Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Numerický výpočet derivace

Řešíme následující úlohu:

- differencovatelnou funkci $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ známe jen v konečném počtu bodů $x_0, x_1, \ldots, x_n$
- chceme napočítat její derivaci v některém z bodů $x_0, x_1, \ldots, x_n$, ale třeba i jinde
- numerický výpočet derivace se hodí např. při
    - výpočtu Newtonovy metody
    - při řešení obyčejných diferenciálních rovnic
    - při řešení parciálních diferenciálních rovnic

Numerický výpočet derivace

- s výhodou můžeme využít aproximaci f pomocí Lagrangeova polynomu $L_n(x)$
- ze vztahu

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x),$$

snadno dostáváme

$$f^{(k)}(x) = L_n^{(k)}(x) + R_n^{(k)}(x)$$

- potřebujeme tedy akorát vyjádřit $L_n^{(k)}(x)$ a $R_n^{(k)}(x)$

Numerický výpočet derivace

Lemma 1

Pro derivací bazického Lagrangeova polynomu $l_j(x)$ platí

$$l_j'(x) = \sum_{i \neq j} \frac{1}{x - x_i} \prod_{k \neq j} \frac{x - x_k}{x_j - x_k}.$$

Remark 2

Platí tedy

$$L_n'(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j'(x).$$

Bohužel, obecné odvození vyšších derivací je obtížné.

Numerický výpočet derivace

Theorem 3

Buď $I_x \subset D_f$ nejmenší interval takový, že $x, x_0, x_1, \ldots, x_n \in I_x$ a f má na I_x derivaci řádu $k+n+1$. Buď L_n Lagrangeův interpolační polynom příslušný k funkci f a bodům $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Pak existuje $\xi(x) \in I_x$ takové, že

$$\begin{aligned} f^{(k)}(x) - L_n^{(k)}(x) &= R_n^{(k)}(x) \\ &= \frac{\sum_{i=0}^{k} \binom{k}{i} \left(f^{(n+1)}(\xi(x))\right)^{(k-i)} \omega_n^{(i)}(x)}{(n+1)!}. \end{aligned}$$

Numerický výpočet derivace

Lemma 4

$$\omega_n^{(k)}(x) = \sum_{i_1=0}^{n} \sum_{\substack{i_2=0 \\ i_2 \neq i_1}}^{n} \cdots \sum_{\substack{i_k=0 \\ i_k \neq i_1,\ldots,i_k \neq i_{k-1}}}^{n} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i_1,\ldots,j \neq i_k}}^{n} (x - x_j).$$

Remark 5

Z výrazu pro $\omega_n'(x)$ je vidět, že obecně neexistuje $i = 0, 1, \ldots, n$, aby

$$\lim_{x \to x_i} \omega_n'(x) = 0.$$

Numerický výpočet derivace

- Lagrangeova interpolace nám tedy neumožňuje získat derivaci fce. v daném bodě s libovolnou přesností
- důvod je ten, že derivace $f'(x)$ je určena nekonečně malým okolím bodu x, ale body $x_0, x_1, \ldots, x_n$ nejsou nekonečně blízko x
- **bude nás zajímat, co se stane, když budeme zmenšovat rozestupy mezi body**

Numerický výpočet derivace

Remark 6

Mějme bod $x_0 \in \mathbb{R}$ *a chceme napočítat derivaci* $f'(x_0)$. *Zvolme:*

- *parametr* $h \in \mathbb{R}$, $h > 0$
- *body* $x_i = x_0 + ih$ *pro* $i = -m_1, \ldots, m_2$
- *označme* $n = m_1 + m_2$
- *označme* $f_i = f(x_i)$

Pak lze konstruovat Lagrangeův polynom

$$L_n(x) = \sum_{i=-m_1}^{m_2} f_i l_i(x),$$

kde

$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=-m_1 \\ j \neq i}}^{m_2} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Numerický výpočet derivace

- libovolné $x \in < x_{-m_1}, x_{m_2} >$ lze zapsat jako

$$x = x_0 + th,$$

kde

$$t \in < -m_1, m_2 >,$$

- a tedy

$$L_n(t) = L_n(x) \mid_{x_0+th} = \sum_{i=-m_1}^{m_2} f_i l_i(t),$$

pro

$$l_i(t) = \prod_{\substack{j=-m_1 \\ j \neq i}}^{m_2} \frac{t-j}{i-j}.$$

Numerický výpočet derivace

- dále zavedeme značení

$$
\begin{aligned}
f(t) &= f(x)\,|_{x_0+th}, \\
R_n(t) &= R_n(x)\,|_{x_0+th}, \\
\omega_n(t) &= \omega_n(x)\,|_{x_0+th} \\
&= h^{n+1}\,(t-(-m_1))\,(t-(-m_1+1))\dots(t-m_2)
\end{aligned}
$$

- pro derivaci $\omega_n^{(k)}(t)$ pak platí

$$
\omega_n^{(k)}(t) = h^{n+1} \sum_{i_1=-m_1}^{m_2} \sum_{\substack{i_2=-m_1 \\ i_2\neq i_1}}^{m_2} \dots \sum_{\substack{i_k=-m_1 \\ i_k\neq i_1,\dots,i_k\neq i_{k-1}}}^{m_2} \prod_{\substack{j=-m_1 \\ j\neq i_1,\dots,j\neq i_k}}^{m_2} (t-j).
$$

Numerický výpočet derivace

Theorem 7

Buď $I_x \subset D_f$ nejmenší interval takový, že $x, x_{-m_1}, \ldots, x_{m_2} \in I_x$ a f má na I_x derivaci řádu $k+n+1$. Buď L_n Lagrangeův interpolační polynom příslušný k funkci f a bodům $x_{-m_1}, \ldots, x_{m_2}$. Pak existuje $\xi(t) \in I_x$ takové, že

$$\begin{aligned} R_n^{(k)}(t) &= f^{(k)}(t) - L_n^{(k)}(t) \\ &= \frac{\sum_{i=0}^{k} \binom{k}{i} \left(f^{(n+1)}(\xi(t))\right)^{(k-i)} \omega_n^{(i)}(t)}{(n+1)!}. \end{aligned}$$

kde

$$\omega_n^{(i)}(t) = h^{n+1} \sum_{i_1=-m_1}^{m_2} \sum_{\substack{i_2=-m_1 \\ i_2 \neq i_1}}^{m_2} \cdots \sum_{\substack{i_i=-m_1 \\ i_i \neq i_1, \ldots, i_i \neq i_{i-1}}}^{m_2} \prod_{\substack{j=-m_1 \\ j \neq i_1, \ldots, j \neq i_k}}^{m_2} (t-j).$$

Tj. pokud h zmenšujeme k nule, klesá chyba aproximace $f^{(k)}(x_0)$ s řádem $n+1$.

Konečné diference

Remark 8

Symbolem $O(h^r)$ budeme rozumět výraz, který klesá k nule s r-tou mocninou při $h \to 0$.

Theorem 9

Buď $f \in C^2(x_0, x_1)$, pak pro **dopřednou** *konečnou diferenci platí*

$$\frac{f_1 - f_0}{h} = f'(x_0) + O(h),$$

tj. jde o aproximaci první derivace s přesností prvního řádu.

Remark 10

Při použití Lagrangeova polynomu:

- *derivace:* $k = 1$
- *řád aproximace:* $1 = n + 1 \Rightarrow n = 0$
- *hladkost f:* $f \in C^{(n+1+k)} \equiv C^{(2)}$

Konečné diference

Theorem 11

Buď $f \in C^2(x_{-1}, x_0)$, pak pro **zpětnou** *konečnou diferenci platí*

$$\frac{f_0 - f_{-1}}{h} = f'(x_0) + O(h),$$

tj. jde o aproximaci první derivace s přesností prvního řádu.

Remark 12

Při použití Lagrangeova polynomu:

- *derivace:* $k = 1$
- *řád aproximace:* $1 = n + 1 \Rightarrow n = 0$
- *hladkost* f*:* $f \in C^{(n+1+k)} \equiv C^{(2)}$

Konečné diference

Theorem 13

Buď $f \in C^3(x_{-1}, x_1)$, pak pro **centrální** *konečnou diferenci platí*

$$\frac{f_1 - f_{-1}}{2h} = f'(x_0) + O(h^2),$$

tj. jde o aproximaci první derivace s přesností druhého řádu.

Remark 14

Při použití Lagrangeova polynomu:

- *derivace:* $k = 1$
- *řád aproximace:* $2 = n + 1 \Rightarrow n = 1$
- *hladkost f:* $f \in C^{(n+1+k)} \equiv C^{(3)}$

Konečné diference

Theorem 15

Buď $f \in C^4(x_{-1}, x_1)$, pak platí

$$\frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} = f''(x_0) + O(h^2),$$

tj. jde o aproximaci druhé derivace s přesností druhého řádu.

Remark 16

Při použití Lagrangeova polynomu:

- *derivace:* $k = 2$
- *řád aproximace:* $2 = n + 1 \Rightarrow n = 1$
- *hladkost f:* $f \in C^{(n+1+k)} \equiv f^{(4)}$

Konečné diference

Example 17

Odvoďte konečnou diferenci pro náhradu druhé derivace s přesností druhého řádu.

Remark 18

Následující věta vlastně říká to same, co věta 7 o chybě aproximace derivace s použitím Lagrangeova polynomu. Tentokrát ale důkaz provedeme pomocí Taylorova polynomu, což lépe odhaluje podstatu aproximace derivací obecněji, ne pouze pro reálné funkce.

Theorem 19

Buď $f \in C^{(n+1)}(x_0, x_n)$, pak existuje konečná diference pro náhradu k-té derivace s přesností řádu $n + 1 - k$ pro $k = 1, \ldots, n$.

Konečné diference

Důkaz.

Rozepíšeme si celkem n Taylorových rozvojů v bodech $-m_1$ až m_2 (vynecháme index 0)

$$
\begin{array}{rcccccc}
f_{-m_1} & = & f_0+ & c_{11}hf_0^{(1)}+ & \dots c_{1k}h^k f_0^{(k)0} & \dots c_{1n}h^n f_0^{(n)}+ & d_1 h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi_1) \\
f_{-m_1+1} & = & f_0+ & c_{21}hf_0^{(1)}+ & \dots c_{2k}h^k f_0^{(k)} & \dots c_{2n}h^n f_0^{(n)}+ & d_2 h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi_2) \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \\
f_{m_2} & = & f_0+ & c_{n1}hf_0^{(1)}+ & \dots c_{nk}h^k f_0^{(k)} & \dots c_{nn}h^n f_0^{(n)}+ & d_n h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi_n) \\
\hline
 & & * & 0hf_0^{(1)} & \dots 1h^k f_0^{(k)} & \dots 0h^n f_0^{(n)} & *
\end{array}
$$

Poslední řádek určuje, kterou derivaci chceme aproximovat, pokud každý rozvoj vynásobíme koeficientem α_i a vyscítáme. Koeficienty α_i pak musí být řešením soustavy:

$$
\begin{pmatrix}
c_{11} & c_{21} & \dots & c_{n1} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
c_{1k} & c_{2k} & \dots & c_{nk} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
c_{1n} & c_{2n} & \dots & c_{nn}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_k \\ \vdots \\ \alpha_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0
\end{pmatrix}
$$

□

Podělením h^k pak u posledního nenulového členu dostáváme h^{n+1-k}.

Numerický výpočet integrálu

Mějme integrabilní funkci $f :< a, b >\to \mathbb{R}$. Bude nás zajímat aproximace

$$I(f) \equiv \int_a^b f(x)dx.$$

Numerické vztahy pro aproximaci $I(f)$ se nazývají:

- vzroce pro numerickou integraci – *numerical integration formulae*
- kvadraturní vzorce – *quadrature formulae*

Nejčastěji aproximujeme funkci f funkcí f_n, pro kterou lze intergál spočítat přesně a snadno. Opět je možné využít Lagrangeovu interpolaci.

Chyba numerické integrace

Bude nás zajímat chyba

$$R_n(f) = I(f) - I_n(n) = I(f) - I(f_n),$$

kde jsme použili značení $I_n(f) := I(f_n)$.
Pro odvození řádu aproximace zavedeme značení $h := b - a$.

Obdélníková formule

Theorem 20

Buď $f \in C^{(2)}(a,b)$ a $x_0 = \frac{a+b}{2}$, pak obdélníková formule

$$I_0(f) = hf(x_0),$$

je aproximace $I(f)$ s přesností třetího řádu.

Lichoběžníková formule

Theorem 21

Buď $f \in C^{(2)}(a,b), x_0 = a$ a $x_1 = b$, pak obdélníková formule

$$I_1(f) = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right],$$

je aproximace $I(f)$ s přesností třetího řádu.

Cavalieriho-Simpsonova formule

Theorem 22

Buď $f \in C^{(4)}(a,b), x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}$ *a* $x_2 = b$*, pak obdélníková formule*

$$I_2(f) = \frac{h}{6}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right],$$

je aproximace $I(f)$ *s přesností pátého řádu.*