mathbb{R}^n$ zavedeme skalární součin vektorů
$\vec{u} = (u_0, \ldots, u_{n-1})$, $\vec{v} = (v_0, \ldots, v_{n-1})$:

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = \sum_{i<n} u_i \cdot v_i \, .$$

Máme aproximovat vektor $\vec{y}$ lineární kombinací $\vec{\varphi} = \sum_{j<k} c_j \, \vec{\varphi}_j$,
kritérium je $H_2 = (\vec{\varphi} - \vec{y}) \cdot (\vec{\varphi} - \vec{y}) = \|\vec{\varphi} - \vec{y}\|^2$.
Řešení: Kolmý průmět splňuje soustavu podmínek (pro $m = 0, \ldots, k-1$)

$$\begin{aligned}(\vec{\varphi}-\vec{y}) &\perp \vec{\varphi}_m,\\ (\vec{\varphi}-\vec{y})\cdot\vec{\varphi}_m &= 0,\\ \vec{\varphi}\cdot\vec{\varphi}_m &= \vec{y}\cdot\vec{\varphi}_m.\end{aligned}$$

$\vec{\varphi}$ se vzhledem ke skalárním součinům s vektory $\vec{\varphi}_m$ chová stejně jako $\vec{y}$.

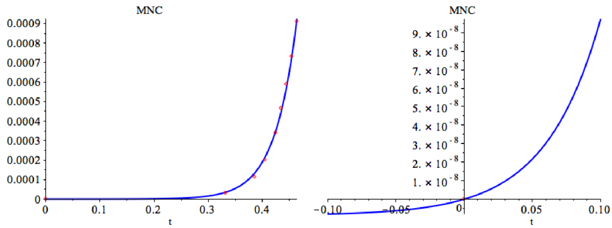
$$\begin{aligned}\left(\sum_{j<k} c_j\,\vec{\varphi}_j\right)\cdot\vec{\varphi}_m &= \vec{y}\cdot\vec{\varphi}_m,\\ \sum_{j<k} c_j(\vec{\varphi}_j\cdot\vec{\varphi}_m) &= \vec{y}\cdot\vec{\varphi}_m, \qquad m=0,\dots,k-1;\end{aligned}$$

soustava lineárních rovnic pro neznámé $c_0,\dots,c_{k-1}$ (**soustava normálních rovnic**).

Speciální případ: aproximujeme polynomem stupně menšího než k, můžeme volit $\varphi_j(t)=t^j$,

$$\vec{\varphi}_j\cdot\vec{\varphi}_m=\sum_{i<n} x_i^j\cdot x_i^m=\sum_{i<n} x_i^{j+m}\,.$$

Motivační úloha - metoda nejmenších čtverců



Aproximace V-A charakteristiky diody lineární kombinací konstanty a dvou exponenciál s vhodnými základy.

V podprostoru $P=\mathrm{Lin}\{\vec{\varphi}_0,\dots,\vec{\varphi}_{k-1}\}$ najdeme ortogonální bázi $(\vec{\psi}_0,\dots,\vec{\psi}_{k-1})$,

$$\vec{\psi}_j\cdot\vec{\psi}_m=0 \text{ pro } j\neq m\,.$$

17

Ortogonalita závisí nejen na funkcích $\varphi_0,\dots,\varphi_{k-1}$, ale i na volbě uzlových bodů!

Hledáme řešení ve tvaru $\varphi=\sum_{j<k} d_j\,\psi_j$, kde d_j, $j=0,\dots,k-1$ jsou souřadnice vzhledem k nové bázi. Matice soustavy normálních rovnic je diagonální:

$$\begin{aligned}d_j\left(\vec{\psi}_j\cdot\vec{\psi}_j\right) &= \vec{y}\cdot\vec{\psi}_j\,, \qquad j=0,\dots,k-1,\\ d_j=\frac{\vec{y}\cdot\vec{\psi}_j}{\vec{\psi}_j\cdot\vec{\psi}_j} &= \frac{\vec{y}\cdot\vec{\psi}_j}{\|\vec{\psi}_j\|^2}\,, \qquad j=0,\dots,k-1.\end{aligned}$$

Navíc lze volit vektory $\vec{\psi}_j$ jednotkové, pak vyjde jednotkový i jmenovatel.

Gramova-Schmidtova ortogonalizace

Způsob, jak najít ortogonální bázi

$$\vec{\psi}_0=\vec{\varphi}_0$$
$$\vec{\psi}_1=\vec{\varphi}_1+\alpha_{1,0}\vec{\psi}_0$$

$$\vec{\psi}_1\cdot\vec{\psi}_0=0 \quad\Rightarrow\quad \vec{\varphi}_1\cdot\vec{\psi}_0+\alpha_{1,0}\vec{\psi}_0\cdot\vec{\psi}_0=0$$
$$\Rightarrow\quad \alpha_{1,0}=\frac{-\vec{\varphi}_1\cdot\vec{\psi}_0}{\vec{\psi}_0\cdot\vec{\psi}_0}$$

$$\vec{\psi}_2=\vec{\varphi}_2+\alpha_{2,0}\vec{\psi}_0+\alpha_{2,1}\vec{\psi}_1$$

$$\vec{\psi}_2\cdot\vec{\psi}_0=0 \quad\Rightarrow\quad \vec{\varphi}_2\cdot\vec{\psi}_0+\alpha_{2,0}\vec{\psi}_0\cdot\vec{\psi}_0+\alpha_{2,1}\underbrace{\vec{\psi}_1\cdot\vec{\psi}_0}_{0}=0$$
$$\Rightarrow\quad \alpha_{2,0}=\frac{-\vec{\varphi}_2\cdot\vec{\psi}_0}{\vec{\psi}_0\cdot\vec{\psi}_0}$$

$$\vec{\psi}_2 \cdot \vec{\psi}_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{\varphi}_2 \cdot \vec{\psi}_1 + \alpha_{2,0} \underbrace{\vec{\psi}_0 \cdot \vec{\psi}_1}_{0} + \alpha_{2,1} \vec{\psi}_1 \cdot \vec{\psi}_1 = 0$$

$$\Rightarrow \quad \alpha_{2,1} = \frac{-\vec{\varphi}_2 \cdot \vec{\psi}_1}{\vec{\psi}_1 \cdot \vec{\psi}_1}$$

$$\dots$$

$$\vec{\psi}_j = \vec{\varphi}_j + \sum_{m<j} \alpha_{j,m} \vec{\psi}_m$$

$$\begin{aligned}
\forall p, p < j: \quad \vec{\psi}_j \cdot \vec{\psi}_p &= 0 = \vec{\varphi}_j \cdot \vec{\psi}_p + \sum_{m<j} \alpha_{j,m} \vec{\psi}_m \cdot \vec{\psi}_p \\
&= \vec{\varphi}_j \cdot \vec{\psi}_p + \alpha_{j,p} \vec{\psi}_p \cdot \vec{\psi}_p \\
\Rightarrow \alpha_{j,p} &= \frac{-\vec{\varphi}_j \cdot \vec{\psi}_p}{\vec{\psi}_p \cdot \vec{\psi}_p}
\end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} \vec{\psi}_0 \\ \vec{\psi}_1 \\ \vec{\psi}_2 \\ \vec{\psi}_3 \\ \vdots \\ \vec{\psi}_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{1,0} & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{2,0} & \alpha_{2,1} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{3,0} & \alpha_{3,1} & \alpha_{3,2} & 1 & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n-1,0} & \alpha_{n-1,1} & \alpha_{n-1,2} & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\phi}_0 \\ \vec{\phi}_1 \\ \vec{\phi}_2 \\ \vec{\phi}_3 \\ \vdots \\ \vec{\phi}_{n-1} \end{pmatrix}$$

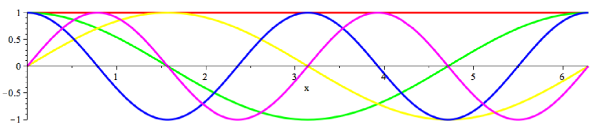
(Komu vadí maticový zápis pro vektory, může je nahradit řádky matice.)

18

Aproximace goniometrickým polynomem

(konečnou Fourierovou řadou)
Aproximace metodou nejmenších čtverců, přičemž aproximační funkce jsou

$$1, \quad \cos 2\pi \frac{t}{T}, \quad \sin 2\pi \frac{t}{T}, \quad \cos 4\pi \frac{t}{T}, \quad \sin 4\pi \frac{t}{T}, \quad \dots$$



Pro ekvidistantní uzlové body na intervalu délky T,

$$x_i = a + i\,\frac{T}{n}, \qquad i = 0, \dots, n-1$$

jsou vektory $\vec{\varphi}_j$ (kterých smí být nejvýše n) ortogonální.
Pro ortogonální funkce je složitost úměrná $k\,n$.
Pro $k = n$ dostáváme n^2.

Rychlá Fourierova transformace (Fast Fourier Transform, FFT) dále snižuje složitost na $n \ln n$.

K tomu vyžaduje navíc $n = 2^m$, jinak efektivita klesá.

Použití: Aproximace periodických a „téměř periodických“ průběhů, zejména akustických, ale např. i obrazových; komprese mp3 a jpeg.
Rozklad na frekvence dovoluje další zpracování, digitální filtraci, rozpoznávání atd.

Čebyševova aproximace polynomem

Úloha: Dáno:
omezený interval I,
spojitá funkce f na I,
$k \in \mathbb{N}$
Hledáme: polynom φ stupně menšího než k takový, abychom minimalizovali výraz

$$H_0 = \max_{t \in I} |\varphi(t) - f(t)|$$

To se také dělá, ale je to mnohem pracnější. Častěji se používá modifikovaná aproximace metodou nejmenších čtverců:

čtverců.

Pro jednoduchost na intervalu $I = \langle -1, 1 \rangle$; zobecnění na interval $\langle a, b \rangle$ dostaneme lineární transformací

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} z \,,$$

inverzní transformace je

$$z = \frac{x - \frac{b+a}{2}}{\frac{b-a}{2}} \,.$$

Za bázi prostoru všech polynomů stupně menšího než k volíme **Čebyševovy polynomy**.
Pokud můžeme, volíme $n \geq k$ uzlových bodů $x_0, \ldots, x_{n-1} \in \langle -1, 1 \rangle$ jako kořeny Čebyševova polynomu stupně n, tj. s kosinovým rozdělením:

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

Pro $k = n$ dostaneme interpolační polynom (s doporučeným kosinovým rozdělením uzlových bodů). Řešení pro $k < n$ se od interpolačního polynomu liší zanedbáním členů vyššího řádu. Koeficienty $c_k, \ldots, c_{n-1}$ bývají malé. (Závisí ovšem na vyšších derivacích aproximované funkce!) Chyba v uzlových bodech je proto omezena výrazem

$$|\varphi(x_i) - f(x_i)| \leq \sum_{j=k}^{n-1} |c_j|.$$

Poznámky o Čebyševově aproximaci

- Neoptimalizujeme přesně kritérium H_0, ale výsledek se od optimálního řešení příliš neliší.
- O chybě mimo uzlové body nelze říci mnoho, přesto lze postup doporučit.
- Rekurentní vzorec lze použít nejen ke stanovení Čebyševových polynomů, ale i přímo k výpočtu jejich hodnot v daném bodě.
- Nedoporučuje se výsledek roznásobovat do standardního tvaru $\varphi(t) = \sum_{j<k} b_j\, t^j$.
- Metodu lze zobecnit i na případ, kdy hledáme aproximaci ve tvaru součinu známé funkce a neznámého polynomu.

Úloha: Odhadnout $f'(x)$ pomocí funkčních hodnot v konečně mnoha bodech.
Z definice

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

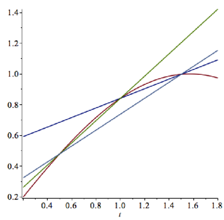
dostaneme odhad

$$d(x, h) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Směrnici tečny ke grafu funkce nahrazujeme směrnicí sečny vedené body $\big(x, f(x)\big)$ a $\big(x+h, f(x+h)\big)$
Symetrický odhad

$$d_s(x, h) = \frac{d(x,h) + d(x,-h)}{2} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},$$

je směrnice sečny, vedené body
$(x-h, f(x-h))$ a $(x+h, f(x+h))$.



Taylorův rozvoj funkce f a odhadů derivace podle h v okolí 0:

$$\begin{aligned}
f(x+h) &= f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(x) + \frac{h^5}{120} f^{(5)}(x) + \ldots, \\
d(x,h) &= f'(x) + \frac{h}{2} f''(x) + \frac{h^2}{6} f'''(x) + \frac{h^3}{24} f^{(4)}(x) + \frac{h^4}{120} f^{(5)}(x) + \ldots, \\
d(x,-h) &= f'(x) - \frac{h}{2} f''(x) + \frac{h^2}{6} f'''(x) - \frac{h^3}{24} f^{(4)}(x) + \frac{h^4}{120} f^{(5)}(x) - \ldots,
\end{aligned}$$

$$d_s(x,h) \quad = \quad f'(x) + \frac{h^2}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{120} f^{(5)}(x) + \dots .$$

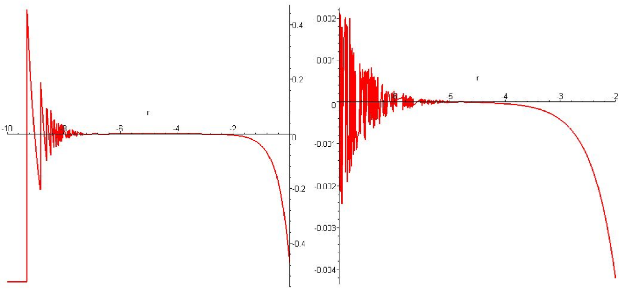
Řád metody numerické derivace je exponent u h v prvním obecně nenulovém členu Taylorova rozvoje chyby.

Odhad $d(x,h)$ je řádu 1, $d_s(x,h)$ řádu 2.

Chyba numerické derivace

Typická závislost chyby numerické derivace na kroku
(odhady derivace funkce sin v bodě 1):

krok	nesymetrický odhad	symetrický odhad
10^{-2}	$-0.42163259 \cdot 10^{-2}$	$-0.90059 \cdot 10^{-5}$
10^{-3}	$-0.4208059 \cdot 10^{-3}$	$-0.1059 \cdot 10^{-6}$
10^{-4}	$-0.423059 \cdot 10^{-4}$	$-0.3059 \cdot 10^{-6}$
10^{-5}	$-0.23059 \cdot 10^{-5}$	$0.26941 \cdot 10^{-5}$
10^{-6}	$-0.23059 \cdot 10^{-5}$	$-0.23059 \cdot 10^{-5}$
10^{-7}	$-0.3023059 \cdot 10^{-3}$	$-0.3023059 \cdot 10^{-3}$
10^{-8}	$-0.3023059 \cdot 10^{-3}$	$-0.3023059 \cdot 10^{-3}$
10^{-9}	$-0.403023059 \cdot 10^{-1}$	$-0.403023059 \cdot 10^{-1}$
10^{-10}	-0.5403023059	-0.5403023059



Typická závislost chyby numerické derivace na kroku
(nesymetrický odhad derivace funkce sin v bodě 1, měřítko kroku logaritmické se základem 10).

Pro nesymetrický odhad:

$$d(x,h) = f'(x) + \frac{h}{2} f''(\xi),$$

kde $\xi \in I(x, x+h)$, pokud f má na intervalu $I(x, x+h)$ spojitou druhou derivaci. Pak existuje M_2 takové, že

$$\forall t \in I(x, x+h) : |f''(t)| \leq M_2.$$

$$|d(x,h) - f'(x)| \leq \frac{M_2}{2} |h|.$$

Pro symetrický odhad:

$$d_s(x,h) = f'(x) + \frac{h^2}{6} f'''(\xi),$$

kde $\xi \in I(x-h, x+h)$, pokud f má na intervalu $I(x-h, x+h)$ spojitou třetí derivaci. Pak existuje M_3 takové, že

$$\forall t \in I(x-h, x+h) : |f'''(t)| \leq M_3.$$

$$|d_s(x,h) - f'(x)| \leq \frac{M_3}{6} h^2.$$

Vyjdeme z odhadu chyby metody tvaru

$$\frac{M_{p+1}}{c}\,h^p,$$

kde p je řád metody,
M_{p+1} je odhad $|f^{(p+1)}|$,
c je konstanta pro danou metodu (nejčastěji $(p+1)!$).

Zaokrouhlovací chybu odhadneme výrazem

$$b\,r\,M_0\,\frac{1}{h},$$

kde M_0 je odhad $|f|$,
r je relativní přesnost numerického výpočtu funkčních hodnot,
b je konstanta pro danou metodu (většinou řádu jednotek, určená počtem sčítanců v čitateli použitého výrazu).

Odhad celkové chyby:

$$e(h) = \frac{M_{p+1}}{c}h^p + b\,r\,M_0\,\frac{1}{h}$$

minimum nastane pro h_{dop}:

$$e'(h_{dop}) = 0$$

$$p\,\frac{M_{p+1}}{c}\,h_{dop}^{p-1} - \frac{b\,r\,M_0}{h_{dop}^2} = 0$$

$$h_{dop} = \sqrt[p+1]{\frac{b\,c\,r\,M_0}{p\,M_{p+1}}}$$

Pro $d(x,h)$: $p=1$, $c=2$, $b=2$,

$$h_{dop} = 2\sqrt{\frac{r\,M_0}{M_2}} \qquad \text{odhad chyby metody} \qquad \frac{M_2}{2}\,h_{dop} = \sqrt{M_0\,M_2\,r} \sim \sqrt{r}$$

To je špatná zpráva! (Zaokrouhlovací chyba je podobná.)

Pro $d_s(x,h)$: $p=2$, $c=6$, $b=1$ (v čitateli máme dva členy, ale dělíme dvěma),

$$h_{dop} = \sqrt[3]{\frac{3r\,M_0}{M_3}} \quad \text{odhad chyby metody} \quad \frac{M_3}{6}\,h_{dop}^2 = \frac{1}{2\cdot\sqrt[3]{3}}\,M_0^{2/3}\,M_3^{1/3}\,r^{2/3}$$

Příklad: $r = 10^{-10}$, funkční hodnoty i hodnoty derivací zhruba stejné (jako např. u funkce $x \mapsto \mathbf{e}^x$):

Pro odhad $d(x,h)$: $h_{dop} = 2\sqrt{10^{-10}} = 2\cdot 10^{-5}$ s odhadem relativní chyby $\frac{\sqrt{M_0\,M_2}}{M_1}\sqrt{r} = \sqrt{r} = 10^{-5}$,

Pro odhad $d_s(x,h)$: $h_{dop} = \sqrt[3]{3\cdot 10^{-10}} \doteq 6.7\cdot 10^{-4}$ s odhadem relativní chyby $\frac{1}{2\cdot 3^{1/3}}\,\frac{M_0^{2/3}\,M_3^{1/3}}{M_1}\,r^{2/3} = \frac{1}{2\cdot 3^{1/3}}\,r^{2/3} \doteq 7.47\times 10^{-8}$.

Pro funkci $x \mapsto \mathbf{e}^{100x}$ (pouze změna měřítka na ose x) je $M_k = 100^k\,M_0$,

- pro odhad $d(x,h)$: $h_{dop} = 2\sqrt{10^{-14}} = 2\cdot 10^{-7}$ s odhadem relativní chyby $\sqrt{r} = 10^{-5}$,
- pro odhad $d_s(x,h)$: $h_{dop} = \sqrt[3]{3\cdot 10^{-16}} \doteq 6.7\cdot 10^{-6}$ s odhadem relativní chyby $\frac{1}{2\cdot 3^{1/3}}\,r^{2/3} \doteq 7.47\times 10^{-8}$.

Pro odhad derivace ln v bodě $x = 10^{-6}$ (předchozí délky kroků nelze použít): $M_0 \doteq 14$, $M_1 \doteq 10^6$, $M_2 \doteq 10^{12}$, $M_3 \doteq 2\cdot 10^{18}$,

- pro odhad $d(x,h)$: $h_{dop} = \sqrt{4\cdot 14\cdot 10^{-22}} \doteq 8\cdot 10^{-11}$ s odhadem relativní chyby $\frac{\sqrt{14\cdot 10^{12}}}{10^6}\sqrt{r} \doteq 3.74\times 10^{-5}$,
- pro odhad $d_s(x,h)$: $h_{dop} = \sqrt[3]{3\cdot 7\cdot 10^{-28}} \doteq 1.3\cdot 10^{-9}$ s odhadem relativní chyby $\frac{1}{2\cdot 3^{1/3}}\,\frac{14^{2/3}\cdot\left(2\cdot 10^{18}\right)^{1/3}}{10^6}\,r^{2/3} \doteq 5.47\times 10^{-7}$.

Upřesnění:

Dosud jsme uvažovali jen chybu vyhodnocení funkce f pro přesný argument, odhadnutou výrazem $r\,M_0$. Nepřesnost $r\,x$ v argumentu se projeví ve funkční hodnotě chybou přibližně $r\,x\,M_1$, která může být značná, bude-li velká (absolutní hodnota) derivace funkce f. Proto je žádoucí volit čísla $h, x, x+h$ tak, aby byla v počítači zobrazena přesně, tedy nikoli např. $h = 10^{-3}$ v binární reprezentaci.

Odvození optimální délky kroku by se mělo modifikovat podle toho, která z chyb $r\,M_0$, $r\,x\,M_1$ je větší. (Ještě lépe by bylo uvažovat obě chyby najednou, ale tím by se řešení zkomplikovalo, ani by nemuselo být jednoznačné.)

Úloha: Správný výsledek nějakého výpočtu je $g(0) = \lim_{h\to 0} g(h)$. Předpokládáme, že g má v okolí bodu 0 Taylorův rozvoj

$$g(h) = g(0) + \frac{h^p}{\cdot}g^{(p)}(0) + \frac{h^r}{\cdot}g^{(r)}(0) + \dots,$$

$p!$ $r!$

kde p (řád metody) známe a $r > p$. Z hodnot funkce g v konečně mnoha nenulových bodech máme odhadnout $g(0)$.

Zanedbáme členy řádů vyšších než p a aproximujeme g polynomem $\varphi(h) = s + c\,h^p$, $s, c \in \mathbb{R}$. Ke stanovení s, c zvolíme 2 uzlové body h, h/q, kde $q \neq 1$:

$$\begin{aligned} \varphi(h) = s + c\,h^p &= g(h), \\ \varphi\left(\tfrac{h}{q}\right) = s + c\,\frac{h^p}{q^p} &= g\left(\tfrac{h}{q}\right). \end{aligned}$$

To je regulární soustava dvou lineárních rovnic pro dvě neznámé s, c, z nichž nás zajímá pouze $s = \varphi(0)$:

$$(q^p - 1)\,s = q^p\,g\left(\tfrac{h}{q}\right) - g(h),$$

$$s = \frac{q^p\,g\left(\frac{h}{q}\right) - g(h)}{q^p - 1}.$$

Odhad s hodnoty $g(0)$ je zatížen pouze chybami vyšších řádů než p (zde řádu r).

Často $q = 2$, pak

$$s = \frac{2^p g\left(\frac{h}{2}\right) - g(h)}{2^p - 1}.$$

Odhad $d(x,h)$ má chybu řádu 1; z hodnot $d(x,h)$, $d(x,h/q)$ vypočteme odhad

$$e(x,h) = \frac{q\,d(x,h/q) - d(x,h)}{q-1},$$

s chybou řádu 2. Pro $q = 2$:

$$e(x,h) = 2\,d(x,h/2) - d(x,h) = \frac{-f(x+h) + 4\,f(x+h/2) - 3\,f(x)}{h}.$$

Ze symetrických odhadů $d_s(x,h)$, $d_s(x,h/q)$:

$$e_s(x,h) = \frac{q^2 d_s(x,h/q) - d_s(x,h)}{q^2 - 1},$$

s chybou řádu 4. Pro $q = 2$:

$$\begin{aligned} e_s(x,h) &= \frac{4\,d_s(x,h/2) - d_s(x,h)}{3} \\ &= \frac{-f(x+h) + 8\,f(x+h/2) - 8\,f(x-h/2) + f(x-h)}{6\,h}. \end{aligned}$$

Symetrický odhad $d_s(x,h)$ lze též dostat Richardsonovou extrapolací z odhadu $d(x,h)$ s $q = -1$.