MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ FAKULTA
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Milan Đurović

Numerický výpočet derivací

Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Petr Tichý, Ph.D.
Studijní program: Obecná matematika
Studijní obor: MOMP

Praha 2024

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V .... dne ....

Podpis autora

Mé velké díky patří vedoucímu práce docentu Petru Tichému za odbornou pomoc, cenné rady a trpělivost při vzniku bakalářské práce. Dále bych rád poděkoval rodině za podporu v průběhu celého studia.

Název práce: Numerický výpočet derivací

Autor: Milan Đurović

Katedra: Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Petr Tichý, Ph.D., Katedra numerické matematiky

Abstrakt: V práci detailně popisujeme dva způsoby výpočtu aproximace derivace funkce reálné proměnné, včetně analýzy diskretizační, výpočetní a celkové chyby výpočtu jednotlivých metod. Prvním způsobem jsou standardní známé metody přes konečné diference využívající teorii Taylorova rozvoje. Druhý a méně známý způsob, který lze použít jen pokud je funkce analytická na okolí daného bodu, využívá komplexní aritmetiky. Teoretické poznatky získané analýzou metod doplňujeme numerickými experimenty v prostředí MATLAB, ve kterých teoretické poznatky ověřujeme a srovnáváme jednotlivé metody z různých hledisek.

Klíčová slova: výpočet derivace, chyba aproximace, konečné diference, komplexní aritmetika

Title: Numerical computation of derivatives

Author: Milan Đurović

Department: Department of Numerical Mathematics

Supervisor: doc. RNDr. Petr Tichý, Ph.D., Department of Numerical Mathematics

Abstract: In the thesis, we describe in detail two methods of computing the approximation of the derivative of a function of a real variable, including the analysis of discretization, truncation and the total errors of individual methods. The first method is the standard method that uses finite differences. This method is based on the theory of Taylor expansion. The second and less known method, which can only be used if the function is analytic in a neighbourhood of a given point, uses complex arithmetic. We supplement the theory obtained by analyzing the methods with numerical experiments in the MATLAB environment, in which we verify the theoretical results and compare individual methods from different points of view.

Keywords: computing a derivative, approximation error, finite differences, complex arithmetic

Obsah

Úvod

Derivace funkce hraje významnou roli v analýze chování funkce. Pro mnoho numerických metod, které například hledají aproximace řešení parciálních diferenciálních rovnic či optimalizačních úloh, je výpočet derivace funkce jeden ze základních stavebních kamenů. Při výpočtu derivace funkcí často nejsme schopni získat přesnou hodnotu a musíme se spokojit s její aproximací. K tomu slouží zejména aproximace pomocí konečných diferencí. K aproximaci derivace funkce v nějakém bodě se využívají funkční hodnoty v blízkých (pomocných) bodech. Teoreticky čím blíže jsou pomocné body k danému bodu, tím menší je diskretizační chyba a tím lepší je aproximace. Body, ve kterých funkci vyhodnocujeme, nesmíme brát příliš blízko k sobě, neboť pak může dojít při odečítaní dvou blízkých hodnot k významným numerickým nepřesnostem z důvodu počítání v aritmetice s konečnou přesností. Celková chyba aproximace je tedy ovlivněna nejen diskretizační chybou, ale i výpočetní chybou způsobenou výpočty v počítačové aritmetice. Tuto celkovou chybu je potřeba analyzovat a mít pod kontrolou, aby aproximace byla použitelná.

Kromě způsobu výpočtu aproximace derivace pomocí konečných diferencí se v práci budeme věnovat alternativnímu způsobu výpočtu derivace. Trochu neintuitivně tato metoda pro výpočet derivace reálné funkce v reálném bodě přechází do komplexní aritmetiky. Navíc je tato metoda použitelná pouze pro funkce reálné proměnné, které jsou analytické na okolí daného bodu. Dokážeme, že použitím tohoto přístupu můžeme eliminovat vliv diskretizační chyby. Také si ukážeme jiné způsoby odvození této metody, které ji dají do souvislosti se standardním přístupem.

V druhé kapitole se budeme věnovat numerickým experimentům, které provedeme v prostředí MATLAB. Podíváme se, jak jsou jednotlivé způsoby aproximace derivace přesné měřeno relativní a absolutní chybou. Kromě přesnosti nás bude také zajímat výpočetní náročnost a celková použitelnost.

1. Aproximace derivací

1.1 Základní pojmy

V následujícím textu budeme popisovat metody aproximace derivace. Většina je založena na teorii Taylorova rozvoje. Následující definici a větu lze nalézt například v knize Rudina [1, str. 110].

Definice 1 (Taylorův polynom)**.** *Nechť f je reálná funkce, $a \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}$ a nechť existuje vlastní $f^{(n)}(a)$. Pak polynom $P_n(t)$, který je definovaný $\forall t \in \mathbb{R}$ předpisem:*

$$P_n(t) = f(a) + \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k!} f^{(k)}(a)(t-a)^k, \tag{1.1}$$

nazýváme Taylorův polynom funkce f v bodě a stupně n.

Zadefinovali jsme si Taylorův polynom. Nyní zmíníme větu, která odhaduje chybu nahrazení funkce svým Taylorovým polynomem.

Věta 1 (Lagrangeův tvar zbytku)**.** *Nechť f je reálná funkce, $n \in \mathbb{N}$, $a,x \in \mathbb{R}$, $a < x$, U otevřený interval, $[a,x] \subset U$, $f^{(n)}$ je spojitá na U a f má v každém bodě U vlastní derivaci řádu n+1. Pak existuje $\xi \in (a,x)$ takové, že*

$$f(x) - P_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f(\xi)^{(n+1)}(x-a)^{n+1}, \tag{1.2}$$

kde $P_n(x)$ je definovaný jako (1.1)*. Analogicky platí* (1.2) *pro $a > x$, jsou-li splněny ostatní předpoklady.*

Při aproximaci derivace pracujeme v aritmetice s konečnou přesností (z anglického finite precision arithmetic), kterou budeme někdy zkráceně nazývat počítačová aritmetika. Poznatky týkající se počítačové aritmetiky budeme čerpat z knihy Highama [2]. Předpokládáme standardní model počítačové aritmetiky, který je charakterizovaný zaokrouhlovací jednotkou $\mathbf{u}$ a vztahem:

$$\mathrm{fl}(x \circ y) = (x \circ y)(1+\delta), \quad |\delta| \leq \mathbf{u}, \tag{1.3}$$

kde symbol fl představuje výstup spočítaný v aritmetice s konečnou přesností a $\circ$ značí $\cdot, /, +, -$ či $\sqrt{}$. Častěji než zaokrouhlovací jednotka se při charakterizaci počítačové aritmetiky používá strojová přesnost $\varepsilon = 2\mathbf{u}$, která představuje vzdálenost čísla 1 od nejbližšího většího čísla v dané aritmetice. Nebude-li řečeno jinak, pracujeme v double-precision aritmetice (IEEE 754-binary 64).

Při práci v aritmetice s konečnou přesností si musíme dát pozor na *kancelaci*. Jedná se o jev, při kterém může docházet k nepřesné aproximaci rozdílu vlivem odečítání dvou blízkých čísel. Konkrétněji, chceme spočíst $a \equiv x - y$. Máme aproximace $\tilde{x} = x(1+\delta_x), \tilde{y} = y(1+\delta_y)$, označme $\tilde{a} \equiv \tilde{x} - \tilde{y}$. Pak relativní chybu rozdílu můžeme odhadnout

$$\frac{|\tilde{a} - a|}{|a|} = \frac{|x\delta_x - y\delta_y|}{|x-y|} \leq \max(|\delta_x|, |\delta_y|) \frac{|x| + |y|}{|x-y|}.$$

Pokud jsou x,y dvě sobě blízká čísla, pak relativní chyba rozdílu může být velká. Typicky bude aproximace derivace založena na vyhodnocení funkce na malém okolí daného bodu a lineární kombinací daných funkčních hodnot, při které právě může docházet ke odečítání dvou blízkých čísel.

Standardní metoda aproximace derivace funkce pomocí diferencí využívá Taylorův rozvoj, z kterého budeme v následující sekci vycházet.

V textu budeme uvažovat, že f je spojitě diferencovatelná na dostatečně velkém okolí U bodu x. Dostatečně velkým okolím U budeme rozumět takový otevřený interval, který obsahuje všechny používané body, ve kterých vyhodnocujeme funkci f. Jinak řečeno, bude to takové okolí bodu x, abychom mohli použít výsledky Věty 1.

Myšlenky a teorii v následující sekci částečně převezmeme, upravíme a doplníme zejména z [3].

1.2 Aproximace pomocí diferencí

1.2.1 Dopředná diference

Základní způsob numerického výpočtu derivace funkce využívá Taylorův rozvoj. Nechť je dáno $h > 0$, zvolme pevné $x \in \mathbb{R}$ libovolně. Mějme reálnou dvakrát spojitě diferencovatelnou funkci f na otevřeném okolí U bodu x, pro které je splněno $[x,x+h] \subset U$. Pak dle (1.2) platí

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2, \quad \xi \in (x,x+h).$$

Tento vztah můžeme využít pro aproximaci $f'(x)$. Platí

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \delta_h, \quad \delta_h \equiv -\frac{1}{2}f''(\xi)h, \tag{1.4}$$

kde δ_h nazveme *diskretizační chybou*. Lze ji omezit následovně

$$|\delta_h| \leq \frac{L}{2}h, \quad L \equiv \max_{y\in[x,x+h]}|f''(y)|. \tag{1.5}$$

Pokud zanedbáme v (1.4) člen δ_h, dostaneme aproximaci derivace $f'(x)$ pomocí *dopředné diference*:

$$\frac{\Delta_+(x)}{h} \equiv \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \tag{1.6}$$

Stačí nám vyhodnotit funkci ve dvou bodech, abychom měli přibližnou hodnotu $f'(x)$. Je tato aproximace použitelná a vypovídající?

Všimněme si, že dopředná diference je součástí definice derivace

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

Kdybychom za h dosazovali čím dál tím menší hodnoty blížící se nule, dostali bychom hodnotu derivace. Čím menší h volíme, tím dostaneme lepší aproximaci. Praktické výpočty jsou však prováděny v aritmetice s konečnou přesností. Volbou velmi malého h dojde ke kancelaci a budou vznikat zaokrouhlovací chyby, které mohou způsobit velmi nepřesný výpočet.

Odvoďme si vhodnou volbu h, která povede pokud možno na co nejmenší celkovou chybu aproximace. Pod pojmem celková chyba aproximace budeme rozumět součet diskretizační a výpočetní chyby, kde výpočetní chyba vzniká kvůli provádění výpočtů v aritmetice s konečnou přesností. Odvození je inspirováno a částečně převzato z [3].

Věta 2. *Nechť $h \in \mathbb{R}^+$, $f \in C^2(U)$, kde $[x, x+h] \subset U$, $L \equiv \max_{y\in[x,x+h]}|f''(y)|$ (jako v (1.5)), $M_f \in \mathbb{R} : |\mathrm{fl}(f(x)) - f(x)| \leq \varepsilon M_f$, kde ε je strojová přesnost. Potom platí*

$$f'(x) = \frac{\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x))}{h} + \bar{\delta}_h,$$

kde celkovou chybu aproximace $\bar{\delta}_h$ lze odhadnout pomocí

$$|\bar{\delta}_h| \leq \frac{L}{2}h + \frac{2M_f}{h}\varepsilon. \tag{1.7}$$

Důkaz. Pro jednoduchost předpokládáme, že danou funkci lze vyhodnodit s přesností danou vztahem:

$$|\mathrm{fl}(f(x)) - f(x)| \leq \varepsilon M_f, \tag{1.8}$$

kde M_f je konstanta, která může záviset na maximální hodnotě funkce na uvažovaném intervalu či složitosti/počtu operací, které funkce vyžaduje.

Vyhodnotíme-li dopřednou diferenci v aritmetice s konečnou přesností, dostaneme dle předchozího:

$$\mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{fl}(\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x)))}{h}\right) = \mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x))}{h}\right)(1+\delta_1) =$$

$$= \frac{\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x))}{h}(1+\delta_1)(1+\delta_2) = \frac{\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x))}{h} + \mathcal{O}(\varepsilon),$$

kde výpočetní chyba δ_1 vznikne odčítáním v čitateli a výpočetní chyba δ_2 vznikne dělením. Podle (1.3) dostaneme člen $\mathcal{O}(\varepsilon)$, který můžeme zanedbat. Výpočetní chybu, která vznikne při vyhodnocení dopředné diference můžeme odhadnout jako

$$\left|\frac{\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x))}{h} - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}\right| \leq \frac{2M_f}{h}\varepsilon, \tag{1.9}$$

což plyne z (1.8) a úvahy výše. Popsali jsme diskretizační a výpočetní chybu aproximace. Celkem tedy dostáváme

$$f'(x) = \frac{\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x))}{h} + \bar{\delta}_h,$$

kde první člen je spočtený výsledek a $\bar{\delta}_h$ je celková chyba aproximace, tedy

$$\bar{\delta}_h = \frac{f(x+h) - \mathrm{fl}(f(x+h))}{h} - \frac{f(x) - \mathrm{fl}(f(x))}{h} + \delta_h.$$

Pro celkovou chybu aproximace $\bar{\delta}_h$ máme z (1.5) a (1.9) odhad

$$|\bar{\delta}_h| \leq \frac{L}{2}h + \frac{2M_f}{h}\varepsilon.$$

$\square$

Naším cílem je zvolit h tak, aby chyba aproximace derivace byla co nejmenší. Ideální volba je zřídkakdy možná. Můžeme však h zvolit tak, že bude minimalizovat odhad chyby výše.

Věta 3. *Definujme* $g(h) \equiv \frac{L}{2}h + \frac{2M_f}{h}$ *pro* $h \in \mathbb{R}^+$. *Pak* $h^* = 2\sqrt{\frac{M_f}{L}\varepsilon}$ *minimalizuje* $g(h)$ *na* $\mathbb{R}^+$.

Důkaz. Pro druhou derivaci funkce g platí $g''(h) = \frac{4M_f}{h^3}\varepsilon > 0, \forall h \in \mathbb{R}^+$, tedy g je na $\mathbb{R}^+$ ryze konvexní. To znamená, že jediného minima na $\mathbb{R}^+$ nabývá ve stacionárním bodě. Hledáme takové h^*, pro které platí $g'(h^*) = 0$. Derivujeme funkci g a derivaci položíme rovnou 0, dostáváme $g'(h) = \frac{L}{2} - \frac{2M_f}{h^2}\varepsilon = 0$. Jednoduchými úpravami získáme

$$h^* = 2\sqrt{\frac{M_f}{L}\varepsilon}. \tag{1.10}$$

$\square$

V praktických problémech, kdy potřebujeme aproximovat derivaci, často nemáme mnoho informací o dané funkci. To znamená, že výraz $\frac{M_f}{L}$ nemůžeme při volbě h použít. Proto heuristicky volíme $h_+ = \sqrt{\varepsilon}$, což je vhodná volba, pokud není $\frac{M_f}{L} \gg 1$ či $\frac{M_f}{L} \ll 1$. Aproximujeme-li $f'(x)$ pomocí

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\sqrt{\varepsilon}) - f(x)}{\sqrt{\varepsilon}},$$

lze celkovou chybu aproximace odhadnout následovně

$$|\bar{\delta}_h| \leq \frac{L}{2}\sqrt{\varepsilon} + 2M_f\sqrt{\varepsilon} = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}). \tag{1.11}$$

1.2.2 Centrální diference

Aproximace derivace pomocí centrální diference také využívá Taylorův rozvoj. Zvolme pevné $x \in \mathbb{R}$ libovolně. Nechť je dáno $h > 0$. Mějme reálnou třikrát spojitě diferencovatelnou funkci f na otevřeném okolí U bodu x, které splňuje $[x-h, x+h] \subset U$. Pak dle (1.2) platí

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^3, \quad \xi_1 \in (x, x+h),$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_2)h^3, \quad \xi_2 \in (x-h, x).$$

Úpravou získáme

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \delta_h, \quad \delta_h \equiv -\frac{1}{6}(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2))h^2.$$

Diskretizační chybu δ_h omezíme

$$|\delta_h| \leq \frac{L}{3}h^2, \quad L \equiv \max_{y\in[x-h,x+h]} |f'''(y)|. \tag{1.12}$$

Zanedbáme-li diskretizační chybu δ_h, dostaneme aproximaci derivace $f'(x)$ pomocí *centrální diference*:

$$\frac{\Delta_0(x)}{h} \equiv \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. \tag{1.13}$$

Intuitivně bychom čekali, že tento přístup dá přesnější aproximaci než předchozí, neboť chyba δ_h je nyní $\mathcal{O}(h^2)$. Odvoďme si vhodnou volbu h a odhad chyby aproximace. Toto odvození se již v [3] nenachází.

Věta 4. *Nechť $h \in \mathbb{R}^+$, $f \in C^3(U)$, kde $[x-h,x+h] \subset U$. Dále nechť L jako v (1.12), $M_f \in \mathbb{R} : |\mathrm{fl}(f(x)) - f(x)| \leq \varepsilon M_f$, kde ε je strojová přesnost. Potom platí*

$$f'(x) = \frac{\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x-h))}{h} + \bar{\delta}_h,$$

kde celkovou chybu aproximace $\bar{\delta}_h$ lze odhadnout pomocí

$$|\bar{\delta}_h| \leq \frac{L}{3}h^2 + \frac{M_f}{h}\varepsilon. \tag{1.14}$$

Důkaz. Postupujeme analogicky jako minule. Nejdříve získáme odhad výpočetní chyby

$$\left| \frac{\mathrm{fl}(f(x+h)) - \mathrm{fl}(f(x-h))}{2h} - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \right| \leq \frac{M_f}{h}\varepsilon. \tag{1.15}$$

Pro celkovou chybu aproximace $\bar{\delta}_h$ máme z (1.12) a (1.15) odhad

$$|\bar{\delta}_h| \leq \frac{L}{3}h^2 + \frac{M_f}{h}\varepsilon.$$

□

Máme odhad chyby aproximace, pro kterou chceme, aby byla co nejmenší. Odhad budeme minimalizovat.

Věta 5. *Definujme $g(h) \equiv \frac{L}{3}h^2 + \frac{M_f}{h}\varepsilon$ pro $h \in \mathbb{R}^+$. Pak $h^* = \sqrt[3]{\frac{3M_f}{L}\varepsilon}$ minimalizuje $g(h)$ na $\mathbb{R}^+$.*

Důkaz. Platí $g''(x) = \frac{2L}{3} + \frac{M_f}{h^3}\varepsilon > 0$, $\forall h \in \mathbb{R}^+$, tedy g je ryze konvexní na $\mathbb{R}^+$. Svého jediného minima na $\mathbb{R}^+$ nabývá ve stacionárním bodě. Hledáme takové h^*, pro které platí $g'(h^*) = 0$. Derivujeme funkci g a derivaci položíme rovnou 0, dostáváme $g'(h) = \frac{2L}{3}h - \frac{M_f}{h^2}\varepsilon = 0$. Jednoduchými úpravami získáme

$$h^* = \sqrt[3]{\frac{3M_f}{2L}\varepsilon}. \tag{1.16}$$

□

Pokud nemůžeme při volbě h zohlednit $\frac{M_f}{L}$, tj. nemáme o funkci dost informací, budeme heuristicky brát $h_0 = \sqrt[3]{\varepsilon}$. Aproximujeme-li $f'(x)$ pomocí

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\sqrt[3]{\varepsilon}) - f(x-\sqrt[3]{\varepsilon})}{2\sqrt[3]{\varepsilon}},$$

pak celková chyba aproximace je odhadnuta

$$|\bar{\delta}_h| \leq \frac{L}{6}\sqrt[3]{\varepsilon^2} + \frac{M_f \varepsilon}{\sqrt[3]{\varepsilon}} = \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{2}{3}}), \tag{1.17}$$

tedy aproximace centrální diferencí má řádově menší celkovou chybu než aproximace dopřednou diferencí.

Na rozdíl od dopředné diference je vzdálenost bodů, ve kterých funkci vyhodnocujeme, dvojnásobná. Mohli jsme zavést aproximaci pomocí centrální diference následovně:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h},$$

což je aproximace se stejnou délkou kroku h jako u dopředné diference. Při analýze chyby aproximace a volbě h to vyjde v podstatě nastejno, jako když v našem zavedení bereme $\frac{h}{2}$ místo h.

1.2.3 Zpětná diference

Aproximace derivace pomocí zpětné diference je velmi podobná dopředné diferenci, což zmiňuje i [4]. Zvolme pevné $x \in \mathbb{R}$ libovolně a nechť $h > 0$. Mějme reálnou dvakrát spojitě diferencovatelnou funkci f na otevřeném okolí U bodu x, takovém že $[x-h,x] \subset U$. Pak dle (1.2) platí:

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2, \quad \xi \in (x-h,x).$$

Úpravou získáme:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \delta_h, \quad \delta_h \equiv \frac{1}{2}f''(\xi)h.$$

Zanedbáme-li člen δ_h, dostaneme aproximaci $f'(x)$ pomocí *zpětné diference*:

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \equiv \frac{\Delta_-(x)}{h}. \tag{1.18}$$

Téměř totožným postupem jako pro dopředné diference analyzujeme vhodnou volbu parametru h. Omezíme celkovou chybu aproximace $\bar{\delta}_h$ jako v (1.7) a dostaneme vhodnou volbu h jako v (1.10). Pokud nemůžeme při volbě h zohlednit $\frac{M_f}{L}$, tj. nemáme o funkci dost informací, budeme heuristicky brát $h_- = \sqrt{\varepsilon}$. Pokud aproximujeme $f'(x)$ pomocí

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-\sqrt{\varepsilon})}{\sqrt{\varepsilon}},$$

je celková chyba aproximace $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$.

Na první pohled se může zdát, že zavádět zpětnou diferenci je zbytečné, neboť má totožnou volbu h a stejný řád chyby aproximace jako $\frac{\Delta_+}{h}$. Zpětné diference se hodí pro aproximaci derivace v problémech, ve kterých data odpovídající hodnotám v bodech napravo od daného x nejsou k dispozici. Někdy daná data budou na derivaci i záviset. Příkladem může být dopředné a zpětné Eulerovo schéma pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic, která jsou vlastnostmi a implementací značně odlišná.

1.2.4 Aproximace s vyšším řádem přesnosti

Dopředná a zpětná diference nám daly řád chyby aproximace $O(h)$, centrální diference dokonce $O(h^2)$. Existují ještě metody aproximace s menší diskretizační chybou, které využívají další členy Taylorova rozvoje dostatečně hladké funkce.

Věta 6. *Mějme reálnou pětkrát spojitě diferencovatelnou funkci f na otevřeném U, pro které je splněno $[x-2h,x+2h] \subset U$, kde $h \in \mathbb{R}^+$. Pak platí*

$$f'(x) = \frac{8f(x+h) - 8f(x-h) - f(x+2h) + f(x-2h)}{12h} + \mathcal{O}(h^4). \tag{1.19}$$

Důkaz. Napišme si Taylorovy rozvoje funkce f v bodech $x \pm h$ a $x \pm 2h$ a použijme (1.2).

$$\begin{aligned}
f(x+h) &= f(x) + f'(x)h + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) + \frac{h^5}{120}f^{(5)}(\xi_1),\\
f(x-h) &= f(x) - f'(x)h + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) - \frac{h^5}{120}f^{(5)}(\xi_2),\\
f(x+2h) &= f(x) + f'(x)2h + \frac{(2h)^2}{2}f''(x) + \frac{(2h)^3}{6}f'''(x) + \frac{(2h)^4}{24}f^{(4)}(x) + \frac{(2h)^5}{120}f^{(5)}(\xi_3),\\
f(x-2h) &= f(x) - f'(x)2h + \frac{(2h)^2}{2}f''(x) - \frac{(2h)^3}{6}f'''(x) + \frac{(2h)^4}{24}f^{(4)}(x) - \frac{(2h)^5}{120}f^{(5)}(\xi_4),
\end{aligned}$$

kde $\xi_1 \in (x,x+h)$, $\xi_2 \in (x-h,x)$, $\xi_3 \in (x,x+2h)$, $\xi_4 \in (x-2h,x)$. Potřebujeme najít vhodnou lineární kombinaci jednotlivých diferenčních kvocientů, abychom se zbavili členů s druhou, třetí a čtvrtou derivací. Vezmeme-li osminásobek rozdílu 1. a 2. rovnice a mínus jednonásobek rozdílu 3. a 4., získáme

$$8(f(x+h) - f(x-h)) - (f(x+2h) - f(x-2h)) = 12hf'(x) + \mathcal{O}(h^5).$$

Dělením obou stran rovnice výrazem $12h$ získáme požadovaný tvar.

□

Danou aproximaci derivace budeme značit

$$\frac{\Delta_{vp}}{h} \equiv \frac{8f(x+h) - 8f(x-h) - f(x+2h) + f(x-2h)}{12h}. \tag{1.20}$$

Kvůli kancelaci nemůžeme brát libovolně malé h, opět je potřeba určit vhodnou volbu. To jsme již provedli dvakrát a odvození byla velmi podobná. Výpočetní chybu obecně omezíme výrazem $\frac{K_1}{h}\varepsilon$, pro nějakou kladnou konstantu K_1. Diskretizační chyba je řádu $\mathcal{O}(h^4)$, tu omezíme výrazem K_2Lh^4, pro nějakou kladnou konstantu K_2, kde $L \equiv \max_{y\in[x-2h,x+2h]}|f^{(5)}(y)|$. Dostáváme odhad $\bar{\delta}_h \leq K_2Lh^4 + \frac{K_1}{h}\varepsilon$. Výraz napravo uvažujeme jako funkci proměnné h a hledáme bod ve kterém nabývá minima. To splňuje

$$h^* = \sqrt[5]{\frac{K_1}{4LK_2}\varepsilon}.$$

Pokud nemůžeme zohlednit konstanty závisející na f, bereme heuristicky $h = \sqrt[5]{\varepsilon}$. Pro tuto volbu lze z odhadu $\bar{\delta}_h$ očekávat, že celková chyba aproximace bude řádu $\mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{4}{5}})$.

Existuje mnoho vzorečků kombinujících různé diferenční kvocienty, které dávají různě přesné aproximace v závislosti na tom, kolikrát je funkce spojitě diferencovatelná a kolik diferenčních kvocientů použijeme. Některé z nich včetně (1.20) najdeme v článku [5].

Dá se očekávat, že pro aproximace ještě vyšších řádu se bude celková chyba blížit k $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Dostáváme přesnější aproximace, ale nevýhodou je větší výpočetní náročnost a potřeba znalosti vícero funkčních hodnot. V praxi se tedy tyto složitější vzorce spíše nevyužívají.

1.3 Využití komplexní aritmetiky

1.3.1 Odvození aproximace

K odvození metody budeme potřebovat větu o rozvoji holomorfní funkce na kruhu do mocninné řady, kterou najdeme například v [6, str. 144]. Základní myšlenky a odvození vychází z [7].

Věta 7. *Nechť je funkce f holomorfní na otevřeném kruhu $U(z_0,r)$ se středem $z_0 \in \mathbb{C}$ a poloměrem $r > 0$. Potom existuje jediná mocninná řada $\sum_{n=0}^{\infty} a_n(z-z_0)^n$, která má na $U(z_0,r)$ součet f. Navíc platí, že $a_n = \frac{f^{(n)}(z_0)}{n!}, n \in \mathbb{N}_0$.*

Mějme holomorfní funkci f na $U(x,r), r > 0$. Pak se dle Věty 7 f na $U(x,r)$ rovná své Taylorově řadě. Předpokládejme dále, že f nabývá reálných hodnot na $(x-r,x+r)$. Pro reálné h splňující $|h| < r$ dostáváme:

$$f(x+ih) = f(x) + f'(x)ih - h^2\frac{1}{2}f''(x) - ih^3\frac{1}{6}f^{(3)}(x) + \dots,$$

kde i je imaginární jednotka. Pokud vezmene imaginární část výrazu na pravé i levé straně a vydělíme h, dostaneme:

$$\frac{\mathrm{Im}[f(x+ih)]}{h} = f'(x) - h^2\frac{1}{6}f^{(3)}(x) + \dots. \tag{1.21}$$

Tento vztah můžeme využít pro aproximaci derivace. Jednoduchou úpravou dostaneme

$$f'(x) = \frac{\mathrm{Im}[f(x+ih)]}{h} + \delta_h, \quad \delta_h \equiv h^2 \frac{1}{6} f^{(3)}(x) - \dots, \tag{1.22}$$

kde diskretizační chyba δ_h je řádu $\mathcal{O}(h^2)$. Zanedbáme-li člen δ_h, dostáváme aproximaci derivace pomocí *komplexní aritmetiky*:

$$\frac{\mathrm{Im}[f(x+ih)]}{h} \equiv \frac{\Delta_c(x)}{h}. \tag{1.23}$$

Čím menší h volíme, tím teoreticky lepší aproximaci dostaneme, jak ukazuje následující věta.

Věta 8. *Nechť je f holomorfní funkce na $U(x,r)$ pro nějaké $r > 0$ a pevné $x \in \mathbb{R}$. Dále nechť f nabývá reálných hodnot na $(x-r,x+r)$. Pak platí*

$$\lim_{h\to 0} \frac{\Delta_c(x)}{h} = f'(x).$$

Důkaz. Funkce f je holomorfní na $U(x,r)$, tedy pro $|h| < r$ dostaneme výraz jako v (1.21). Dále dostáváme

$$\lim_{h\to 0} \frac{\Delta_c(x)}{h} = \lim_{h\to 0} \frac{\mathrm{Im}[f(x+ih)]}{h} = \lim_{h\to 0} (f'(x) - h^2 \frac{1}{6} f^{(3)}(x) + ...) = f'(x).$$

□

Oproti minulým přístupům máme nyní v aproximaci pouze jeden člen, tedy nedochází ke kancelaci. Díky tomu můžeme do výrazu dosazovat malé hodnoty h, zmenšit vliv diskretizace a získat tak přesnější aproximaci. Jak jsme již ukázali, chyba diskretizace je řádu $O(h^2)$. Pro analýzu celkové chyby aproximace potřebujeme ještě vědět, jak je to s výpočetní chybou.

Předpokládejme, že pracujeme v počítačové aritmetice a funkci f jsme schopni vyhodnotit s určitou přesností danou vztahem

$$\mathrm{fl}(f(x)) = (1 + \varepsilon C_{f,x}) f(x), \tag{1.24}$$

kde $C_{f,x} \in \mathbb{R}$ závisí na dané funkci a bodě, ve kterém ji vyhodnocujeme. V následujícím textu budeme implicitně předpokládat, že je splněno

$$\varepsilon \, |C_{f,x+ih}| \ll 1. \tag{1.25}$$

Věta 9. *Nechť f je holomorfní funkce na $U(x,r), r > 0$ a nabývá reálných hodnot na $(x-r,x+r)$. Potom platí:*

$$f'(x) = \mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{Im}[\mathrm{fl}(f(x+ih))]}{h}\right) \frac{1}{(1+\varepsilon C_{f,x+ih})(1+\delta_\varepsilon)} + \delta_h, \tag{1.26}$$

kde $|\delta_\varepsilon| \le \varepsilon$ a δ_h je diskretizační chyba.

Důkaz. Dle (1.3) máme

$$\mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{Im}[\mathrm{fl}(f(x+ih))]}{h}\right) = \frac{\mathrm{Im}[\mathrm{fl}(f(x+ih))]}{h}(1+\delta_\varepsilon). \tag{1.27}$$

Dohromady dostáváme

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{\mathrm{Im}[f(x+ih)]}{h} + \delta_h = \frac{\mathrm{Im}[\mathrm{fl}(f(x+ih))]}{(1+\varepsilon C_{f,x+ih})h} + \delta_h \\ &= \mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{Im}[\mathrm{fl}(f(x+ih))]}{h}\right)\frac{1}{(1+\varepsilon C_{f,x+ih})(1+\delta_\varepsilon)} + \delta_h, \end{aligned}$$

kde první rovnost jsme získali dle (1.22), v druhé rovnosti jsme dosadili z (1.24) a v poslední rovnosti z (1.27). Protože předpokládáme (1.25), je (1.26) dobře definováno.

□

Z (1.26) je vidět, že můžeme volit mnohem menší hodnoty h, zanedbat tak vliv diskretizační chyby δ_h a získat dobrý odhad derivace. Konkrétněji spočteme

$$\mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{Im}[\mathrm{fl}(f(x+ih))]}{h}\right) \approx (1+\varepsilon C_{f,x+ih})(1+\delta_\varepsilon)f'(x). \tag{1.28}$$

Vidíme, že nám aproximaci může zkazit $C_{f,x+ih}$. Pro funkce, které splňují (1.25), což je požadavek na to být schopný rozumně vyhodnotit funkci, platí následující

$$(1+\varepsilon C_{f,x+ih})(1+\delta_\varepsilon) \approx 1. \tag{1.29}$$

Získáme tak velmi dobrou aproximaci derivace.

V praxi nemůžeme za h volit libovolně malou hodnotu, konkrétně menší než nejmenší reprezentovatelné číslo v dané počítačové aritmetice (v případě double-precision se jedná přibližně o hodnotu $2{,}2 \times 10^{-308}$), aby nedošlo ke zaokrouhlení na 0. Brát za h nejmenší reprezentovatelné číslo je riskantní, lepší je se nepohybovat blízko nejmenšího reprezentovatelného čísla.

Podívejme se konkrétněji na to, jak volit h, chceme-li eliminovat vliv diskretizační chyby. Pracujeme v aritmetice s konečnou přesností a chtěli bychom, aby relativní chyba spočtené derivace byla na úrovni strojové přesnosti ε. Toho dosáhnout nemusíme pro žádnou volbu h, pokud není splněno (1.25), tj. pokud je $C_{f,x+ih}$ velké. Tedy chceme, aby relativní chyba spočtené derivace byla na úrovni $\varepsilon C_{f,x+ih}$, to jest

$$\left| f'(x) - \mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{Im}[\mathrm{fl}(f(x+ih))]}{h}\right)\right| \approx \varepsilon C_{f,x+ih}\left|f'(x)\right|. \tag{1.30}$$

Levou stranu (1.30) upravíme dosazením z (1.26) a dostaneme

$$\left|(1-(1+\varepsilon C_{f,x+ih})(1+\delta_\varepsilon))f'(x) + \delta_h\right| \approx \varepsilon C_{f,x+ih}\left|f'(x)\right|.$$

Na levé straně zanedbáme členy na úrovni strojové přesnosti, získáme tak

$$\left|-f'(x)\varepsilon C_{f,x+ih} + \delta_h\right| \approx \varepsilon C_{f,x+ih} \left|f'(x)\right|. \tag{1.31}$$

Z (1.31) dostáváme po δ_h požadavek

$$|\delta_h| \ll \varepsilon C_{f,x+ih} \left|f'(x)\right|, \tag{1.32}$$

kde δ_h jsme definovali v (1.22). Bereme-li v potaz vedoucí člen δ_h, tak chceme takové h, aby bylo splněno

$$\frac{h^2}{6}\left|f^{(3)}(x)\right| \ll \varepsilon C_{f,x+ih} \left|f'(x)\right|, \tag{1.33}$$

což je podobný požadavek jaký se nachází v [8], kde neuvažovali $C_{f,x+ih}$.

I když h můžeme volit velmi malé, tak nemusí být pro $f'(x)$ blízké 0 požadavek (1.33) vždy splněn. Většinou by mělo stačit volit $h = \varepsilon$. I když dokážeme eliminovat vliv diskretizační chyby volbou dostatečně malého h, získáme pouze aproximaci a ne přesnou derivaci. Kromě vztahu (1.28) (kde jsme již diskutovali, jak nám $C_{f,x+ih}$ může zkazit aproximaci) je to dáno i tím, že pracujeme v aritmetice s konečnou přesností a máme hranici přesnosti danou ε.

1.3.2 Souvislost se standardním přístupem

Všimneme si, že centrální diference a přístup přes komplexní aritmetiku aproximují $f'(x)$ s diskretizační chybou stejného řádu $\mathcal{O}(h^2)$. Pokud vezmeme aritmetický průměr spočtené derivace pomocí centrální diference a komplexního přístupu, získáme z pohledu diskretizační chyby kvalitnější aproximaci.

Věta 10. *Nechť $\frac{\Delta_0(x)}{h}$ je aproximace derivace pomocí centrální diference a $\frac{\Delta_c(x)}{h}$ aproximace derivace spočtená přes komplexní přístup. Pak platí*

$$\frac{\frac{\Delta_0(x)}{h} + \frac{\Delta_c(x)}{h}}{2} = f'(x) + \mathcal{O}(h^4). \tag{1.34}$$

Dále platí, že relativní rozdíl aproximací je $\mathcal{O}(h^2)$ s koeficientem $\frac{f^{(3)}(x)}{3f'(x)}$.

Důkaz. Z předchozích úvah máme

$$\frac{\Delta_0(x)}{h} = f'(x) + h^2\frac{1}{3!}f^{(3)}(x) + h^4\frac{1}{5!}f^{(5)}(x) + \dots, \tag{1.35}$$

$$\frac{\Delta_c(x)}{h} = f'(x) - h^2\frac{1}{3!}f^{(3)}(x) + h^4\frac{1}{5!}f^{(5)}(x) - \dots. \tag{1.36}$$

Dostáváme

$$\frac{\frac{\Delta_0(x)}{h} + \frac{\Delta_c(x)}{h}}{2} = f'(x) + h^4\frac{1}{5!}f^{(5)}(x) + \dots = f'(x) + \mathcal{O}(h^4).$$

Relativní rozdíl $\frac{\Delta_0(x)}{h}$ a $\frac{\Delta_c(x)}{h}$ je s využitím (1.36)

$$\frac{\frac{\Delta_0(x)}{h} - \frac{\Delta_C(x)}{h}}{f'(x)} = \frac{\frac{2}{3!}f^{(3)}(x)h^2 + \frac{2}{7!}f^{(7)}(x)h^6 + \dots}{f'(x)} \approx \frac{f^{(3)}(x)}{3f'(x)}h^2. \tag{1.37}$$

□

Vezmeme-li tedy aritmetický průměr aproximace derivace přes centrální diferenci a komplexní přístup, získáváme aproximaci, jejíž řád chyby je $\mathcal{O}(h^4)$, což je až o dva řády přesnější než jednotlivé přístupy zvlášť. Toto zajímavé pozorování je zmíněno i v [9, str. 44].

Nutno podotknout, že musíme být opatrní při volbě parametru h, neboť v případě centrální diference dochází pro příliš malá h ke kancelaci. Dále si musíme dát pozor, abychom nebrali slepě jako vhodnou volbu $h = \sqrt[3]{\varepsilon}$, kterou jsme odvodili pro $\frac{\Delta_0(x)}{h}$ dříve. Pro (1.34) musíme opět provést odhad celkové chyby. Stejně jako v (1.20) máme diskretizační chybu řádu $\mathcal{O}(h^4)$ a analogicky odvodíme heuristickou volbu $h = \sqrt[5]{\varepsilon}$. Konkrétně, celková chyba aproximace bude menší se zmenšujícím se h přibližně do hodnoty $h = \sqrt[5]{\varepsilon}$. Pro menší hodnoty h bude celková chyba obecně narůstat. Heuristickou volbou $h = \sqrt[5]{\varepsilon}$ dostaneme řád chyby aproximace $\mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{4}{5}})$, kde $\varepsilon^{\frac{4}{5}} \approx 10^{-13}$.

Otázkou je, zda má praktický smysl použít tuto kombinovanou aproximaci. Používáme-li již $\frac{\Delta_c(x)}{h}$, tak můžeme jít s h do velmi malých hodnot a dosáhnout relativní přesnost ε, počítat k tomu $\frac{\Delta_0(x)}{h}$ zvýší pouze výpočetní náklady. Přesto (1.34) má smysl někdy použít. V některých aplikacích není možné brát h příliš malé. Hodnotu dané funkce jsme schopni například změřit v pouze nějakých časových okamžicích a minimální vzdálenost h dvou časových okamžiků je dána možnostmi měřícího přístroje. Tedy v případech, kdy h nemůže být příliš malé, lze použít (1.34) a dostat tak lepší aproximaci derivace.

Z druhé části věty plyne, že podle teorie by měl být relativní rozdíl spočtení derivace těmito přístupy řádu $\mathcal{O}(h^2)$. Již víme, že pro příliš malé hodnoty h (přibližně pro $0 \leq h \leq \sqrt[3]{\varepsilon}$, kde právě $\sqrt[3]{\varepsilon} \approx 10^{-6}$ je vhodná volba h pro $\frac{\Delta_0(x)}{h}$) dochází v aproximaci pomocí centrální diference ke kancelaci a tedy i zhoršení aproximace a rozdíl bude značně větší. Ale pro $h \geq \sqrt[3]{\varepsilon}$ bychom měli čekat (1.37).

1.3.3 Jiné způsoby odvození

K odvození aproximace (1.23) lze využít Cauchy-Riemannových podmínek, jak je popsáno v [8]. Nechť $f = f_1 + if_2$, kde f_1, f_2 jsou reálné funkce, je komplexní funkce komplexní proměnné $z = x + iy$, která je holomorfní na dostatečně velkém okolí bodu z. Pak na daném okolí bodu z platí Cauchy-Riemannovy rovnice:

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} = \frac{\partial f_2}{\partial y}, \quad \frac{\partial f_1}{\partial y} = -\frac{\partial f_2}{\partial x}, \tag{1.38}$$

viz například [6, str. 47]. První rovnost můžeme využít pro derivaci reálné složky f podle reálné proměnné jako

$$\frac{\partial f_1}{\partial x}(z) = \lim_{h \to 0} \frac{f_2(x + i(y + h)) - f_2(x + iy)}{h}. \tag{1.39}$$

Zabýváme se aproximací derivace reálné funkce reálné proměnné. To znamená, že $y = 0, f_2(x) = 0, f_1(x) = f(x)$. Úpravou (1.39) dostáváme

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f_2(x + ih)}{h} = \lim_{h \to 0} \frac{\mathrm{Im}[f(x + ih)]}{h}.$$

Pro malá h dostáváme stejnou aproximaci derivace jako v (1.23). Výhodou původního odvození je, že v (1.21) rovnou vidíme, jak je to s diskretizační chybou aproximace.

Vztah (1.23) lze získat ještě dalším způsobem. Ten využívá poznatků z komplexní analýzy, je elegantnější a ještě více dá do souvislosti metodu používající komplexní aritmetiku s metodou přes centrální diferencí. Budeme vycházet z Cauchyova vzorce pro kruh a následně aplikovat vhodný kvadraturní vzorec pro aproximaci integrálu. Právě takto vycházeli při odvození metody založené na komplexní aritmetice Lyness a Moler [10]. Postup, který ukážeme, najdeme také na webové stránce [1]. Následující větu lze nalézt například v [6, str. 114].

Věta 11. *Nechť funkce f je holomorfní na kruhu o středu $a \in \mathbb{C}$ a poloměru $r > 0$. Nechť $\Gamma(t) = a + re^{it}, t \in [0,2\pi]$. Potom pro libovolný bod $z_0 \in U(a,r)$ platí:*

$$f^{(n)}(z_0) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_\Gamma \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz. \tag{1.40}$$

Vzorec představuje způsob, jak spočítat n-tý koeficient Taylorova rozvoje holomorfní funkce v libovolném bodu. Nás bude zajímat případ pro $n = 1$, tj.

$$f'(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_\Gamma \frac{f(z)}{(z - z_0)^2} dz, \tag{1.41}$$

kde f je holomorfní na $U(z_0,h)$, $\Gamma(t) = z_0 + he^{it}, t \in [0,2\pi], z_0 \in \mathbb{C}, 0 < h < r$. Provedením substituce

$$z - z_0 = he^{it}, \quad dz = ihe^{it}dt$$

dostáváme

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_\Gamma \frac{f(z)}{(z - z_0)^2} dz = \frac{1}{2\pi h} \int_0^{2\pi} f(z_0 + he^{it}) e^{-it} dt. \tag{1.42}$$

Abychom pomocí (1.41), (1.42) spočetli derivaci, musíme být schopni spočítat integrál. Nehledáme přesné analytické řešení, ale aproximaci.

Integrujeme reálnou funkci f na intervalu $(0,2\pi)$, cílem je vhodně aproximovat $\int_0^{2\pi} f(t)dt$. Přímočarou metodou je aproximace pomocí Riemannových součtů definujících integrál. Daný interval rozdělíme rovnoměrným dělením na N bodů s krokem dělení $2\pi/N$. Integrál aproximujeme *obdélníkovým pravidlem*

$$\int_0^{2\pi} f(t)dt \approx \frac{2\pi}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{2\pi}{N}\left(k + \frac{1}{2}\right)\right), \tag{1.43}$$

[1] https://www.hedonisticlearning.com/posts/complex-step-differentiation.html

které odpovídá součtu obsahu obdélníků o šířce $\frac{2\pi}{N}$ a výšce danou funkční hodnotou f ve středu podinteravlu. Součtu (1.43) se také říká středový součet.

Aproximace derivace pomocí komplexní aritmetiky odpovídá volbě velmi malého poloměru h. Aproximujeme-li integrál na pravé straně rovnosti (1.42) obdélníkovým pravidlem s $N = 2$ a využijeme-li toho, že $e^{i\frac{\pi}{2}} = i$ a $e^{i\frac{3\pi}{2}} = -i$, dostáváme

$$f'(z_0) \approx \frac{1}{2hi}(f(z_0 + ih) - f(z_0 - ih)).$$

Pro reálné x tedy můžeme aproximovat derivaci pomocí

$$f'(x) \approx \frac{1}{2hi}(f(x + ih) - f(x - ih)). \tag{1.44}$$

Kromě holomorfnosti funkce f nyní opět předpokládejme, že f nabývá reálných hodnot pro reálné argumenty. Potom platí

$$f(\overline{z}) = \overline{f(z)}, \tag{1.45}$$

kde $\overline{z}$ je komplexně sdružené číslo k z. Důkaz lze nalézt v [11, str. 231]. Vztah (1.45) využijeme v následující sérii úprav

$$f(x + ih) - f(\overline{x + ih}) = f(x + ih) - \overline{f(x + ih)} = 2i\,\mathrm{Im}(f(x + ih)). \tag{1.46}$$

Dosazením (1.46) do (1.44) dostáváme

$$\frac{1}{2hi}(f(x + ih) - f(x - ih)) = \frac{\mathrm{Im}(f(x + ih))}{h}.$$

Tedy jsme získali stejnou aproximaci derivace jako v (1.23). Vidíme, že aproximaci pomocí komplexní aritmetiky můžeme chápat jako centrální diferenci podél imaginární osy místo podél osy reálné.

Otázkou je, zda je aproximace pomocí komplexní aritmetiky ve tvaru (1.44) numericky stabilní pro malé hodnoty h, tedy lze-li ji použít. Vraťme se obecně k otázce přesnosti při počítání v počítačové aritmetice. V následujícím odstavci budeme uvažovat reálnou funkci f reálné proměnné x.

Při počítání v počítačové aritmetice nastávají dva problémy. Zaprvé, pokud $|h| \leq \varepsilon\,|x|$, pak platí $\mathrm{fl}(x + h) = x$ pro nenulové x. Druhý problém je kancelace, kdy pro malé hodnoty h může být při odečítání dvou blízkých hodnot a následném dělení parametrem $2h$ výsledek spočten s velmi špatnou relativní přesností. Tyto problémy nenastanou, pokud $x = 0$ a $f(x) = 0$. V takovém případě můžeme pro aproximaci centrální (dopřednou, zpětnou) diferencí volit i menší hodnoty h a nedojde ke zhoršení přesnosti (výpočetní chyba se neprojeví).

Chceme-li aproximovat derivaci funkce v reálném čísle a předpokládáme-li že funkce nabývá reálných hodnot pro reálná čísla, pak imaginární část x i $f(x)$ je 0. V takovém případě dle úvahy výše můžeme očekávat, že i výpočet (1.44) bude numericky stabilní.

Nabízí se možnost aproximovat integrál i jiným kvadraturním vzorcem, například *lichoběžníkovým pravidlem*

$$\int_0^{2\pi} f(t)dt \approx \frac{2\pi}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \left[f\left(\frac{2\pi}{N}k\right) + f\left(\frac{2\pi}{N}(k+1)\right)\right], \tag{1.47}$$

které odpovídá součtu obsahu lichoběžníků na jednotlivých podintervalech dělení. Opět budeme volit velmi malé h a $N = 2$. Pro spočtení aproximace lichoběžníkovým pravidlem potřebujeme funkci vyhodnotit v $t = 0$ a $t = \pi$. V těchto bodech ji umíme jednoduše spočíst. Pro daná t je $e^{it} = \pm 1$. Celkem dostáváme

$$f'(z_0) \approx \frac{1}{2h}(f(z_0 + h) - f(z_0 - h)),$$

co není nic jiného než aproximace derivace pomocí centrální diference.

Ze symetrie $\frac{\Delta_0(x)}{h}$ a $\frac{\Delta_c(x)}{h}$ ve tvaru (1.44) bychom mohli usoudit, že budeme-li chtít spočíst derivaci v ryze imaginárním čísle, tak centrální diference $\frac{\Delta_0(x)}{h}$ povede na dobrou aproximaci.

1.4 Aproximace gradientu

Předchozích poznatků o aproximaci derivace funkce jedné proměnné lze využít k aproximaci derivace funkce či zobrazení více proměnných. Jako příklad ukazujeme, jak aproximovat gradient funkce.

Nechť $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je funkce n proměnných. Chceme aproximovat ∇f, tedy všech n parciálních derivací. Pro pevně zvolené x označme

$$g_i(h) = f(x + he_i),$$

tedy funkce $g_i(h)$ je funkce jedné reálné proměnné h. Potom

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} g_1'(0) \\ \vdots \\ g_n'(0) \end{bmatrix}. \tag{1.48}$$

K aproximaci jednotlivých derivací využijeme poznatků z předchozího textu, kde pro jednotlivé způsoby aproximace předpokládáme pro funkci f stejné požadavky diferencovatelnosti.

Ještě více než v aproximaci jednodimenzionální derivace musíme v případě aproximace gradientu dbát na výpočetní náklady. Obě standardní metody pomocí diferencí mají svou výhodu i nevýhodu. Centrální diference je přesnější, chyba aproximace je řádu $\mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{2}{3}})$ (pro double-precision $\mathcal{O}(10^{-11})$), kdežto chyba aproximace u dopředné diference je řádu $\mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}})$ (pro double-precision $\mathcal{O}(10^{-8})$).

Je-li f funkce n proměnných, pak centrální diference potřebuje vyhodnotit funkci v $2n$ bodech, kdežto dopředná diference pouze v $n + 1$ bodech. Dopředná diference je tedy levnější a pro velká n je potřeba zvážit, zda zvýšená přesnost stojí za dražší výpočet, jak se zmiňuje i v [3].

V případě aproximace pomocí komplexní aritmetiky máme pro funkci f n proměnných použitím tvaru (1.23) n operací. Funkci však vyhodnocujeme v komplexním čísle, takže výpočetní náročnost může být vyšší.

2. Numerické experimenty

V této kapitole se budeme věnovat numerickým experimentům, které budeme provádět v prostředí MATLAB 9.13 (R2022b). Podíváme se na jednotlivé metody aproximace derivace a ověříme teoretické poznatky popsané v předchozí kapitole. Nejdříve budeme zkoumat, jak je to s relativní přesností výpočtu derivace.

2.1 Relativní a absolutní chyba

V této sekci budeme zkoumat relativní chybu, které se dopustíme aproximací derivace jednotlivými metodami, tj. zkoumáme

$$\left| \frac{f'(x) - \frac{\Delta_m}{h}}{f'(x)} \right|, \tag{2.1}$$

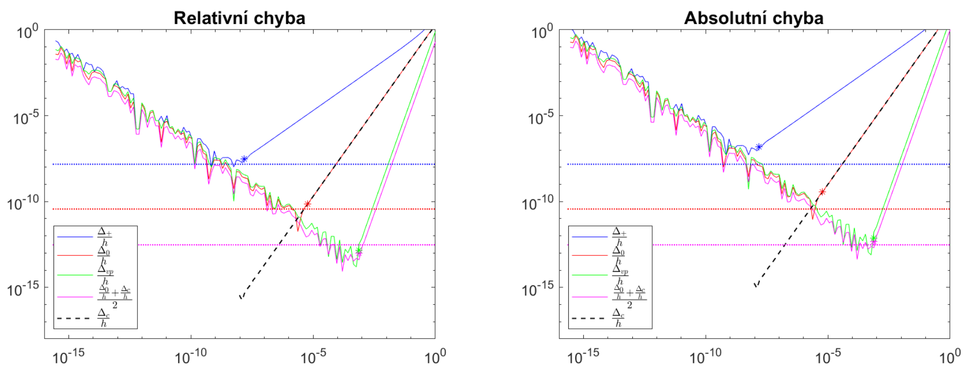
kde $\frac{\Delta_m}{h}$ značíme obecně aproximaci derivace spočtené nějakou metodou. V bodech x, kde $f'(x) = 0$, není rozumné na měření kvality spočtené aproximace použít relativní chybu (2.1). Vykreslovat proto budeme i absolutní chybu

$$\left| f'(x) - \frac{\Delta_m}{h} \right|, \tag{2.2}$$

která nás spíše než relativní chyba může zajímat například v optimalizačních úlohách.

Srovnávat budeme 5 metod: aproximaci pomocí dopředné diference (1.6), centrální diference (1.13), diference s vyšším řádem přesnosti (1.20), komplexní aritmetiky (1.23) a průměrovanou aproximaci (1.34).

Nejdříve zkoumejme derivace různých polynomiálních funkcí. Grafy obsahují křivky relativní přesnosti jednotlivých metod. Na osu x vynášíme hodnotu diskretizačního parametru h (v logaritmické škále), na osu y hodnotu relativní či absolutní chyby (opět v logaritmickém měřítku). Hvězdičky označují relativní chyby pro heuristické volby parametru h a vodorovné přerušované čáry značí řád odhadu celkové chyby pro danou heuristickou volbu viz (1.11) a (1.17).

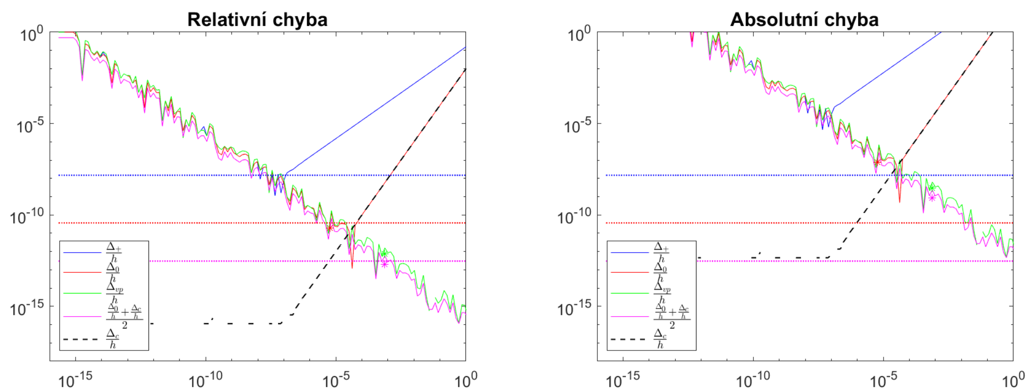


Obrázek 2.1: $f(x) = x^5$ v bodě $x = 1$.

Vidíme, že Obrázek 2.1 odpovídá teoretickým poznatkům. Pro velké hodnoty h převládá diskretizační chyba. Se zmenšujícím se h se relativní chyba zmenšuje. Blížíme-li se s h ke strojové přesnosti, začíná převládat vliv výpočetní chyby (projevuje se kancelace) a aproximace se zhoršuje. Pro přístup přes komplexní aritmetiku pozorujeme, že nedochází ke kancelaci a pro velmi malá h je potlačen vliv diskretizační chyby a relativní chyba se dostane dokonce pod úroveň strojové přesnosti. Křivka chyby pro $\frac{\Delta_c}{h}$ není pro velmi malé hodnoty h vidět, neboť jsou chyby aproximací spočtených touto metodou pod úrovní strojové přesnosti. Teorii také odpovídají řády přesnosti jednotlivých metod, což se projevuje rychlostí klesání relativní chyby. Dále vidíme, že jednotlivé heuristické volby h jsou v tomto případě velmi dobrou volbou.

Již u prvního experimentu stojí za to zmínit poznatky Věty 10, konkrétně (1.37), kde se říká, že relativní rozdíl aproximace derivace pomocí $\frac{\Delta_c}{h}$ a $\frac{\Delta_0}{h}$ je řádu $\mathcal{O}(h^2)$. To se v grafu projevuje tím, že se jednotlivé křivky relativní chyby pro $\frac{\Delta_c}{h}$ a $\frac{\Delta_0}{h}$ částečně překrývají. To pro menší hodnoty h přestane platit, neboť pro $\frac{\Delta_0}{h}$ se začne projevovat výpočetní chyba.

Grafy pro relativní a absolutní chybu vypadají totožně, neboť hodnota derivace pro f v $x = 1$ je v rámci jednotek. V dalším příkladě pro jinou funkci uvažujeme takový bod, aby hodnota derivace byla větší a byl vidět rozdíl mezi relativní a absolutní chybou.

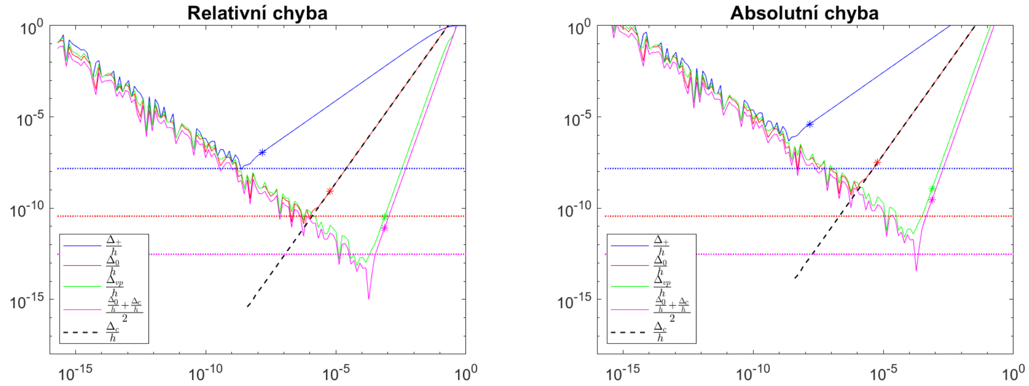


Obrázek 2.2: $f(x) = x^4$ v bodě $x = 10$.

Oproti prvnímu případu vidíme, že na Obrázku 2.2 je chování chyby dvou metod velmi odlišné. Přístupy $\frac{\Delta_{vp}}{h}$ a $\frac{\Delta_c + \Delta_0}{h}$ počítají přesnou derivaci plus výraz, ve kterém se vyskytují až 5. derivace funkce f, viz (1.19) a (1.35). Platí, že $(x^4)^{(5)} = 0$, tedy dané přístupy teoreticky počítají přesnou hodnotu derivace. Proto je aproximace nejlepší, volíme-li větší h. Se zmenšujícím se h se aproximace zhoršuje z důvodu narůstající výpočetní chyby. Obecně, pokud metoda aproximace derivace (pomocí konečných diferencí) má diskretizační chybu řádu $\mathcal{O}(h^n)$, pak bude teoreticky počítat přesnou hodnotu derivace polynomů stupně $\leq n$.

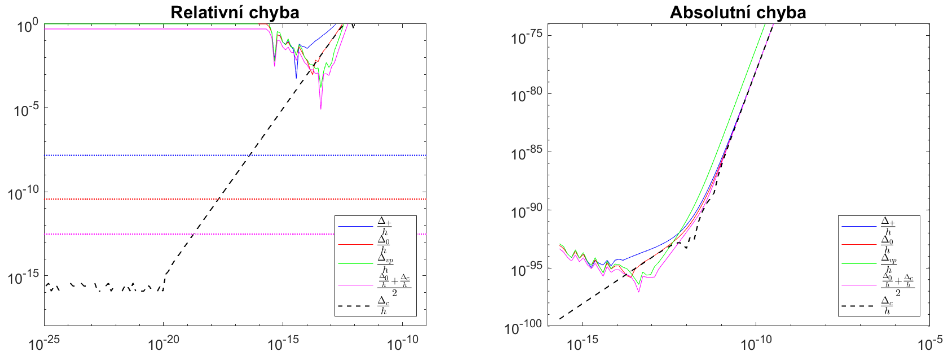
Také stojí za to si povšimnout, že vodorovné čáry netvoří horní odhad pro body $*$. To je způsobeno tím, že jsme zanedbali neznámé konstanty v odhadech (1.11) a (1.17).

Zkusme nyní složitější polynom vyššího stupně.



Obrázek 2.3: $f(x) = x(x-1)(x+5)^2(x-2)^9$ v bodě $x = 1$.

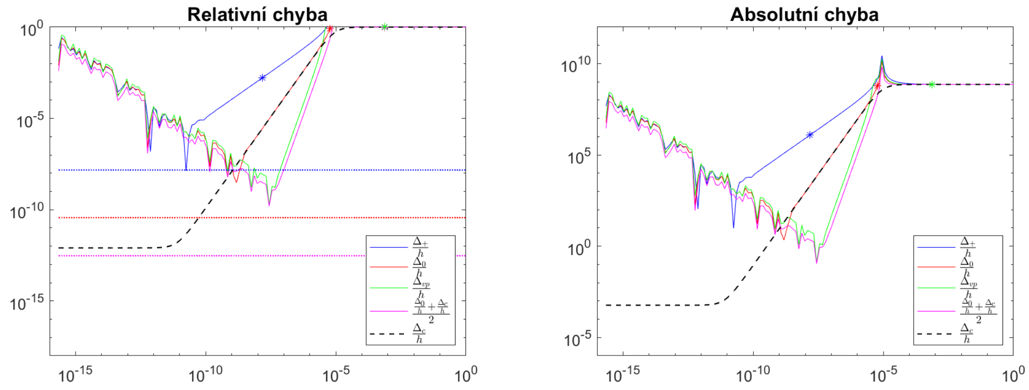
Situace je podobná s malým rozdílem, že optimální volba h je menší než námi heuristicky zvolená. To je způsobeno tím, že jsme při heuristické volbě h zanedbali různé konstanty, viz (1.10) a (1.16). Podívejme se, jak budou grafy vypadat pro body z blízkého okolí bodu 2, kde je derivace nulová.



Obrázek 2.4: $f(x) = x(x-1)(x+5)^2(x-2)^9$ v bodě $x = 2.000000000001$.

Z Obrázku 2.4 je vidět, že aproximace se zhorší z pohledu relativní chyby, což je způsobeno tím, že hodnota derivace v daném bodě je velmi blízko 0. Diskretizací se dopouštíme větších numerických nepřesností a proto argument minim křivek odpovídá menším hodnotám h než jsou námi heuristicky zvolené. Metoda přes komplexní aritmetiku pro velmi malá h spočte derivaci s relativní chybou na úrovni strojové přesnosti. Z grafu pro absolutní chybu je vidět, že i ostatní metody dají dobrou aproximaci.

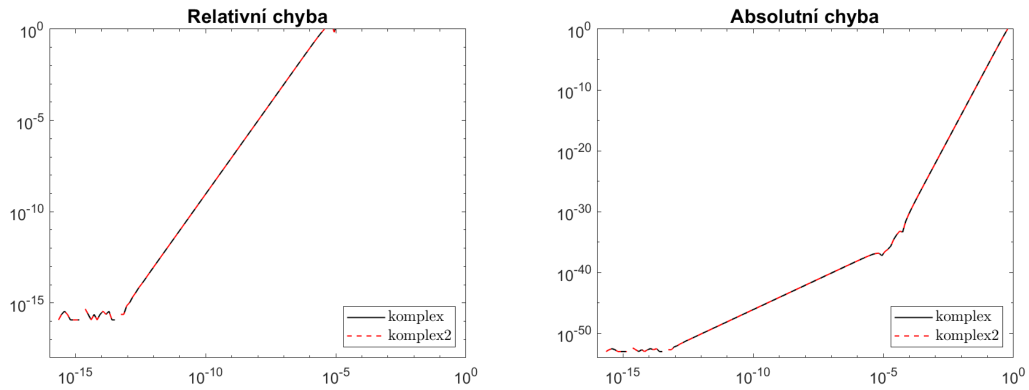
Otestujme metody na jednom složitějším příkladu racionální funkce v blízkém okolí jejího pólu.



Obrázek 2.5: $f(x) = \frac{x^{20}-x^{14}+x^8-20x^7-2x+1}{3x^{31}-2x^{12}+x^4-12x-3}$ v bodě $x = 1.06044$.

Je vidět, že relativní i absolutní chyba se zhoršila pro všechny metody. Metoda $\frac{\Delta_c}{h}$ stále dává dobrou aproximaci pro malá h. Tohle byl extrémní případ, kdy aproximujeme derivaci v bodě, který je blízký pólu racionální funkce.

Konečně, podívejme se na to, zda je způsob výpočtu (1.44) aproximace derivace $\frac{\Delta_c}{h}$ numericky stabilní i pro malá h. Otestujme na stejné funkci jako v Obrázku 2.4 pro $x = 2.00001$.



Obrázek 2.6: $f(x) = x(x-1)(x+5)^2(x-2)^9$ v bodě $x = 2.00001$, srovnání jednotlivých tvarů $\frac{\Delta_c}{h}$.

Vidíme, že není rozdíl, který z tvarů pro $\frac{\Delta_c}{h}$ použijeme, a že pro (1.44) není problém s odečítáním dvou blízkých čísel, což odpovídá diskuzi ze strany 16.

2.2 Využití Chebfunu

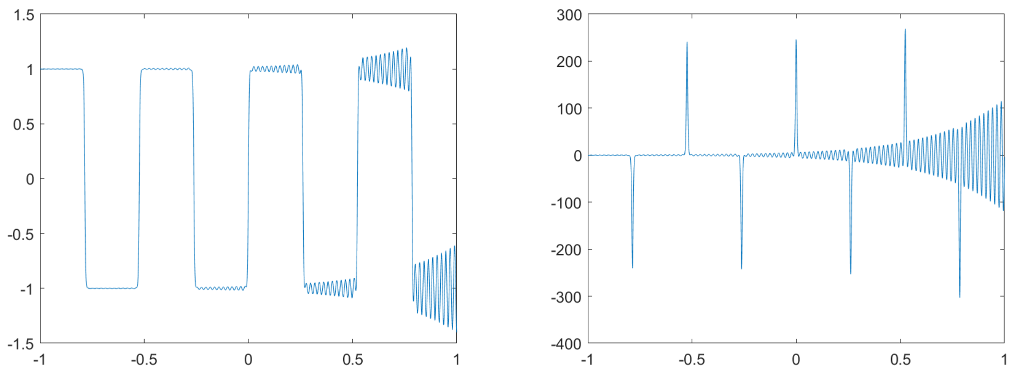
V této části k experimentům využijeme matlabovský toolbox Chebfun [1]. Chebfun je open source software rozšiřující MATLAB pro počítání s funkcemi, viz též [12]. Jeho implementace je založena na interpolaci funkce v dostatečném počtu Čebyševových bodů. Jejich počet nastaví Chebfun automaticky sám, aby přesnost aproximace byla zhruba na 15 platných cifer, tj. aby byla aproximovaná funkce a

[1]https://www.chebfun.org/

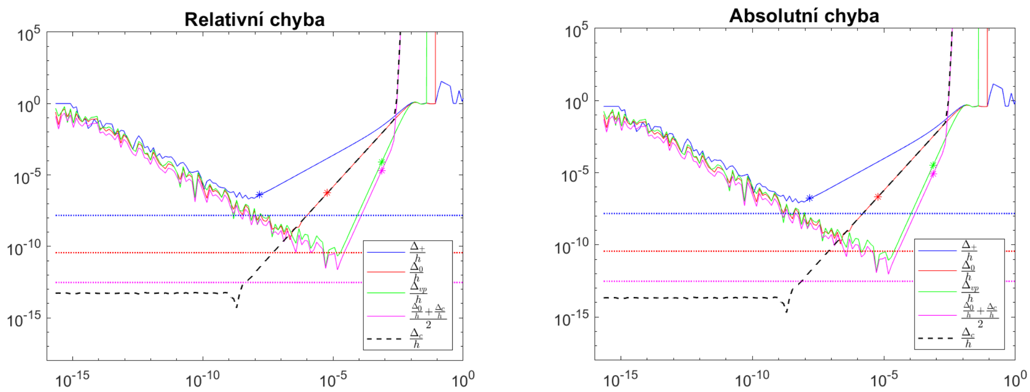
její Čebyševův interpolant z pohledu počítačové aritmetiky identické.

Chebfun je schopen stejnoměrně aproximovat funkce, které jsou lipschitzovsky spojité. Je vhodný obzvláště v případech, kdy chceme s derivací pracovat jako s funkcí a vyhodnocovat ji v mnoha bodech. Chebfun také umožňuje konstrukci komplikovaných příkladů, což teď předvedeme.

Pro první příklad využijeme funkci z Chebfun knihovny funkcí, konkrétně uvažujme f = cheb.gallery('seismograph'). Jedná se o polynom stupně 4971, chebfun z funkce $\tanh(20\sin(12x)) + 0.02\exp(3x)\sin(300x)$ na intervalu $[-1{,}1]$.



Obrázek 2.7: Funkce $f(x)$ a její derivace.



Obrázek 2.8: $f(x)$ v bodě $x = -0.9$.

Pro velké hodnoty h máme narozdíl od minulých příkladů velmi velkou relativní i absolutní chybu, pro malá h již dostáváme dobré aproximace. Relativní chyba pro $\frac{\Delta_c}{h}$ pro malá h již není na úrovni strojové přesnosti, je o dva řády nad ní.

Zajímavým a komplikovaným příkladem je konstrukce aproximace Weierstrassovy funkce definované vztahem

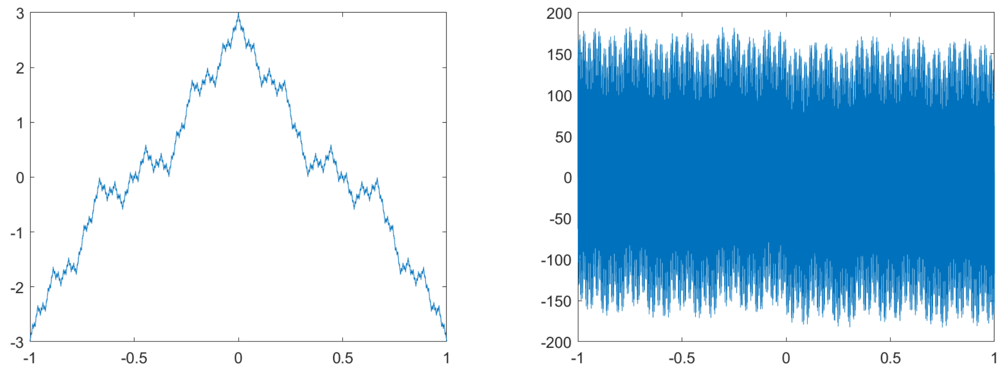
$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a^k \cos(b^k \pi x). \tag{2.3}$$

Weierstrassova funkce je spojitá, není nikde diferencovatelná a není lipschitzovsky spojitá. Jde o trochu extrémní případ, derivace neexistují a nemá je tedy smysl počítat. Nicméně tento příklad může demonstrovat možnosti a hranice použití numerických metod. Weierstrass uvažoval kladné parametry a,b splňující předpoklady: $ab > 1 + \frac{3}{2}\pi$, $0 < a < 1$ a b je liché přirozené číslo. Pro podrobnější analýzu a zobecnění předpokladů odkazujeme například na práci Hardyho [13], který uvažuje $ab \geq 1$.

Chebfun zvládá dobře aproximovat pouze prvních několik členů součtu, konkrétní počet závisí na volbě parametrů a,b. Budeme pracovat na intervalu $[-1,1]$ s polynomem

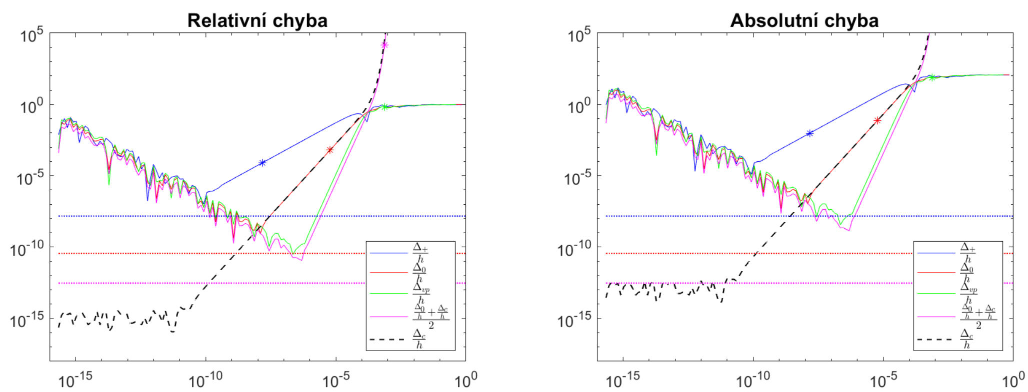
$$\text{chebfun}\left(\sum_{k=0}^{n} a^k \cos(b^k \pi x)\right), \tag{2.4}$$

což je chebfun ze součtu prvních $n+1$ členů (2.3). Označme $W_1(x)$ polynom (2.4) pro hodnoty parametrů $a = 0.5, b = 3$ a $n = 8$. Jedná se o polynom stupně 20864. Ukažme, jak daná funkce a její derivace vypadají.



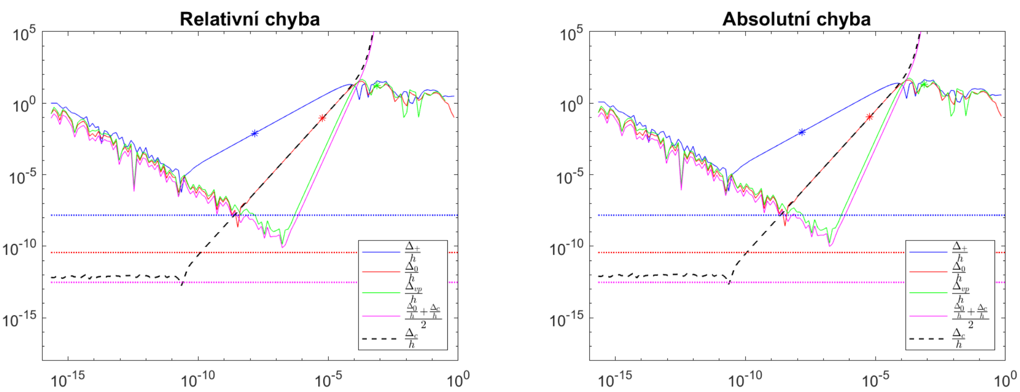
Obrázek 2.9: Funkce $W_1(x)$ a její derivace.

Zejména z grafu derivace vidíme, že funkce velmi osciluje. Podívejme se, jak jsou jednotlivé metody aproximace derivace pro funkci výše přesné.



Obrázek 2.10: $W_1(x)$ v bodě $x = 0.1$.

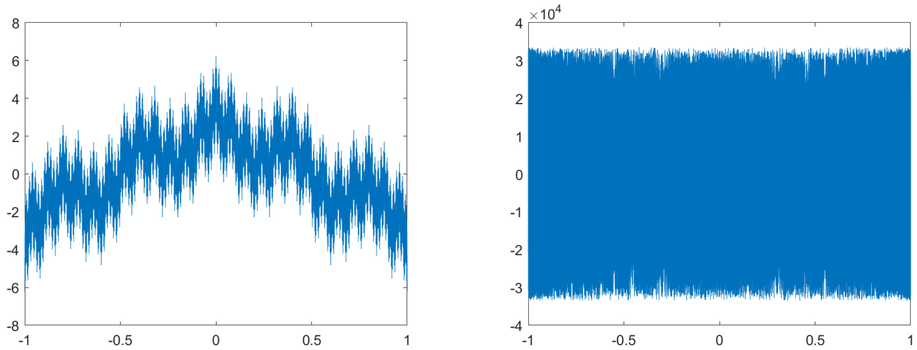
Z Obrázku 2.10 vidíme, že pro 3 metody využívající konečné diference je relativní i absolutní chyba velká pro velká h. Chyba začne klesat až pro přibližně $h < 10^{-4}$. Zejména pro metody využívající komplexní aritmetiky je chyba aproximace pro větší h enormně velká. Aproximace pro malá h jsou již pro všechny metody dobré. Můžeme si všimnout, že relativní chyba pro $\frac{\Delta_c}{h}$ je pro malá h nyní lehce nad strojovou přesností.



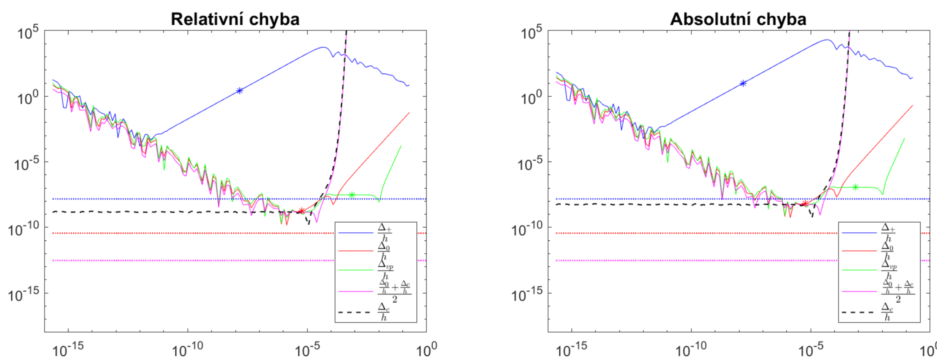
Obrázek 2.11: $W_1(x)$ v bodě $x = 0.2$.

V druhém Obrázku 2.11 se situace zhorší pro metodu využívající komplexní aritmetiku. Pro malé hodnoty h je tato aproximace stále nejpřesnější, relativní chyba je však nyní o tři řády větší než strojová přesnost.

Označme nyní $W_2(x)$ polynom (2.4) pro hodnoty parametrů $a = 0.9, b = 5$, $n = 6$, což je polynom stupně 49422.



Obrázek 2.12: Funkce $W_2(x)$ a její derivace.



Obrázek 2.13: $W_2(x)$ v bodě $x = 0.8$.

Funkce je pro danou volbu parametrů ještě mnohem složitější a oscilující než v (2.9). Pozorujeme, že aproximace pomocí $\frac{\Delta_+}{h}$ je celkem nepřesná. Relativní chyba pro metodu přes komplexní aritmetiku je nyní dost nad strojovou přesností, což způsobuje velká hodnota konstanty $C_{f,x+ih}$ v (1.26).

Můžeme očekávat, že budeme-li brát větší hodnoty parametrů (zejména parametru b) a větší počet členů v součtu (2.3), budou metody aproximovat derivaci $W(x)$ čím dál tím hůře.

2.3 Výpočetní náročnost

Kromě přesnosti aproximace nás také zajímá výpočetní náročnost. Ta se výrazněji projeví pokud: 1. budeme počítat derivaci ve vícero bodech, 2. daná funkce bude složitější, k jejímu vyhodnocení bude potřeba více operací. Výpočetní náročnost otestujeme na několika funkcích z minulých experimentů. Testovací body bereme náhodně z intervalu (0,1) příkazem rand. Počet testovacích bodů značíme n. Pro všechny body a metody uvažujeme $h = \sqrt{\varepsilon}$. Pro přehlednost v tabulce označme $g(x) = x(x-1)(x+5)^2(x-2)^9$. A ještě je tu Chebfun, který se pro situace, kdy chceme derivaci v mnoha bodech, obzvláště hodí, neboť nepočítá derivace pro dané body přes cyklus, ale počítá vektorově, tj. provede: $g = \text{diff}(f), der = g(x)$, kde x je vektor daných bodů a der je vektor aproximací derivace pro hodnoty x.

$n = 10000$	$\frac{\Delta_+}{h}$	$\frac{\Delta_0}{h}$	$\frac{\Delta_{vp}}{h}$	$\frac{\frac{\Delta_0}{h}+\frac{\Delta_c}{h}}{2}$	$\frac{\Delta_c}{h}$	Chebfun
$g(x)$	$0.0361s$	$0.0372s$	$0.0518s$	$0.0474s$	$0.0314s$	$0.0011s$
seismograph	$2.8443s$	$2.8456s$	$5.6239s$	$7.2753s$	$4.2949s$	$0.0219s$
$W_1(x)$	$4.0169s$	$4.0337s$	$8.0503s$	$17.884s$	$14.532s$	$0.0367s$
$W_2(x)$	$6.1227s$	$6.1076s$	$12.2064s$	$36.870s$	$30.439s$	$0.0759s$

Tabulka 2.1: Srovnání výpočetní náročnosti daných metod pro různé funkce.

Časy pro Chebfun uvádíme jen pro zajímavost, protože se hodí pro tento typ úlohy. Nicméně, co nás v tomto srovnání více zajímá, jsou ostatní metody vhodné pro aproximaci derivace funkce v jednom konkrétním bodě.

Obecně vidíme, že čím složitější funkce (t.j. čím více operací je potřeba k vyhodnocení funkce), tím jsou výpočetní náklady větší. Pro každou funkci je výpočetní náročnost aproximace derivace dopřednou či centrální diferencí totožná. To dává smysl, neboť v obou případech vyhodnocujeme funkci ve dvou bodech a provádíme jeden rozdíl a jeden podíl. U $\frac{\Delta_{vp}}{h}$ vyhodnocujeme funkci ve čtyřech bodech, tedy výpočetní náročnost je téměř dvojnásobná.

U metody výpočtu aproximace derivace pomocí komplexní aritmetiky $\frac{\Delta_c}{h}$ je situace zajímavější. Pro první jednoduchou funkci je daná metoda vyjma Chebfunu nejrychlejší. Hned u druhé složitější funkce je pomalejší než první dvě metody přes diference. Pro poslední funkci je téměř $6\times$ pomalejší než $\frac{\Delta_+}{h}$ a $\frac{\Delta_0}{h}$, a $2.5\times$ pomalejší než $\frac{\Delta_{vp}}{h}$. Vidíme tedy, že složitost funkce se na výpočetních nákladech projeví významněji pro metodu přes komplexní aritmetiku. Intuitivně dává smysl, že průměrovací metoda je nejpomalejší, neboť kombinuje dvě jiné metody.

V případech, kdy potřebujeme spočíst derivaci v několika bodech a funkce je složitější, je potřeba zvážit, zda zvýšená přesnost stojí za dražší výpočet. Zároveň je zřejmé, že pokud potřebujeme derivaci vyhodnotit v mnoha bodech, pak je Chebfun významným kandidátem na nejlepší volbu.

Závěr

V práci jsme detailně popsali základní způsoby výpočtu aproximace derivace založené na konečných diferencích, zejména dopředné a centrální diferenci. Ukázali jsme, že nemůžeme volit příliš malý diskretizační krok h kvůli možnému znehodnocení aproximace způsobenému výpočty v počítačové aritmetice. Zároveň jsme odvodili vhodnou volbu h na základě minimalizace horního odhadu celkové chyby. Zmínili jsme také aproximace pomocí diferencí s vyšším řádem přesnosti, které využívají vyhodnocení funkce ve větším počtu bodů. Dále jsme zavedli alternativní způsob aproximace založený na vyhodnocení uvažované funkce v komplexních bodech z okolí daného reálného bodu. Pro tento způsob aproximace je nutné předpokládat, že funkce je na zmiňovaném okolí reálného bodu analytická. Při použití výpočtu aproximace derivace pomocí komplexní aritmetiky nedochází ke kancelaci, což jsme detailně ukázali. Explicitně jsme odvodili závislost mezi hodnotou derivace a její aproximaci. Představili jsme také jiné způsoby odvození dané metody, které umožňují další vhled do souvislosti mezi metodou využívající komplexní aritmetiku a metodou používající konečné diference.

Numerické experimenty potvrdily všechny teoretické poznatky. Kvalitu aproximace derivace jsme měřili pomocí relativní a absolutní chyby. Pro velmi komplikované funkce jsme ukázali hranice a možnosti uvažovaných metod. Numerické experimenty naznačují, že metoda používající komplexní aritmetiku je téměř vždy nejlepší volbou. Tam se pro složitější funkce projevil vliv $C_{f,x+ih}$ diskutované v (1.24). Pro malá h i pro nejkomplikovanější testovanou funkci, tj. chebfun aproximaci Weierstrassovy funkce $W_2(x)$, jsme dosáhli relativní chyby 10^{-8}, což je stále dobrý výsledek. Jak jsme diskutovali, lze uvažovat i komplikovanější aproximace Weierstrassovy funkce, pro které i metoda přes komplexní aritmetiku bude dávat výsledek s velkou celkovou chybou. Výpočetní náklady metod jsou pro jednoduché funkce srovnatelné. Ukázali jsme však, že čím složitější funkce a více bodů ve kterých potřebujeme vyhodnotit derivaci, tím výraznější je rozdíl mezi výpočetními náklady metody používající komplexní aritmetiku a ostatními metodami.

Poznamenejme, že metody aproximace derivace využívající komplexní aritmetiky lze zobecnit i na aproximaci derivace funkcí matice, viz článek [14]. Další zajímavou aplikací by mohly být optimalizační problémy, kde by nám aproximace derivace pomocí komplexní aritmetiky mohla umožnit více se přiblížit k minimizéru dané funkce. Nesmíme však zapomínat, že k využití dané metody aproximace derivace jsou potřeba dva předpoklady: 1. funkce musí být analytická na okolí daného bodu, 2. danou funkci reálné proměnné musíme být schopni vyhodnotit v komplexním bodě. Obzvláště druhý požadavek nemusí být splněn, protože minimalizované funkce jsou často dány pouze implicitně.

Seznam použité literatury

[1] Walter Rudin. *Principles of mathematical analysis.* International Series in Pure and Applied Mathematics. McGraw-Hill Book Co., New York-Auckland-Düsseldorf, third edition, 1976.

[2] Nicholas J. Higham. *Accuracy and stability of numerical algorithms.* Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, second edition, 2002.

[3] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. *Numerical optimization.* Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, New York, second edition, 2006.

[4] Alfio Quarteroni, Riccardo Sacco, and Fausto Saleri. *Numerical mathematics*, volume 37 of *Texts in Applied Mathematics.* Springer-Verlag, Berlin, second edition, 2007.

[5] Bengt Fornberg. Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids. *Math. Comp.*, 51(184):699–706, 1988.

[6] Theodore W. Gamelin. *Complex analysis.* Undergraduate Texts in Mathematics. Springer-Verlag, New York, 2001.

[7] William Squire and George Trapp. Using complex variables to estimate derivatives of real functions. *SIAM Rev.*, 40(1):110–112, 1998.

[8] Joaquim R. R. A. Martins, Peter Sturdza, and Juan J. Alonso. The complex-step derivative approximation. *ACM Trans. Math. Software*, 29(3):245–262, 2003.

[9] Harris P.M. Cox M.G. Numerical analysis for algorithm design in metrology. Software Support for Metrology Best Practice Guide 11, National Physical Laboratory, Teddington, 2004.

[10] J. N. Lyness and C. B. Moler. Numerical differentiation of analytic functions. *SIAM J. Numer. Anal.*, 4:202–210, 1967.

[11] Walter Rudin. *Real and complex analysis.* McGraw-Hill Book Co., New York-Toronto-London, 1966.

[12] Lloyd N. Trefethen. *Approximation theory and approximation practice.* Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2013.

[13] G. H. Hardy. Weierstrass's non-differentiable function. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 17(3):301–325, 1916.

[14] Awad H. Al-Mohy and Nicholas J. Higham. The complex step approximation to the Fréchet derivative of a matrix function. *Numer. Algorithms*, 53(1):113–148, 2010.