# 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

12. 1. 2016

**Podmínky zápočtu**

- Adekvátní docházka na cvičení v počítačové laboratoři (mnohé lze dělat i jinde, Maple si můžete instalovat)
- Zápočtové úlohy $6 \times 5$ 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.
Stoer, J., Bulirsch, R.: *Introduction to Numerical Analysis.* Springer Verlag, New York, 2002.

### 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.
I o tom je numerická matematika.

**Úloha:** Lineární algebra: "Soustava lineárních rovnic ve tvaru $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ má jediné řešení $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$, právě když $\det \mathbf{A} \neq 0$."
Programování: "Reálná čísla nesmíme testovat na rovnost!"
Numerická matematika: "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:** Lineární algebra: "$\det \mathbf{A}$ 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 $1, \ldots, n$."
Numerická matematika: "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

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

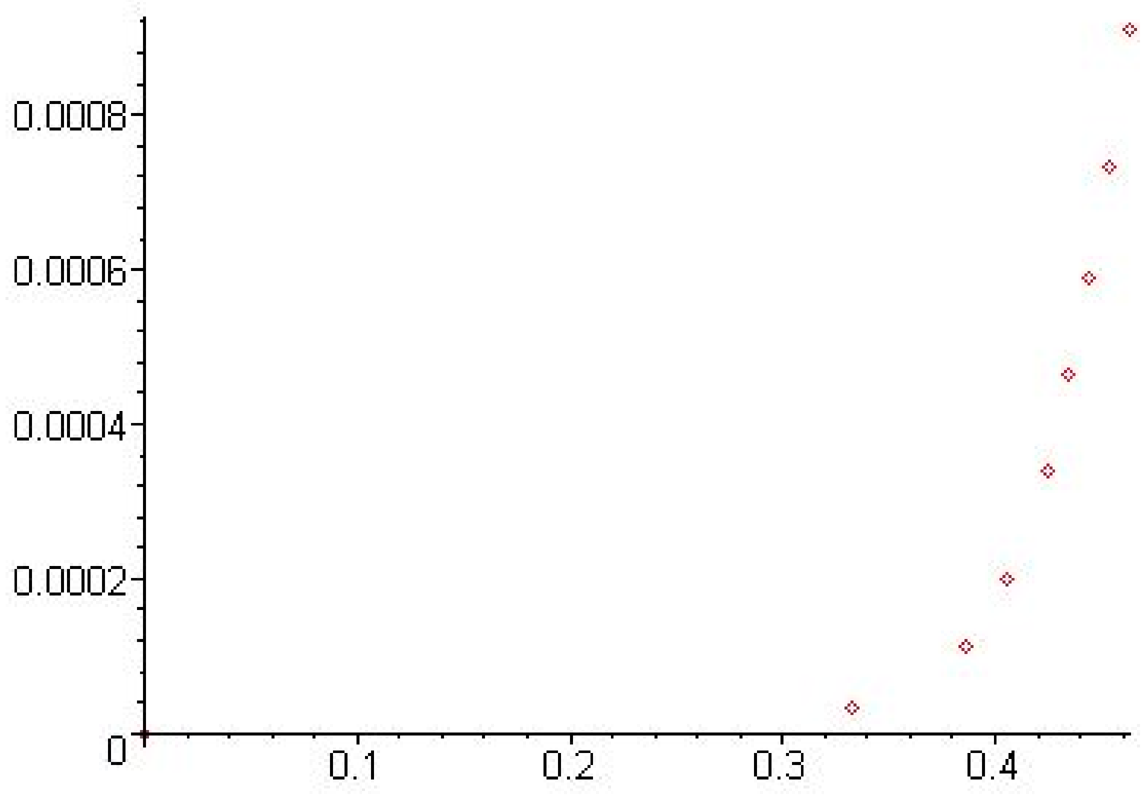
Jenže to je transcendentní funkce.
Numerická integrace dá přibližný výsledek s požadovanou přesností.
(Ve skutečnosti i exponenciální funkce je počítána jen numericky, procesor sám umí jen 4 základní početní úkony.)
Pro rychlejší opakovaný výpočet si připravíme tabulku Gaussova integrálu.

**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 $x_0, \ldots, x_{n-1} \in \mathbb{R}$ (**uzlové body**)
$y_0, \ldots, y_{n-1} \in \mathbb{R}$
množina funkcí $\mathcal{F}$, definovaných alespoň v bodech $x_0, \ldots, x_{n-1}$
Úkol:
najít funkci $\varphi \in \mathcal{F}$, která minimalizuje rozdíly $|y_i - \varphi(x_i)|$, $i = 0, \ldots, n-1$
Předpoklad: $\mathcal{F}$ je lineární obal $k$ *známých*, tzv. **aproximačních funkcí** $\varphi_0, \ldots, \varphi_{k-1}$, $k \leq n$:

$$\mathcal{F} = \langle \varphi_0, \ldots, \varphi_{k-1} \rangle = \left\{ \sum_{j<k} c_j\, \varphi_j : c_j \in \mathbb{R} \right\}.$$

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

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

## 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 $\vec{y} = (y_0, \ldots, y_{n-1}) \in \mathbb{R}^n$. Výsledná aproximace je

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

kde
$\vec{\varphi} = (\varphi(x_0), \ldots, \varphi(x_{n-1})) \in \mathbb{R}^n$,
$\vec{\varphi}_j = (\varphi_j(x_0), \ldots, \varphi_j(x_{n-1})) \in \mathbb{R}^n$, $j = 0, \ldots, k-1$.
(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 $\vec{\varphi}_j$, $j = 0, \ldots, k-1$.
Vektor $\vec{y}$ má souřadnice $(y_0, \ldots, y_{n-1})$ vzhledem ke **standardní bázi**

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

1. Můžeme pro $j = 0, \ldots, n-1$ položit $\vec{y} = \vec{\psi}_j$ a najít aproximaci funkcí $\varrho_j$, 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 $\varrho_j$, $j = 0, \ldots, n-1$, nám poskytují plnou informaci o řešení úlohy pro libovolné $\vec{y} = (y_0, \ldots, y_{n-1})$.

## Interpolace

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

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

## Prostá interpolace

Předpoklad:

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

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.
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:

  **Weierstrassova věta**: Nechť $f$ je *spojitá* funkce na *uzavřeném* intervalu $I$ a nechť je dáno číslo $\varepsilon > 0$. Pak existuje polynom $\varphi$ 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 $\varrho_j$, $j = 0, \dots, n-1$,

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

($\delta_{ij}$ je tzv. **Kroneckerovo delta**)
Polynom $\varrho_j$ stupně $\le n-1$ má $n-1$ kořenů $x_0, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_{n-1}$;

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

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

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

2. Obecné řešení úlohy interpolace polynomem je lineární kombinace

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

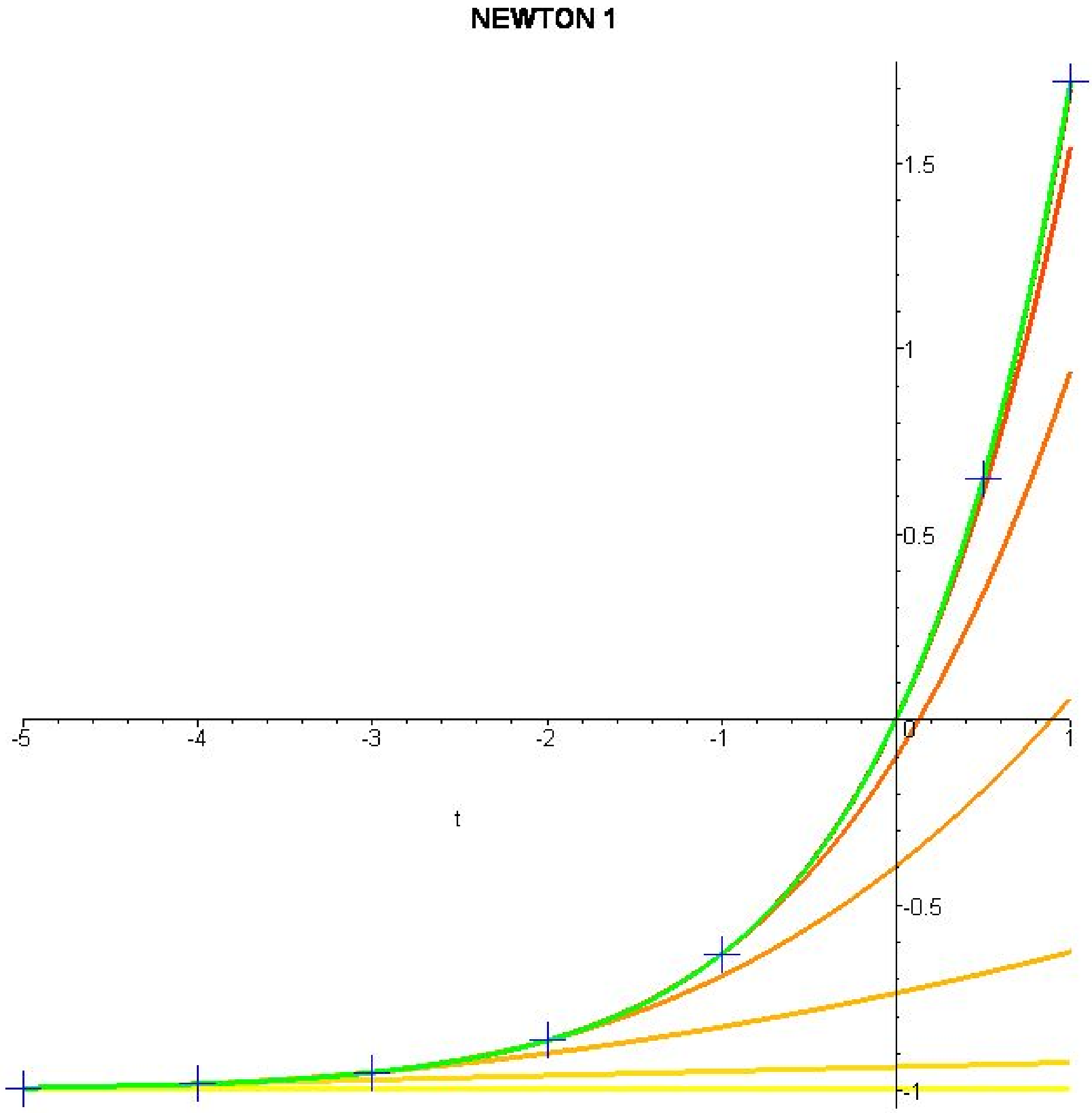
$$\varphi(t) = \sum_{j<n} y_j\, \varrho_j(t) = \sum_{j<n} y_j\, \frac{\prod\limits_{i<n, i\neq j} (t - x_i)}{\prod\limits_{i<n, i\neq j} (x_j - x_i)}\,.$$

Kontrola:

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

Složitost úměrná $n^2$.
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:

## Newtonova konstrukce interpolačního polynomu




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

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

(zbývá vykrátit). Hodnoty v uzlových bodech: $\omega_0(x_i) = \dfrac{y_i - c_0}{x_i - x_0}$ . Indukce:

Polynom $\omega_0$ je tvaru ($\omega_1$ je polynom stupně $\leq n-3$):

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

Zpětným dosazením dostaneme

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

Lze roznásobit (nedoporučuje se):

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

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

## Nevillův algoritmus

Zajímá nás hodnota interpolačního polynomu pouze pro jediný argument $t$, nikoli koeficienty
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.
$y_{i,i+1,\ldots,i+m-1}$ ... 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

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

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.

## Odvození chyby aproximace interpolačním polynomem

Předpoklady:
$f$ má spojité derivace do řádu $n$ na *uzavřeném* intervalu $I \supseteq \{x_0, \ldots, x_{n-1}\}$,
$u \in I \setminus \{x_0, \ldots, x_{n-1}\}$
Definujeme funkci

$$g_u(t) = \underbrace{f(t) - \varphi(t)}_{\text{chyba interpolace v } t} - P_u\, W(t)\,,$$

kde $P_u = \dfrac{f(u) - \varphi(u)}{W(u)}$ je vhodná konstanta,
$W(t) = \prod\limits_{i<n} (t - x_i)$ je polynom stupně $n$ s kořeny $x_0, \ldots, x_{n-1}$ a jednotkovým koeficientem u nejvyšší mocniny, $t^n$ (těmito podmínkami je jednoznačně určen),
jeho $n$-tá derivace je $W^{(n)}(t) = n!$

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

má kořeny $u, x_0, \ldots, x_{n-1}$ a spojitou $n$-tou derivaci

$$g_u^{(n)} = f^{(n)} - P_u\, n!$$

Mezi každými dvěma kořeny funkce $g_u$ leží kořen její derivace $g_u'$
Mezi $n+1$ kořeny funkce $g_u$ leží
$\geq n$ kořenů funkce $g_u'$,
$\geq n-1$ kořenů funkce $g_u''$,
...
$\geq 1$ kořen funkce $g_u^{(n)}$, označme jej $\xi$

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

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

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

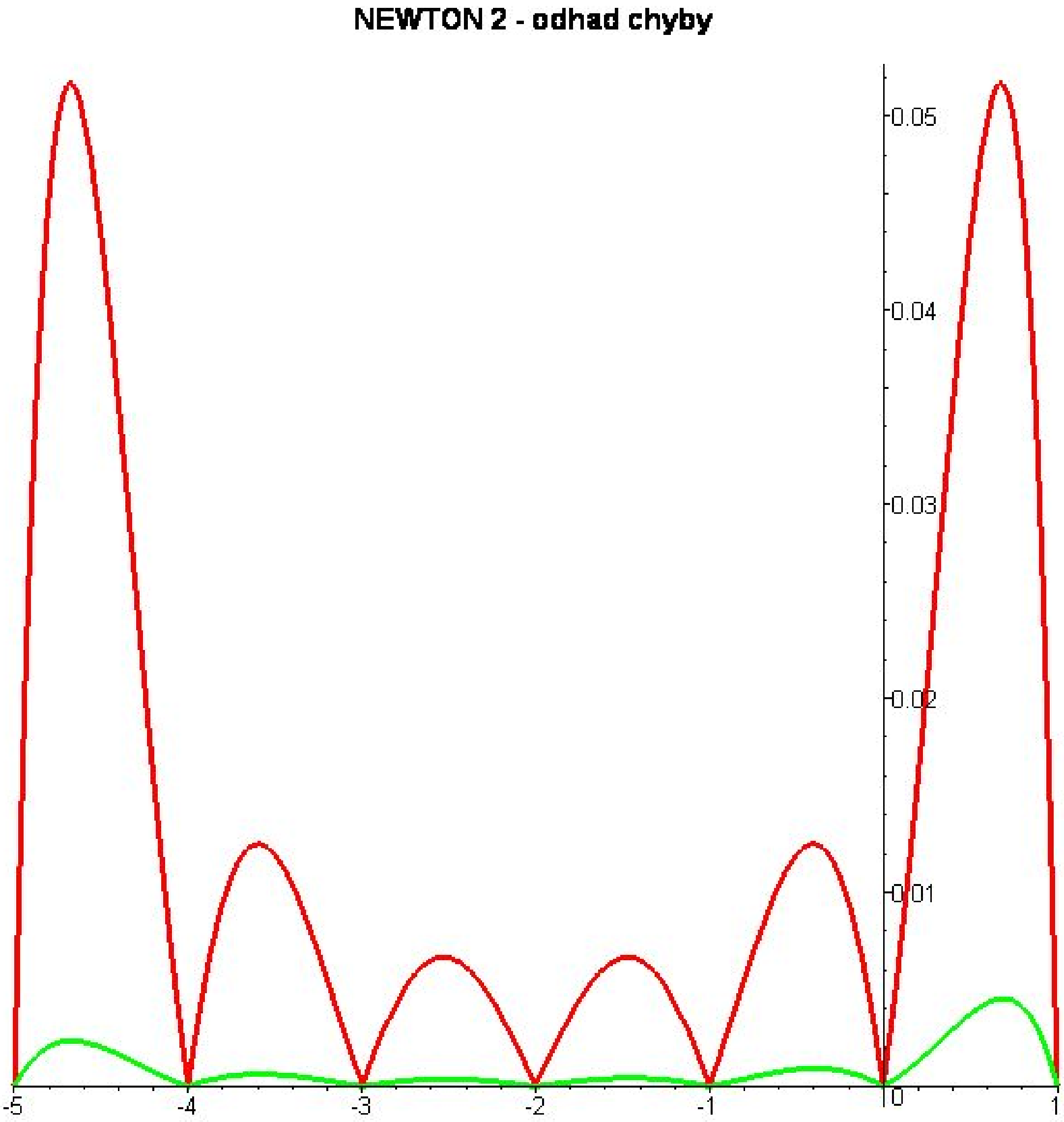
$$|f(u) - \varphi(u)| = \frac{|f^{(n)}(\xi)|}{n!}\, |W(u)|$$

$|f^{(n)}(\xi)|$ nahradíme horním odhadem $M_n$: $\forall t \in I : |f^{(n)}(t)| \leq M_n$

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

Pomocí horního odhadu $\overline{W}$: $\forall t \in I : |W(t)| \leq \overline{W}$ dostaneme odhad chyby, který nezávisí na $u$:

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




(Červeně odhad chyby, zeleně skutečná chyba.)

Rozlišujeme:

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

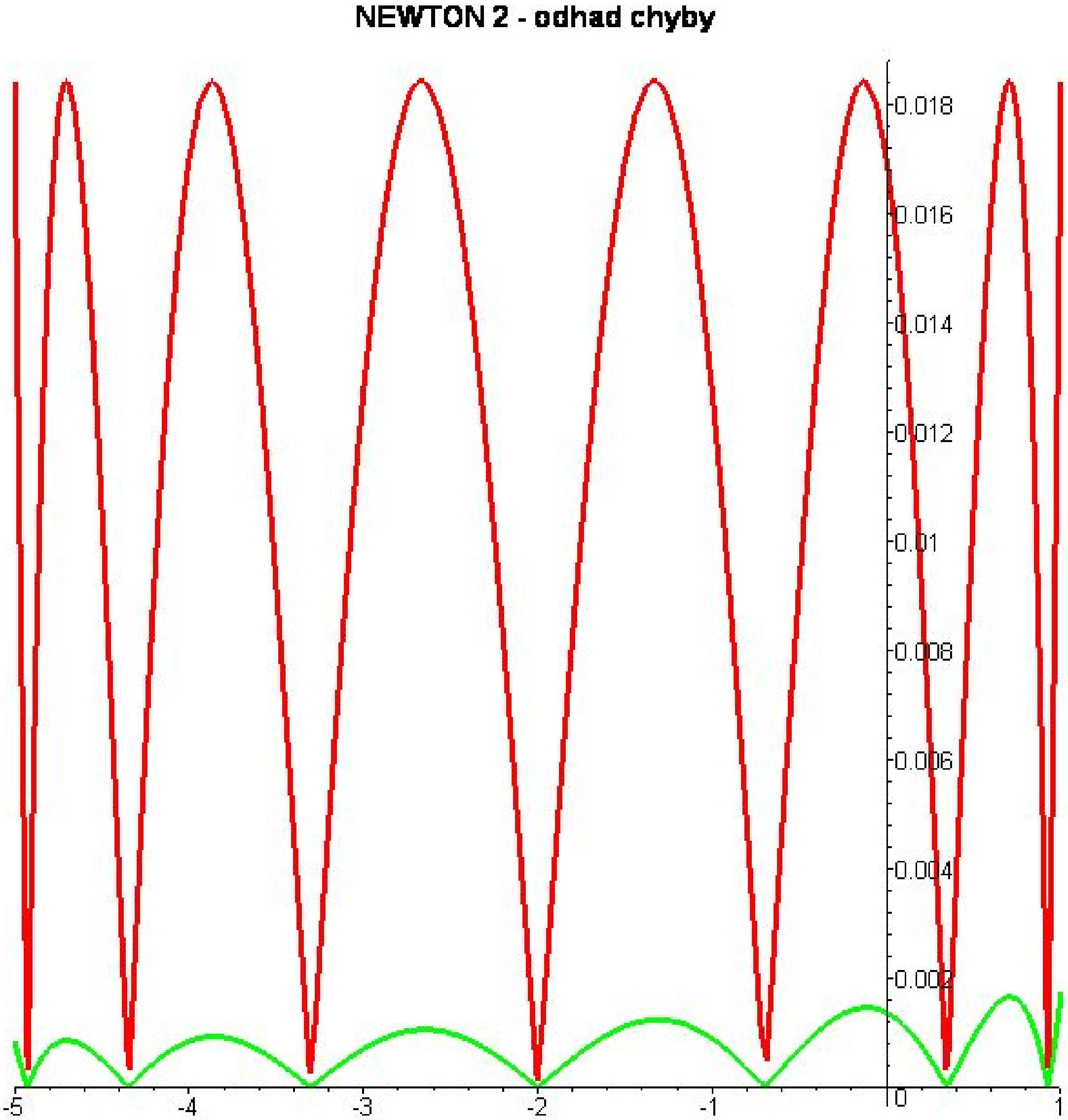
**Doporučení pro zmenšení chyby: kosinové rozložení uzlových bodů**
Na intervalu $\langle -1, 1\rangle$ máme volit uzlové body

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

v obecném případě na intervalu $\langle a, b\rangle$ volíme uzlové body

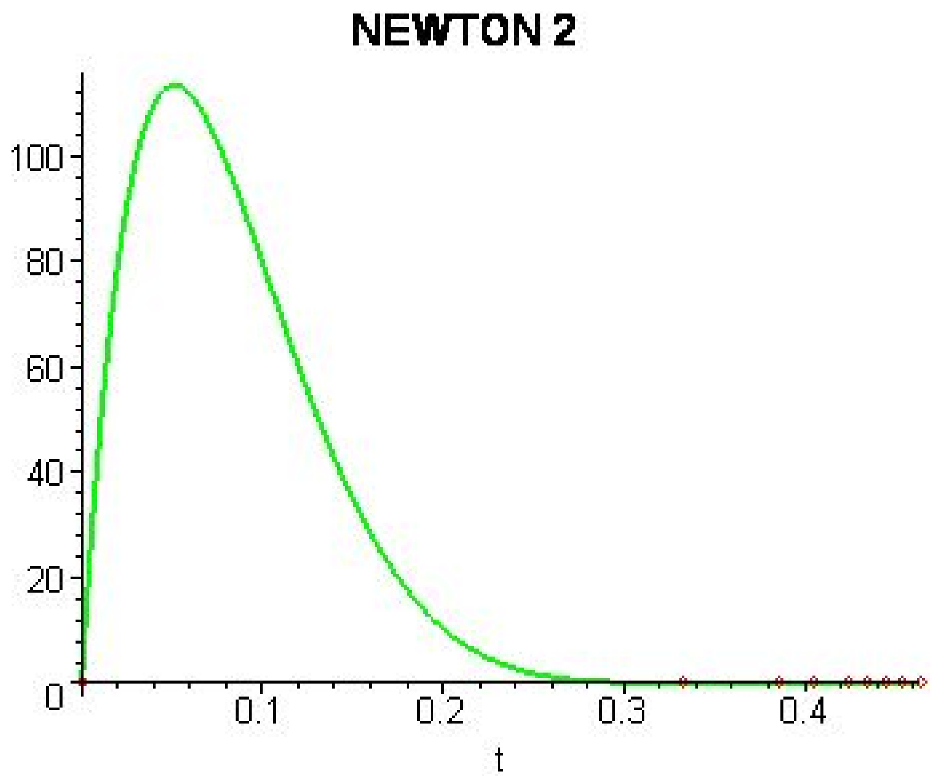
$$x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\, z_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\cos\frac{\pi(i+\frac{1}{2})}{n}$$

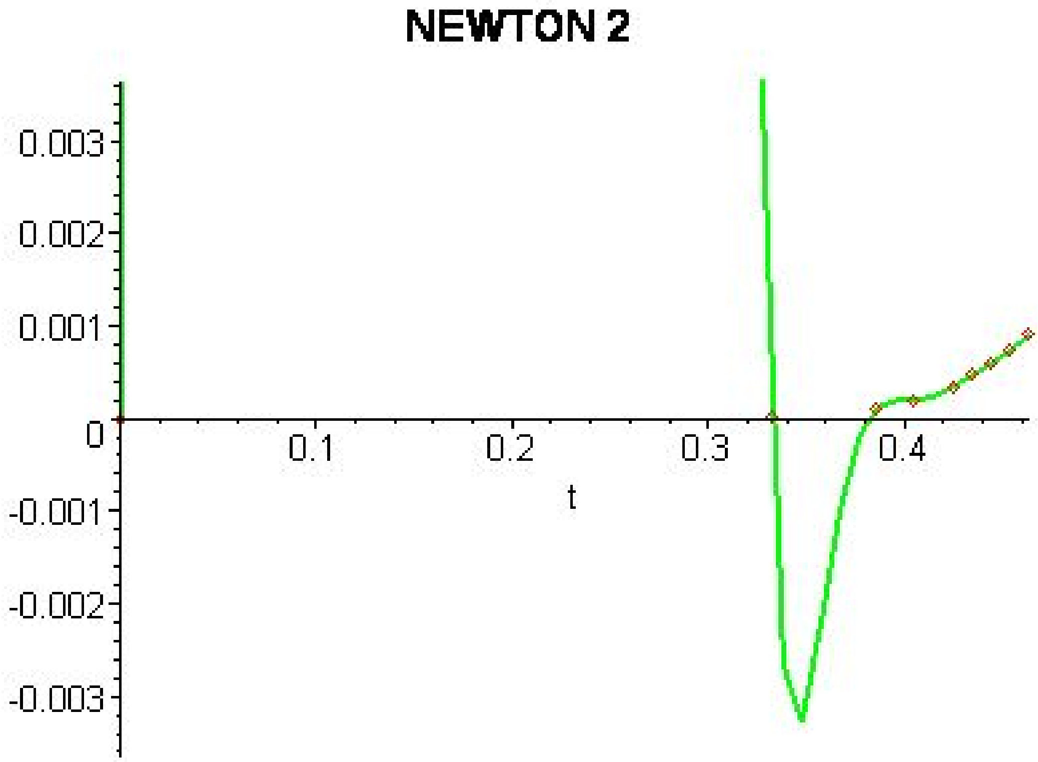
## Chyba aproximace interpolačním polynomem při kosinovém rozdělení uzlových bodů



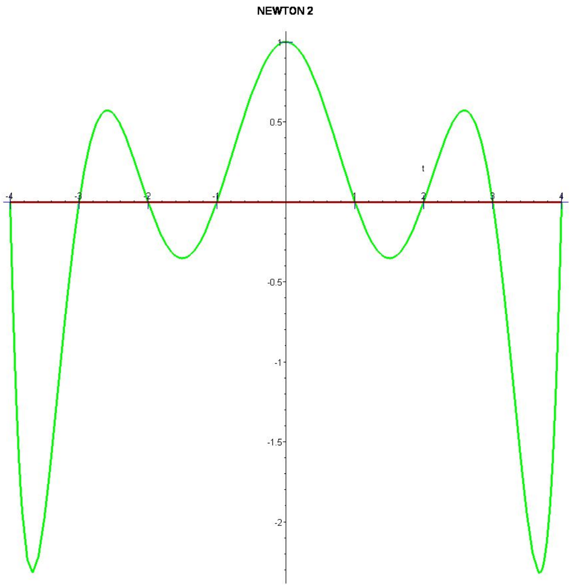

(Červeně odhad chyby, zeleně skutečná chyba.)

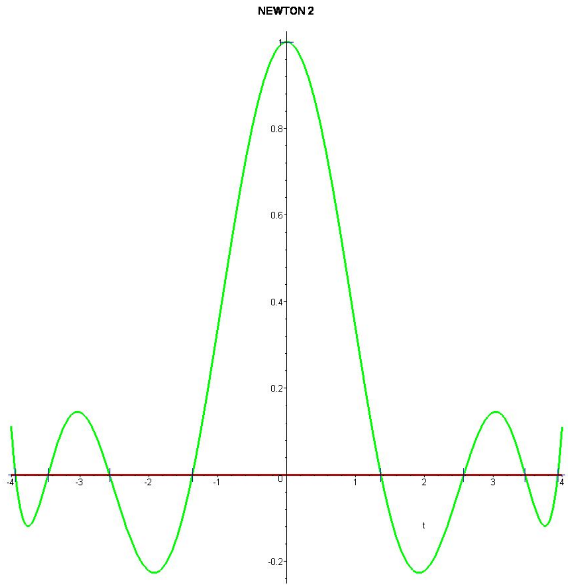
## Motivační úloha - interpolační polynom

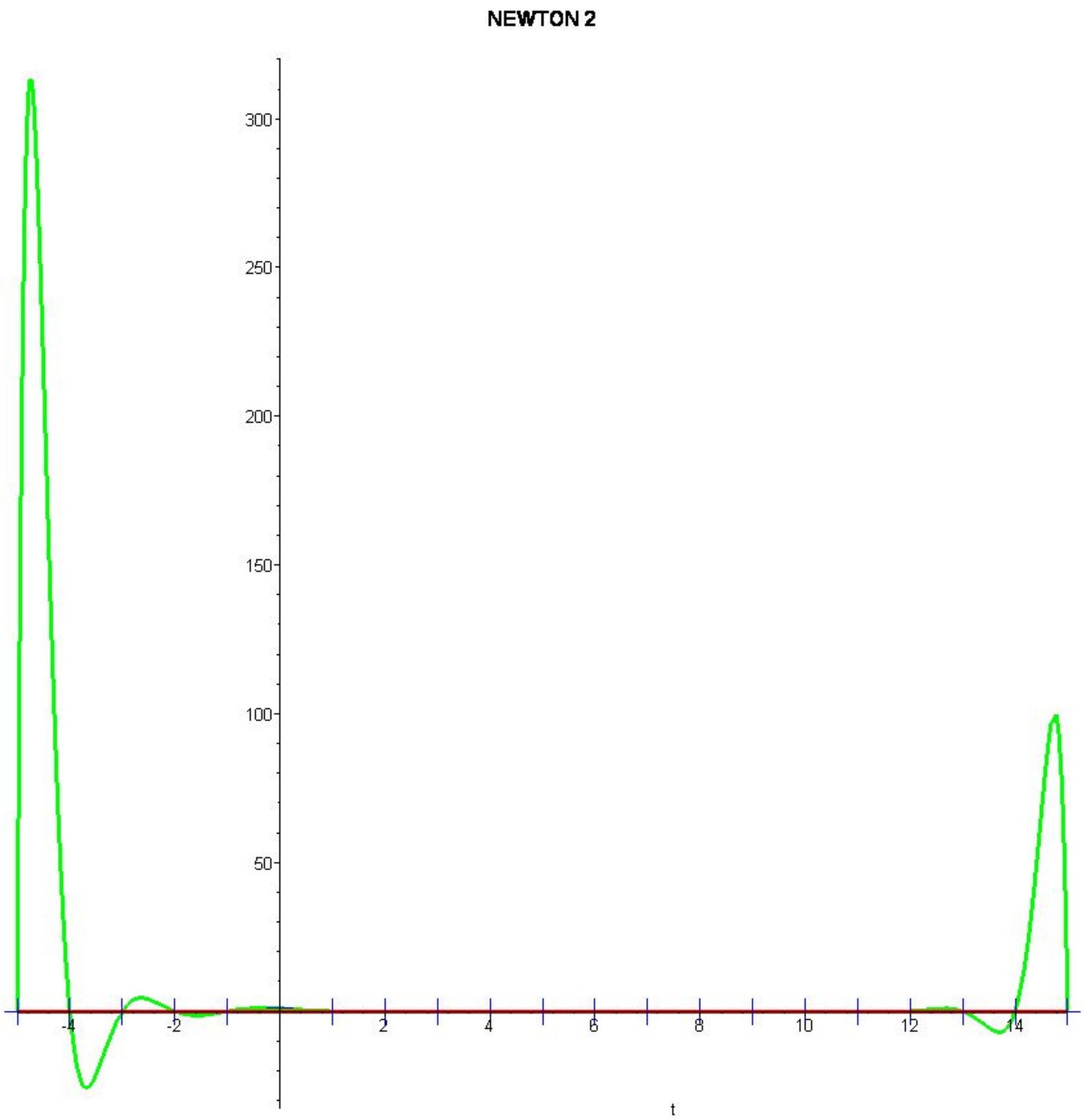


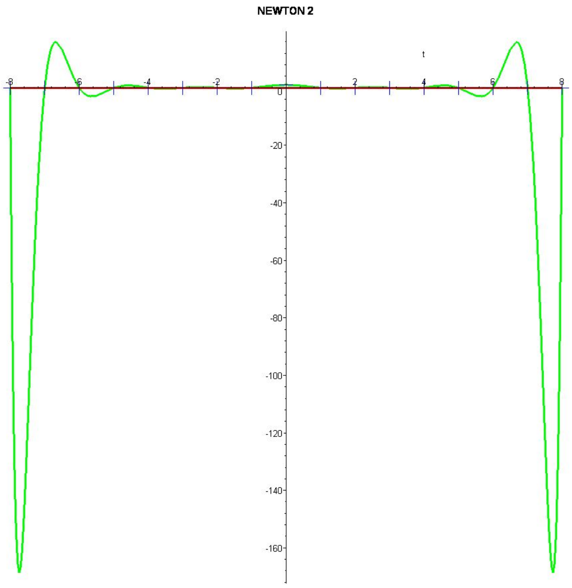



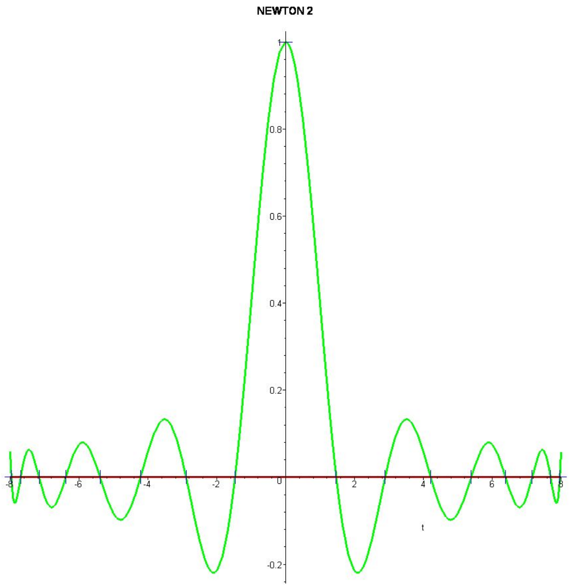

**Vliv lokálních změn na interpolační polynom**


NEWTON 2
t


NEWTON 2
t


NEWTON 2
t






## 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 $\varphi$ 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:

| $\psi$ | $\psi(0)$ | $\psi(1)$ | $\psi'(0)$ | $\psi'(1)$ |
|---|---|---|---|---|
| $\eta$ | 1 | 0 | 0 | 0 |
| $\varrho$ | 0 | 1 | 0 | 0 |
| $\sigma$ | 0 | 0 | 1 | 0 |
| $\tau$ | 0 | 0 | 0 | 1 |

Polynom $\eta$ má dvojnásobný kořen 1, je tedy tvaru

$$\eta(t) = (a_0 t + b_0)(t-1)^2\,,$$

kde $a_0, b_0$ určíme z hodnot v bodě 0:

$$\begin{aligned} \eta(0) = b_0 &= 1 \\ \eta'(0) = a_0 - 2b_0 &= 0 \end{aligned}$$

$$a_0 = 2, \qquad b_0 = 1, \qquad \eta(t) = (2t+1)(t-1)^2$$

$\varrho$ má dvojnásobný kořen 0, je tedy tvaru

$$\varrho(t) = (a_1 t + b_1)\, t^2\,,$$

kde $a_1, b_1$ určíme z hodnot v bodě 1:

$$\begin{aligned} \varrho(1) = a_1 + b_1 &= 1 \\ \varrho'(1) = 3a_1 + 2b_1 &= 0 \end{aligned}$$

$$a_1 = -2, \qquad b_1 = 3, \qquad \varrho(t) = (-2t+3)t^2$$

$\sigma$ má dvojnásobný kořen 1 a jednoduchý kořen 0, je tedy tvaru

$$\sigma(t) = c_0\, t\,(t-1)^2\,,$$

kde $c_0$ určíme z hodnoty derivace v bodě 0:

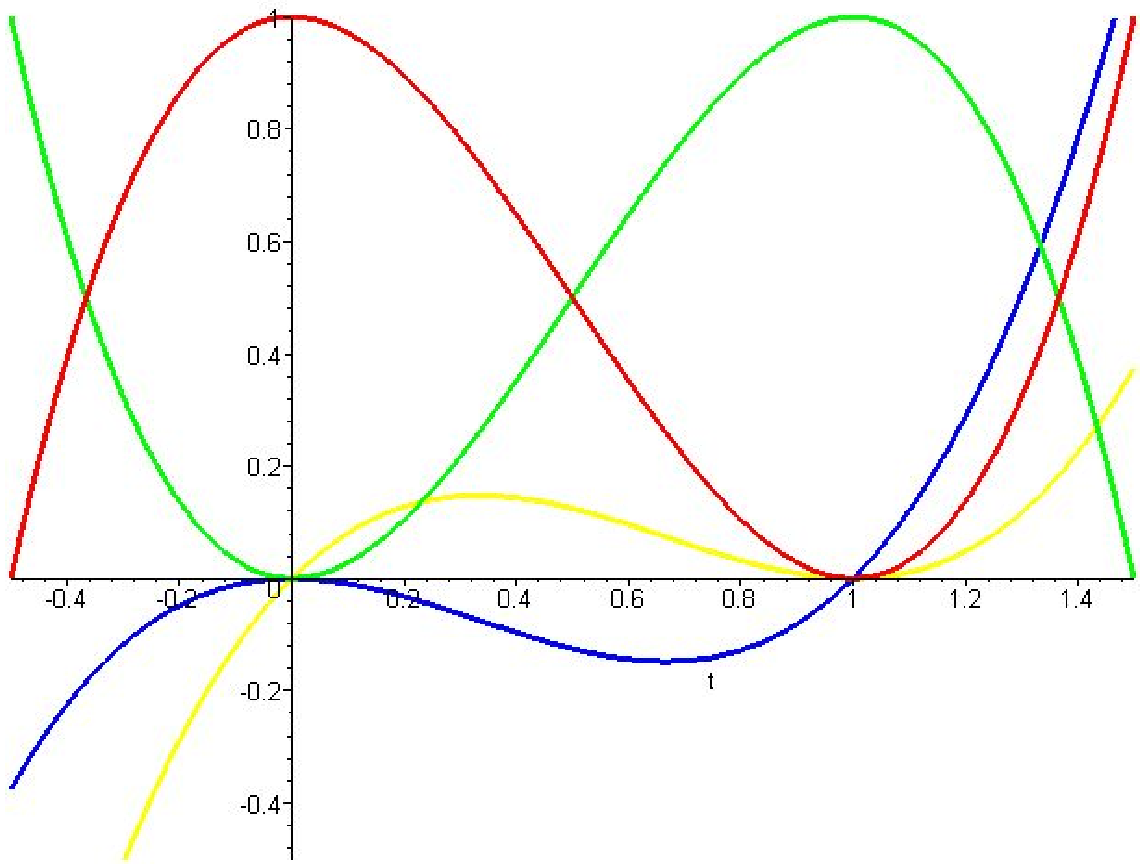
$$\sigma'(0) = c_0 = 1$$
$$\sigma(t) = t(t-1)^2$$

$\tau$ má dvojnásobný kořen 0 a jednoduchý kořen 1, je tedy tvaru

$$\tau(t) = c_1\, t^2(t-1)\,,$$

kde $c_1$ určíme z hodnoty derivace v bodě 1:

$$\tau'(1) = c_1 = 1$$
$$\tau(t) = t^2(t-1)$$




$\varphi$ 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 $\varphi$ 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 $\varphi$ 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

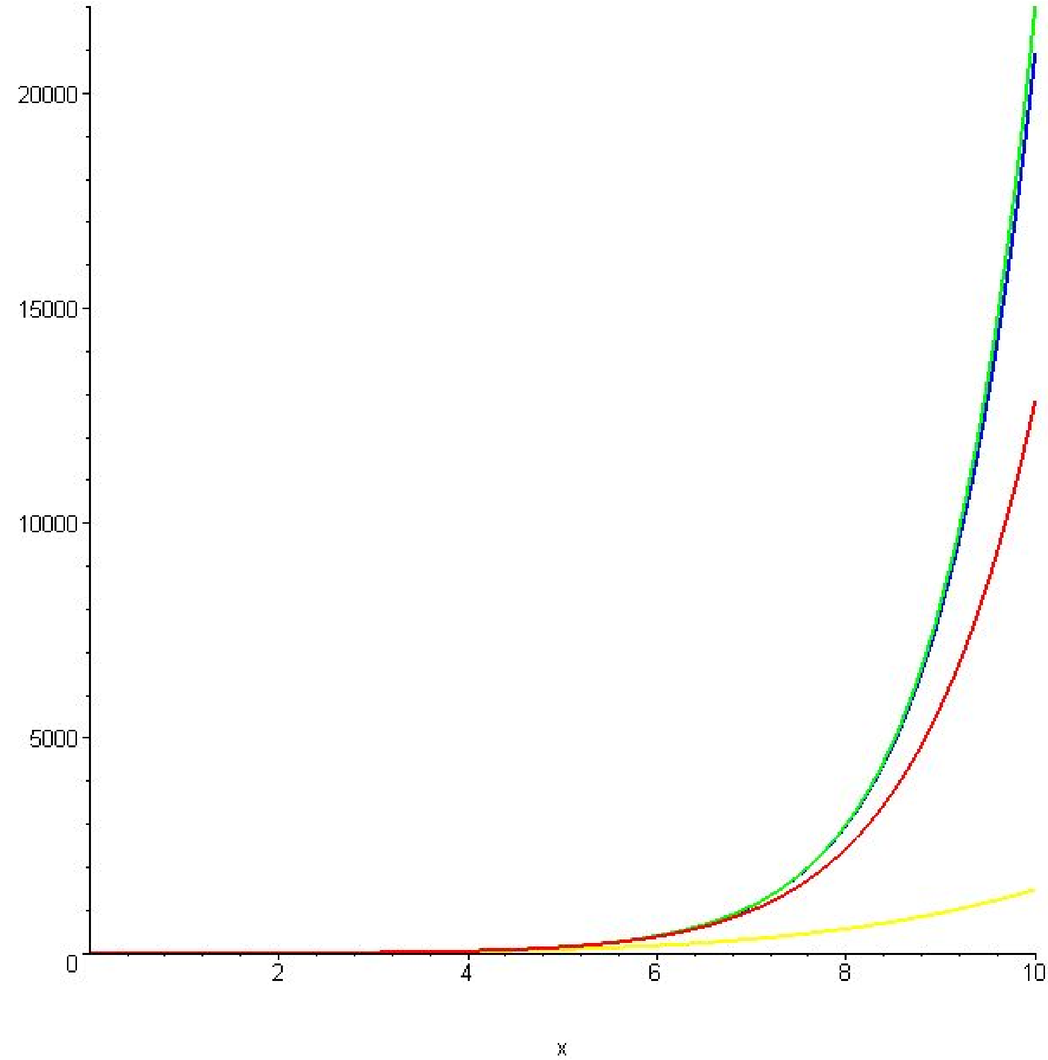
$$f(u) - \varphi(u) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\,(u-x_0)^n\,,$$

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

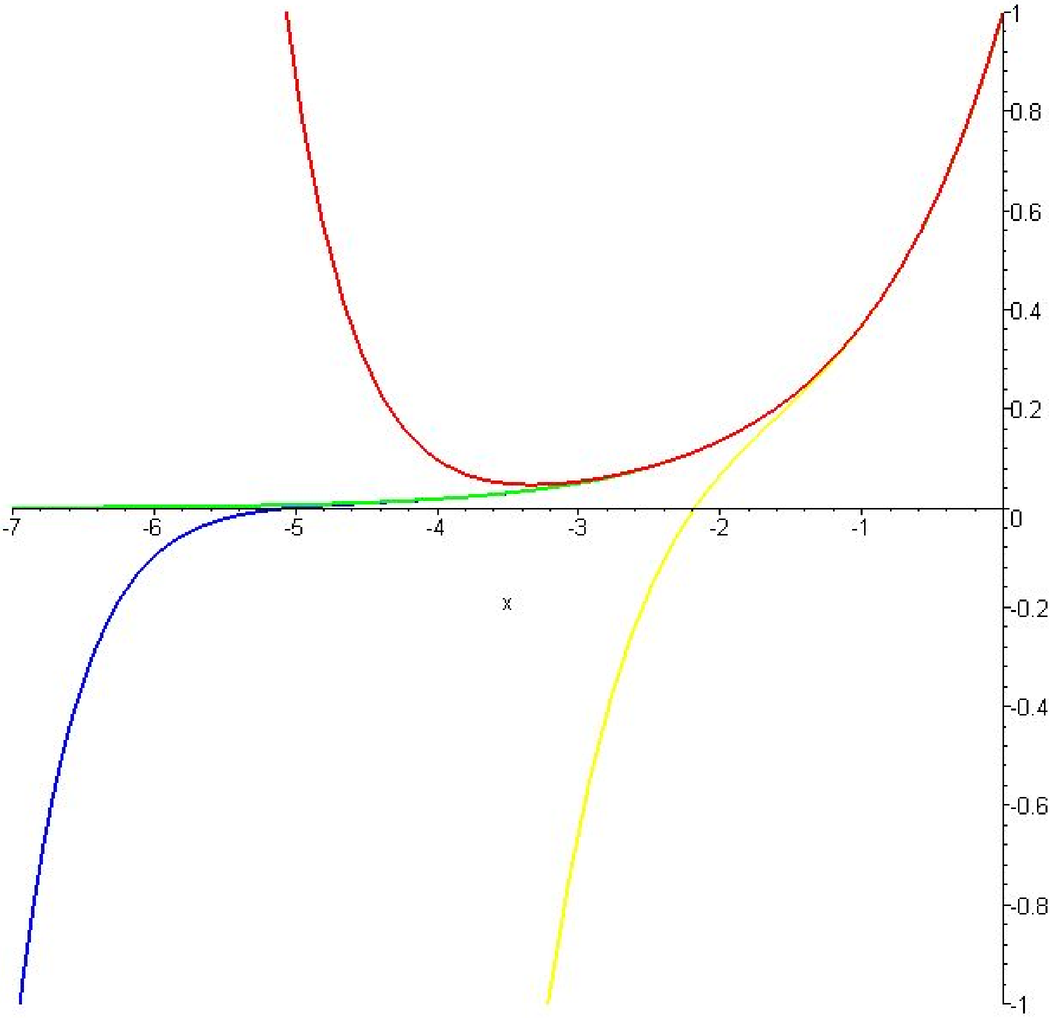
$$|f(u) - \varphi(u)| \le \frac{M_n}{n!}\,|(u-x_0)^n|$$

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 $x_0$

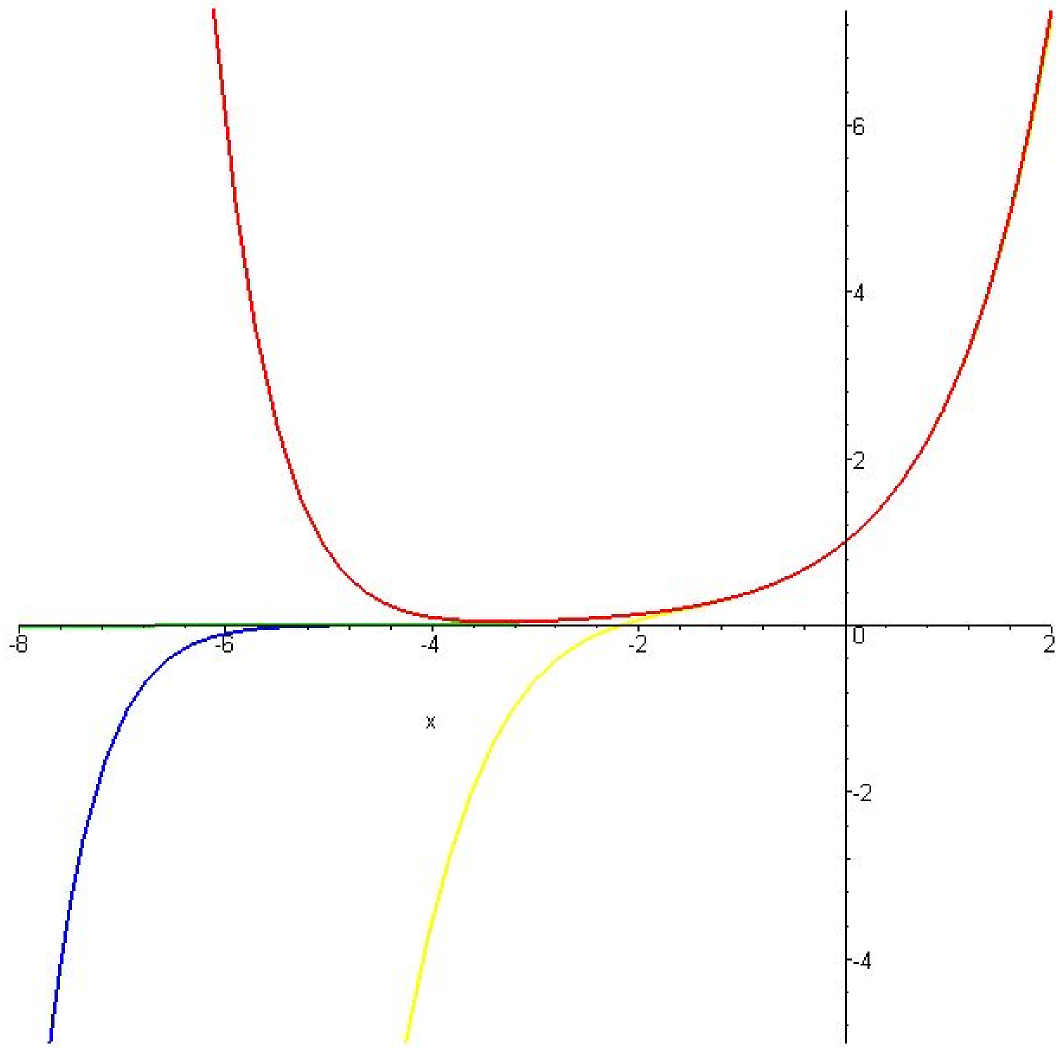
Aproximace Taylorovou řadou je velmi přesná v okolí $x_0$, na úkor chyby ve vzdálenějších bodech




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 $x_0, \ldots, x_{n-1}$,
$n$ hodnot $y_0, \ldots, y_{n-1}$.
Hledáme funkci $\varphi$, definovanou na intervalu $\langle x_0, x_{n-1} \rangle$, splňující:

- $\varphi(x_i) = y_i, \qquad i = 0, \ldots, n-1$ ,
- $\varphi$ se na intervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$ shoduje s nějakým polynomem $\varphi_i$ stupně nejvýše 3, $\qquad i = 1, \ldots, n-1$ ,
- $\varphi$ 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 $x_1, \ldots, x_{n-2}$:

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

Předpokládejme, že známe hodnoty $\varphi'(x_i) = \varphi_i'(x_i) = \varphi_{i+1}'(x_i)$, $i = 1, \ldots, n-2$. Tím je zajištěna spojitost $\varphi'$. Polynomy $\varphi_i$, $i = 1, \ldots, n-1$ 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 $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$, $i = 1, \ldots, n-1$, dostáváme

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

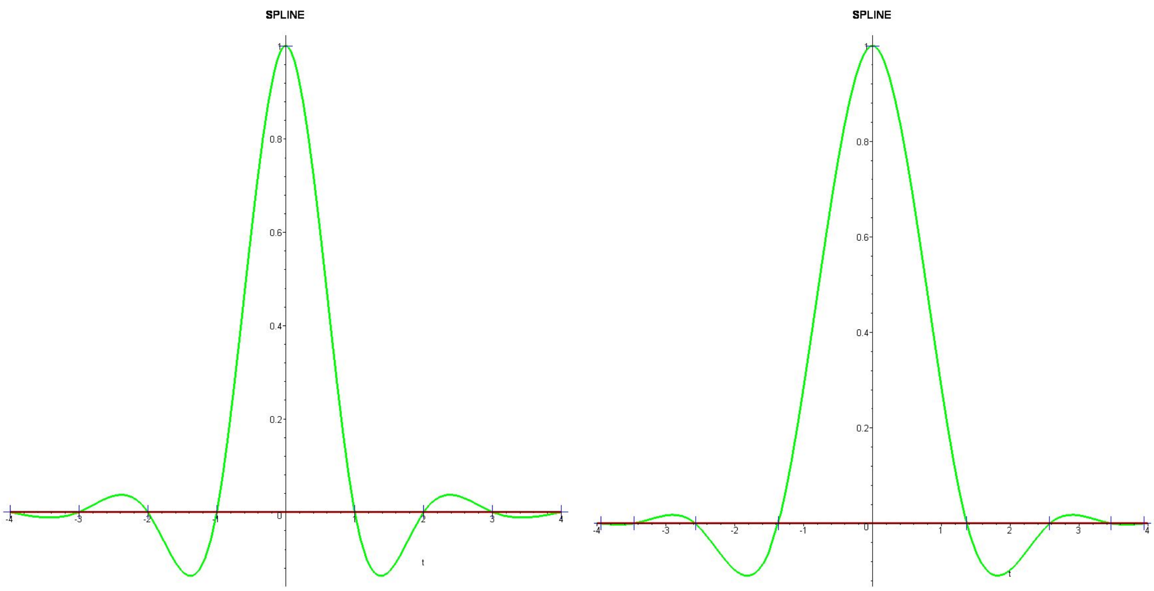
kde $\eta_i, \varrho_i, \sigma_i, \tau_i$ jsou polynomy stupně nejvýše 3 (určené stejně jako polynomy $\eta, \varrho, \sigma, \tau$ v úloze na Hermitův interpolační polynom).
Zbývá určit $\varphi'(x_i)$, $i = 0, \ldots, n-1$:

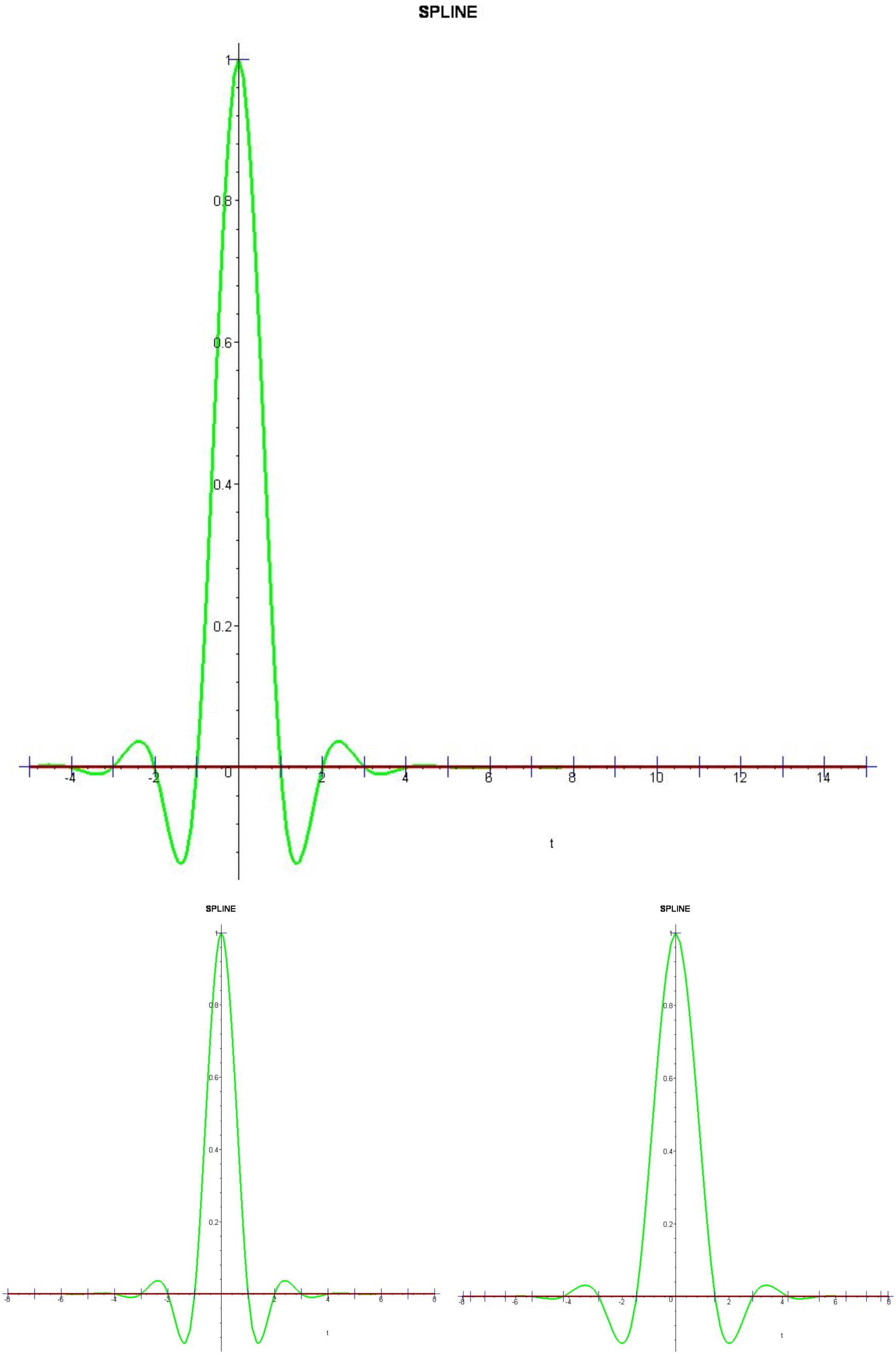
$$\begin{aligned} & y_{i-1}\eta_i''(x_i) + y_i\varrho_i''(x_i) + \varphi'(x_{i-1})\sigma_i''(x_i) + \varphi'(x_i)\tau_i''(x_i) = \\ = \;& y_i\eta_{i+1}''(x_i) + y_{i+1}\varrho_{i+1}''(x_i) + \varphi'(x_i)\sigma_{i+1}''(x_i) + \varphi'(x_{i+1})\tau_{i+1}''(x_i)\,, \end{aligned}$$

kde $i = 1, \ldots, n-2$
($n-2$ lineárních rovnic o $n$ neznámých).
Zbývají 2 volitelné parametry. Obvykle se volí $\varphi''(x_0) = \varphi''(x_{n-1}) = 0$, tzv. **přirozený spline**.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!**

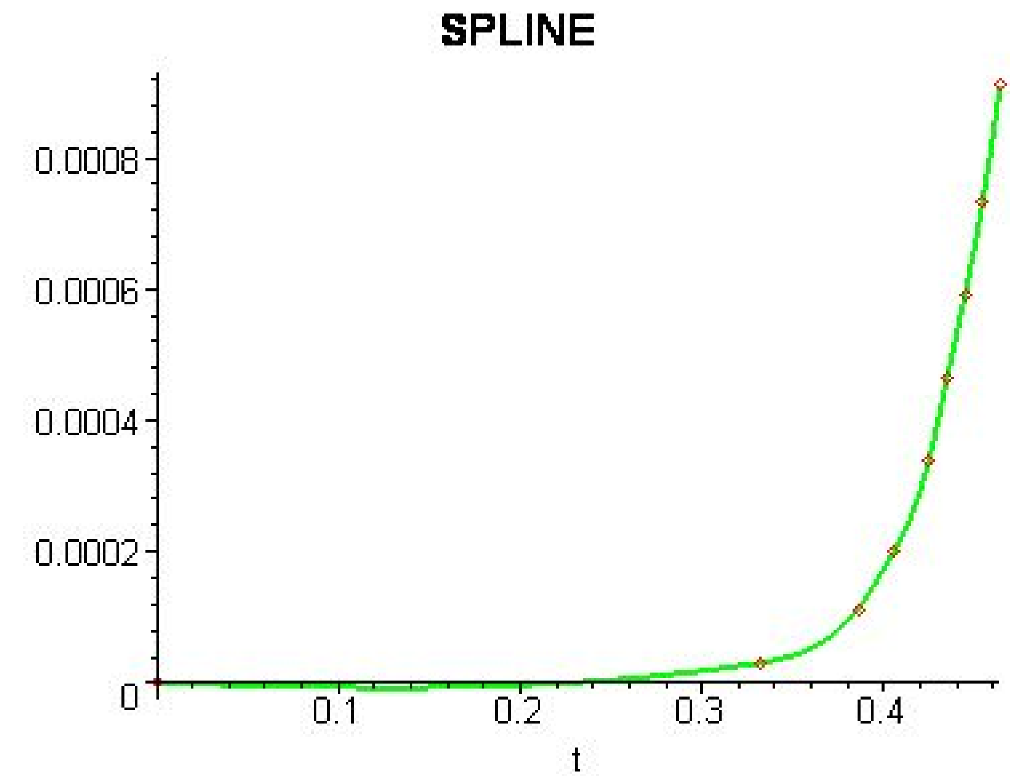
*Přesto to většina implementací dovoluje.*
**Poznámka:** Volba rozdělení má v případě interpolace splinem výrazně menší vliv.

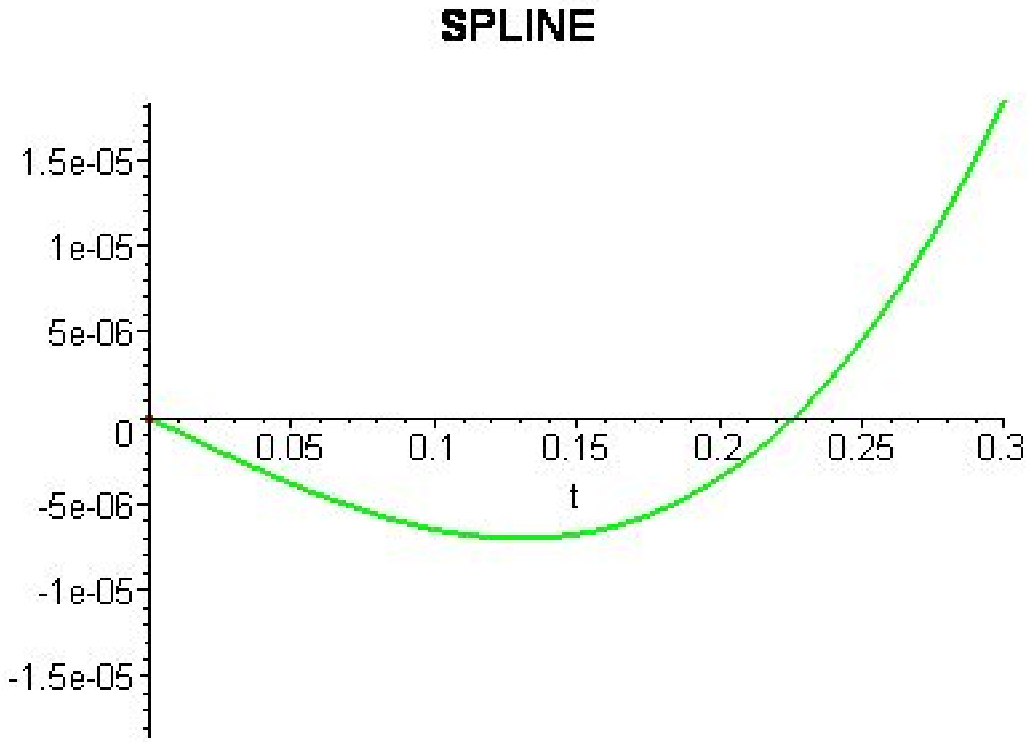
## Vliv lokálních změn na spline






**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 $\varphi_j$

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

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 $\vec{\varphi} = \sum\limits_{j<k} c_j\, \vec{\varphi}_j$,
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 $m = 0, \ldots, k-1$)

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

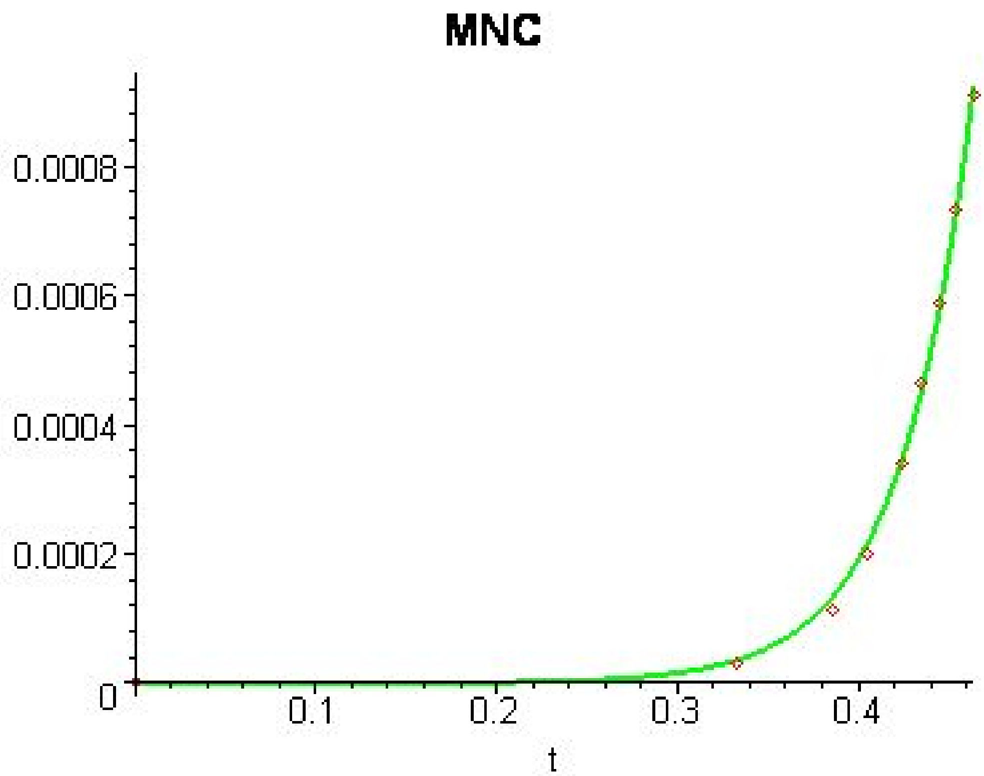
$\vec{\varphi}$ se vzhledem ke skalárním součinům s vektory $\vec{\varphi}_m$ chová stejně jako $\vec{y}$.

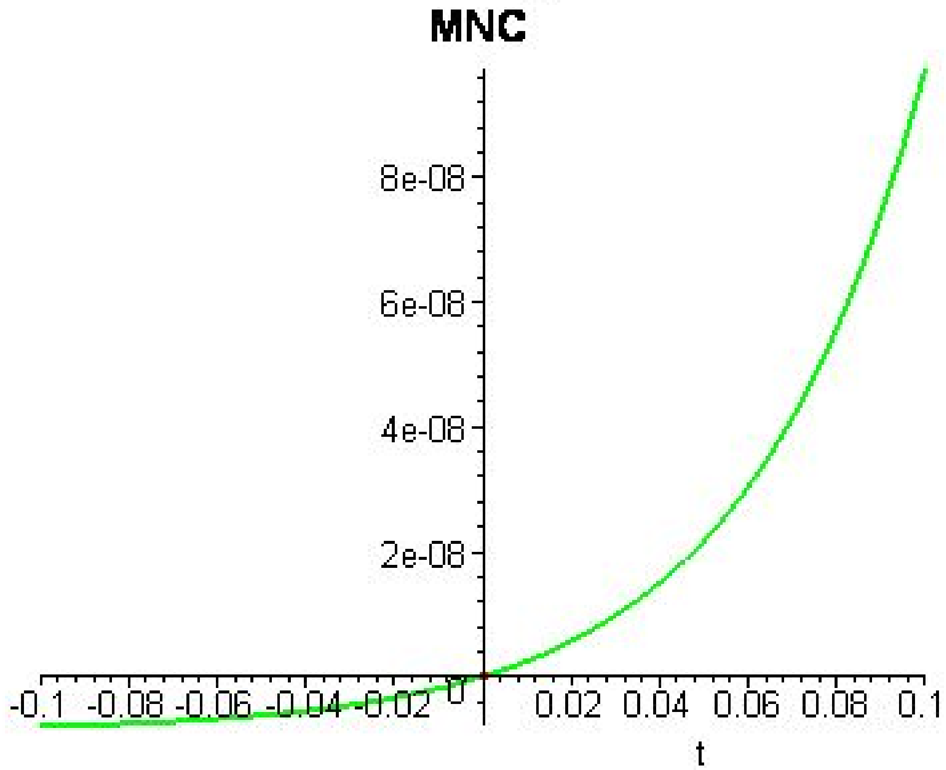
$$\begin{aligned} \left( \sum_{j<k} c_j\, \vec{\varphi}_j \right) \cdot \vec{\varphi}_m &= \vec{y} \cdot \vec{\varphi}_m, \\ \sum_{j<k} c_j (\vec{\varphi}_j \cdot \vec{\varphi}_m) &= \vec{y} \cdot \vec{\varphi}_m, \qquad m = 0, \ldots, k-1; \end{aligned}$$

soustava lineárních rovnic pro neznámé $c_0, \ldots, c_{k-1}$ - **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 $P = \langle\vec{\varphi}_0, \ldots, \vec{\varphi}_{k-1}\rangle$ najdeme ortogonální bázi $(\vec{\psi}_0, \ldots, \vec{\psi}_{k-1})$,

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

Ortogonalita závisí nejen na funkcích $\varphi_0, \ldots, \varphi_{k-1}$, ale i na volbě uzlových bodů!
Hledáme řešení ve tvaru $\varphi = \sum\limits_{j<k} d_j\, \psi_j$, kde $d_j$, $j = 0, \ldots, k-1$ 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.
Způsob, jak najít ortogonální bázi

$$\vec{\psi}_0 = \vec{\varphi}_0$$

$$\vec{\psi}_1 = \vec{\varphi}_1 + \alpha_{10}\vec{\psi}_0$$

$$
\begin{aligned}
\vec{\psi}_1 \cdot \vec{\psi}_0 = 0 \quad &\Rightarrow \quad \vec{\varphi}_1 \cdot \vec{\psi}_0 + \alpha_{10}\vec{\psi}_0 \cdot \vec{\psi}_0 = 0\\
&\Rightarrow \quad \alpha_{10} = \frac{-\vec{\varphi}_1 \cdot \vec{\psi}_0}{\vec{\psi}_0 \cdot \vec{\psi}_0}
\end{aligned}
$$

$$\vec{\psi}_2 = \vec{\varphi}_2 + \alpha_{20}\vec{\psi}_0 + \alpha_{21}\vec{\psi}_1$$

$$
\begin{aligned}
\vec{\psi}_2 \cdot \vec{\psi}_0 = 0 \quad &\Rightarrow \quad \vec{\varphi}_2 \cdot \vec{\psi}_0 + \alpha_{20}\vec{\psi}_0 \cdot \vec{\psi}_0 + \alpha_{21}\underbrace{\vec{\psi}_1 \cdot \vec{\psi}_0}_{0} = 0\\
&\Rightarrow \quad \alpha_{20} = \frac{-\vec{\varphi}_2 \cdot \vec{\psi}_0}{\vec{\psi}_0 \cdot \vec{\psi}_0}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\vec{\psi}_2 \cdot \vec{\psi}_1 = 0 \quad &\Rightarrow \quad \vec{\varphi}_2 \cdot \vec{\psi}_1 + \alpha_{20}\underbrace{\vec{\psi}_0 \cdot \vec{\psi}_1}_{0} + \alpha_{21}\vec{\psi}_1 \cdot \vec{\psi}_1 = 0\\
&\Rightarrow \quad \alpha_{21} = \frac{-\vec{\varphi}_2 \cdot \vec{\psi}_1}{\vec{\psi}_1 \cdot \vec{\psi}_1}
\end{aligned}
$$

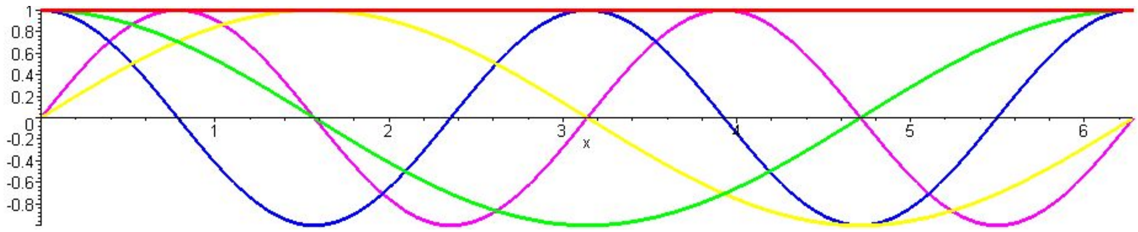
$$\dots$$

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

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

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.
**Úloha:** Dáno:
omezený interval $I$,
spojitá funkce $f$ na $I$,
$k \in \mathbb{N}$
Hledáme: polynom $\varphi$ 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:
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

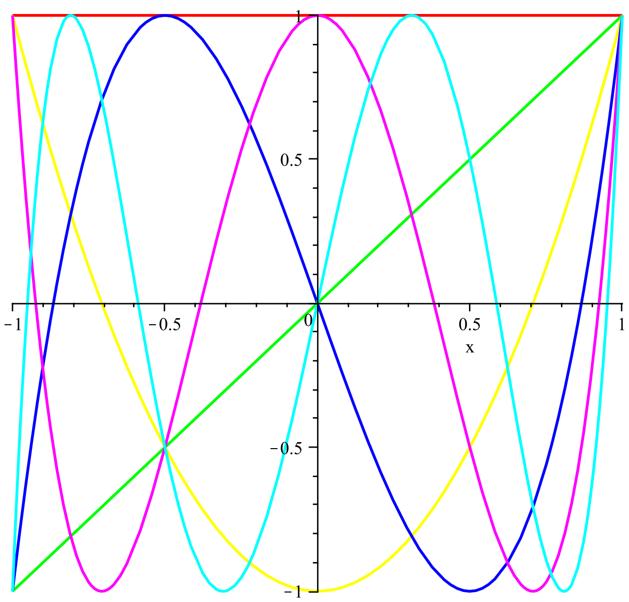
$$z = \frac{x - \frac{b+a}{2}}{\frac{b-a}{2}} \,.$$

Volíme $n \geq k$ uzlových bodů $x_0, \ldots, x_{n-1} \in \langle -1, 1 \rangle$ s kosinovým rozložením:

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

Za bázi prostoru všech polynomů stupně menšího než $k$ volíme **Čebyševovy polynomy**:

## Čebyševovy polynomy




$$\varphi_j(t) = \cos(j \arccos t), \qquad j = 0, \ldots, k-1, \quad k < n.$$

Lze je počítat z rekurentního vztahu

$$\begin{aligned} \varphi_0(t) &= 1, \\ \varphi_1(t) &= t, \\ \varphi_j(t) &= 2t\varphi_{j-1}(t) - \varphi_{j-2}(t), \qquad j \geq 2 \end{aligned}$$

Obor hodnot funkcí $\varphi_j$, $j \geq 1$, na intervalu $I$ je $\langle -1, 1 \rangle$.

Pak vychází vektory $\vec{\varphi}_0, \ldots, \vec{\varphi}_{k-1}$ ortogonální,

$$\vec{\varphi}_j \cdot \vec{\varphi}_m = \begin{cases} 0 & \text{pro } j \neq m, \\ \frac{n}{2} & \text{pro } j = m > 0, \\ n & \text{pro } j = m = 0. \end{cases}$$

Pro $k = n$ dostaneme interpolační polynom (s doporučeným kosinovým rozložením 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

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

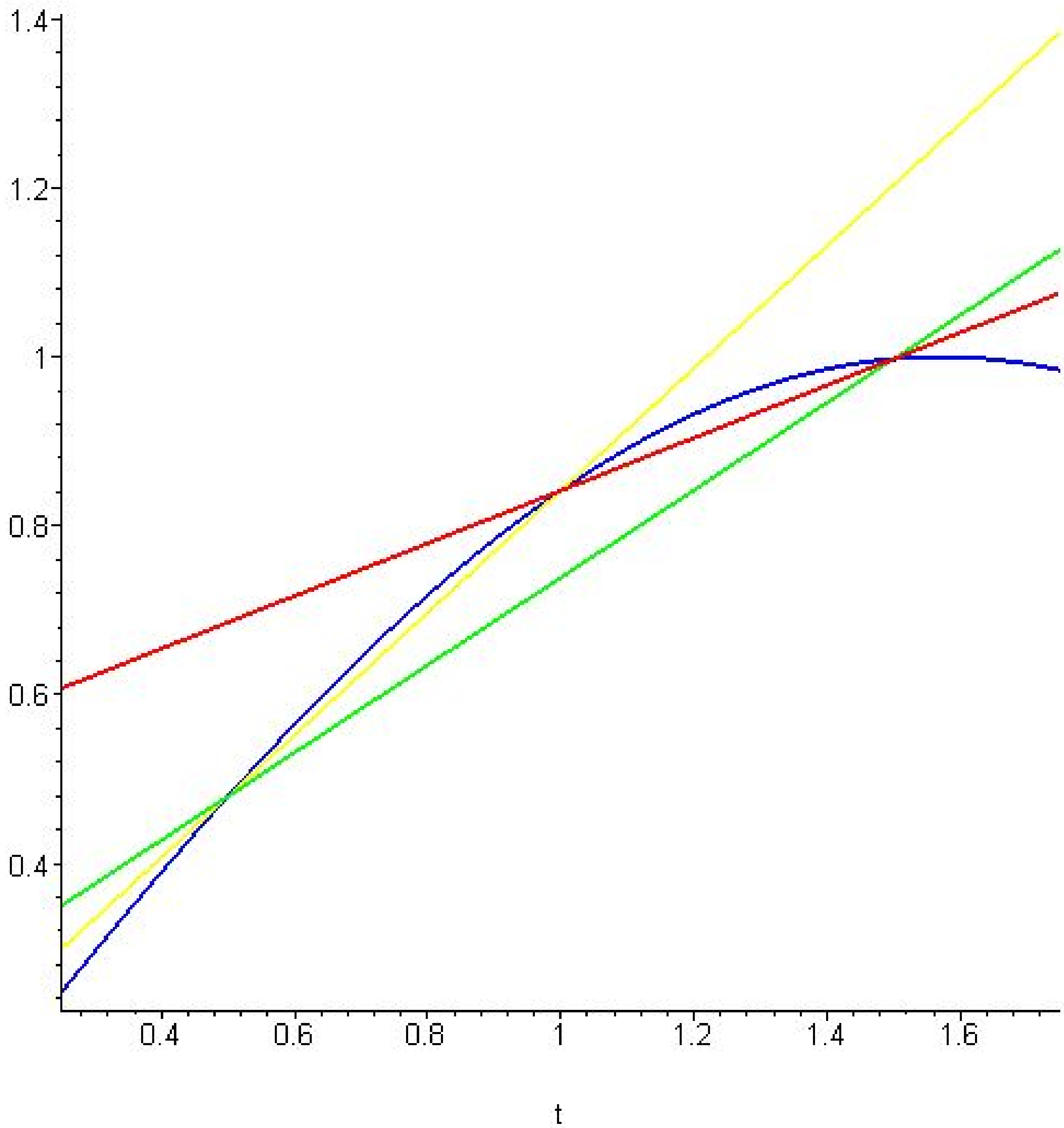
dostaneme odhad

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

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 $(x+h, f(x+h))$.


1.4
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
t

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

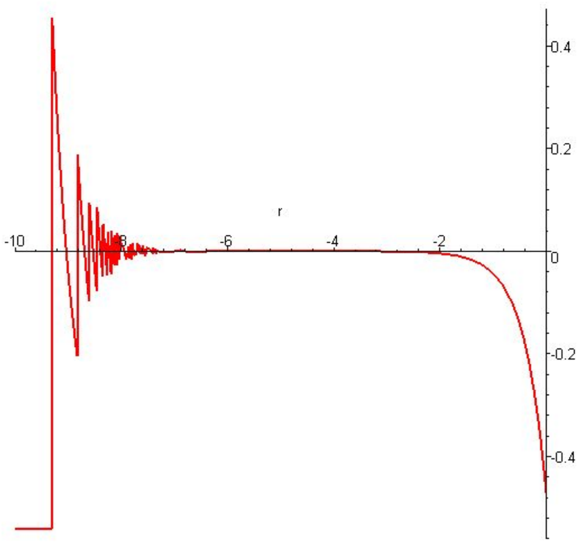
$$\begin{aligned}
f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) + \frac{h^5}{120}f^{(5)}(x) + \dots, \\
d(x,h) &= f'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + \frac{h^2}{6}f'''(x) + \frac{h^3}{24}f^{(4)}(x) + \frac{h^4}{120}f^{(5)}(x) + \dots, \\
d(x,-h) &= f'(x) - \frac{h}{2}f''(x)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

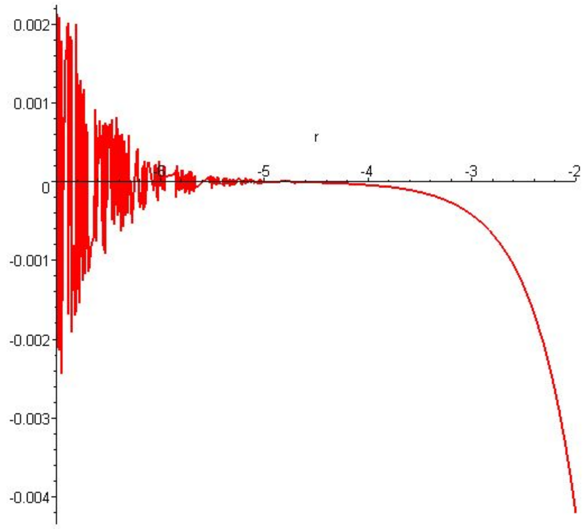
**Řád metody numerické derivace** je exponent u $h$ v prvním obecně nenulovém členu Taylorova rozvoje chyby.
Odhad $d(x,h)$ je řádu 1, $d_s(x,h)$ řádu 2.

## 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

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

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

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

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

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

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 $g(0) = \lim\limits_{h \to 0} g(h)$. Předpokládáme, že $g$ má v okolí bodu 0 Taylorův rozvoj

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

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 $\varphi(h) = s + c\, h^p, \qquad s, c \in \mathbb{R}$. 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 $q = -1$.