Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

Numerický výpočet derivace pomocí Taylorova polynomu

Shrnutí

Tomáš Oberhuber

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

Video na Youtube

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

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

- 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 $R_n^{(k)}(x)$

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

Lemma 1

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

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

Důkaz.

Video na Youtube □

Remark 2

Platí tedy

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

Obecné odvození vyšších derivací je technicky pracné.

D.h.

$$l_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{x-x_i}{x_j-x_i}$$

$$\ln l_j(x) = \sum_{\substack{i=0 \\ i\neq j}}^{n} \ln\left(\frac{x-x_i}{x_j-x_i}\right)$$

$$\ln' l_j(x) = \frac{1}{l_j(x)} l_j'(x)$$

$$\ln' l_j(x) = \sum_{\substack{i=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{x_j-x_i}{x-x_i} \frac{1}{x_j-x_i} = \sum_{\substack{i=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{1}{x-x_i}$$

$$= \frac{l_j'(x)}{l_j(x)}$$

$$\Rightarrow l_j'(x) = l_j(x) \cdot \sum_{\substack{i=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{1}{x-x_i} =$$

$$= \sum_{\substack{i=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{1}{x-x_i} \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \frac{x-x_k}{x_j-x_k}$$

$\square$

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

Lemma 3

Pro funkce $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ obě n-krát diferencovatelné platí

$$(fg)^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} f^{(k)} g^{(n-k)}.$$

Důkaz.

Video na Youtube

$\square$

Dk.:

$$(fg)^{(0)} = f^{(0)} g^{(0)} \qquad (f+g)^0 = f^0 g^0$$

$$(fg)^{(1)} = \underline{f' g^{(0)}} + f^{(0)} g' \qquad (f+g)^1 = f^1 g^0 + f^0 g^1$$

$$(fg)^{(2)} = f'' + f'g' + f'g' + g'' = (f+g)^2 = f^2 + 2fg + g^2$$

$$= f'' + 2f'g' + g''$$

INDUKCI: $n \to n+1$

$$(fg)^{(n)} = \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} f^{(i)} g^{(n-i)}$$

$$(fg)^{(n+1)} = \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} \left(\underline{f^{(i+1)} g^{(n-i)}} + \underline{f^{(i)} g^{(n-i+1)}} \right) =$$

$$= f^{(n+1)} g^{(0)} + \underline{\sum_{i=0}^{n-1} \binom{n}{i}} f^{(i+1)} g^{(n-i)} + f^{(0)} g^{(n+1)}$$

$(i-1+1)$ $\quad$ $n-i+1$

-1

$$+ \sum_{i=1}^{n} \binom{n}{i} f^{(i)} g^{(n-i+1)} = \sum_{i=1}^{n} \binom{n}{i-1} f^{(i)} g^{(n+1-i)}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \underline{\binom{n}{i-1}} f^{(i)} g^{(n+1-i)} + \sum_{i=1}^{n} \underline{\binom{n}{i}} f^{(i)} g^{(n+1-i)}$$

$$+ f^{(n+1)} g^{(0)} + f^{(0)} g^{(n+1)} =$$

$$f^{(0)} g^{(n+1)} + \sum_{i=1}^{n} \binom{n+1}{i} f^{(i)} g^{(n+1-i)} + f^{(n+1)} g^{(0)} =$$

$$= \sum_{i=0}^{n+1} \binom{n+1}{i} f^{(i)} g^{(n+1-i)}$$

$\square$

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

Theorem 4

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

$i=0 \Rightarrow f^{(n+1+k)}$

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

$$R_n^{(k)}(x) = \frac{1}{(n+1)!}\left[\underbrace{f^{(n+1)}(\xi(x))}_{F(x)} \underbrace{\omega_n(x)}_{G(x)}\right]^{(k)} = \frac{1}{(n+1)!}\sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i} F^{(k-i)}(x)\, G^{(i)}(x)$$

Důkaz.

Plyne přímo z předhozího lematu. □

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

Lemma 5

$n-1-k$

$h(t-j)$

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

$\omega_1(x) = (x-x_0)(x-x_1) \Rightarrow \omega_1'(x) = (x-x_1) + (x-x_0) \Rightarrow$

$\omega_1'(x) \neq 0$ PRO $x \in \{x_0, x_1\}$

Důkaz.

Video na Youtube

□

Remark 6

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

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

Dk.:

$$\omega_n(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

$$\omega_2(x) = (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$$

$$\omega_2'(x) \overset{j_1}{=} \overset{0}{(x-x_1)(x-x_2)} + \overset{1}{(x-x_0)(x-x_2)} + \overset{2}{(x-x_0)(x-x_1)}$$

$$(j_1, j_2) \quad (0,2) \quad (0,1) \quad (1,2) \quad (1,0) \quad (2,1) \quad (2,0)$$

$$\omega_2''(x) = (x-x_1) + (x-x_2) + (x-x_0) + (x-x_2) + (x-x_0) + (x-x_1)$$

$$\omega_n'(x) = \sum_{j_1=0}^{n} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq j_1}}^{n}$$

$$\omega_n''(x) = \sum_{j_1=0}^{n} \sum_{\substack{j_2=0 \\ j_2 \neq j_1}}^{n} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq j_1,\, j \neq j_2}}^{n} (x - x_j)$$

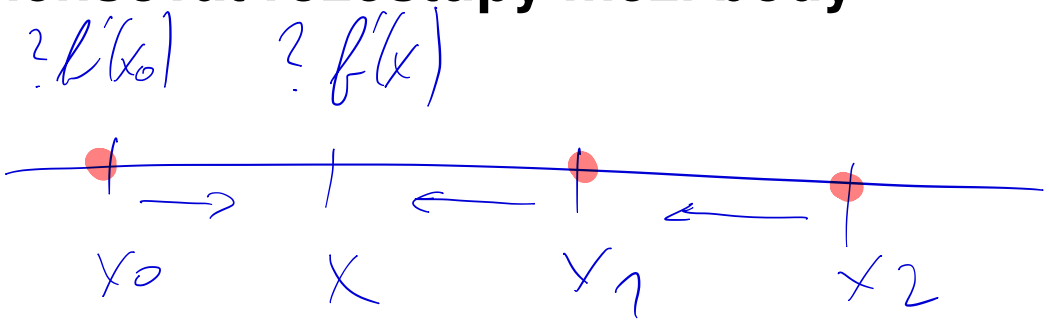
$$\omega_n'''(x) = \sum_{j_1=0}^{n} \sum_{\substack{j_2=0 \\ j_2 \neq j_1}}^{n} \sum_{\substack{j_3=0 \\ j_3 \neq j_2 \\ j_3 \neq j_1}}^{n} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq j_1 \\ j \neq j_2 \\ j \neq j_3}}^{n} (x - x_j)$$

$\square$

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

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

- 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**

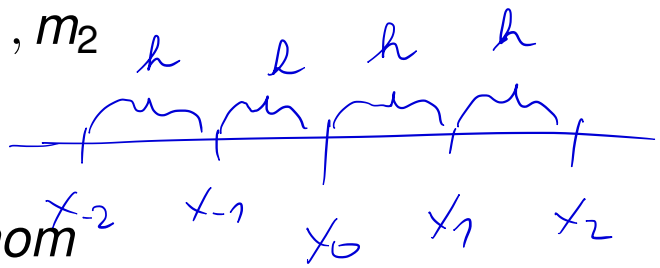


Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

Remark 7

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

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

? $h \to 0$?

kde

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

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

- 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

$$\frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \frac{\cancel{x_0} + th - \cancel{x_0} - jh}{\cancel{x_0} + ih - \cancel{x_0} - jh} = \frac{t-j}{i-j}$$

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

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

- dále zavedeme značení

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

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

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

$h \to 0 \Rightarrow \omega_n^{(k)}(t) \to 0$

Výpočet derivace pomocí Lagrangeova polynomu

Theorem 8

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

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

$f^{(k)}(x) \approx h^{n+1-k}$

kde

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

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

Landauova notace

Definition 9

Landauova notace: Symbolem $O(h^r)$ budeme značit třídu všech funkcí $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ takových, že platí

$$\lim_{x \to 0} \frac{f(x)}{x^r} = C,$$

kde $C \in \mathbb{R}$ je nenulová konstanta.

Remark 10

Místo $f \in O(h^r)$ se často používá i značení $f = O(h^r)$.

$f \simeq x^r$ BUĎTO O

$R^{(k)}_{n,x_0} = R^{(k)}_n(x_0)$; $R^{(k)}_{n,x_0}(h) = O(h^{n+1-k})$

Konečné diference

- pro aproximaci derivace v některém z uzlů $x_0, x_1, \ldots, x_n$ se používají tzv. **konečné diference**
- konečné diference se liší podle:
  - řádu derivace k, kterou aproximují
  - řádu přesnosti aproximace r
  - konfigurace uzlů, které využívají

$O(h^r)$

- ukážeme si některé základní konečné diference
- využívají se např. v *metodě konečných diferencí* pro řešení parciálních diferenciálních rovnic
- nejprve provedeme odvození pomocí Lagrangeova polynomu a následně pomocí Taylorova

Dopředná diference pro 1. derivaci

Theorem 11

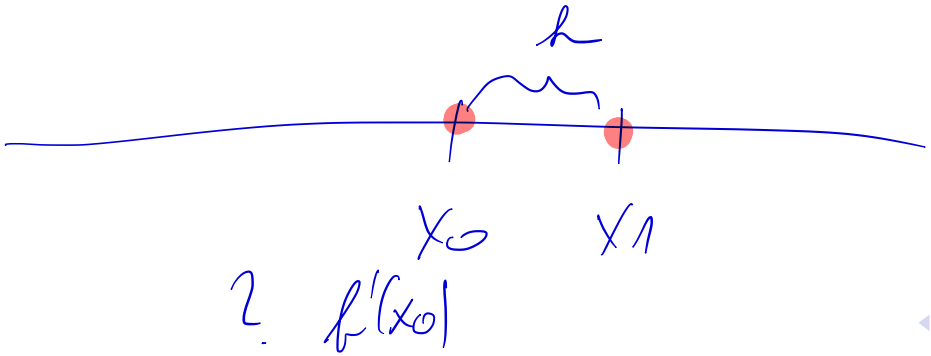
Nechť $f \in C^3\langle x_0, x_1\rangle$, kde $h = x_1 - x_0$. Pak platí, že

$$\left|\frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - f'(x_0)\right| = O(h),$$

tj. tzv. ***dopředná konečná diference*** *tvaru*

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{h},$$

aproximuje také první derivaci s přesností prvního řádu.



Dopředná diference pro 1. derivaci

$L_1(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0)$

Důkaz.

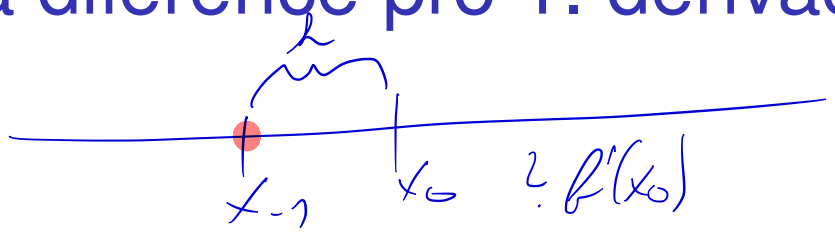
- využijeme Lagrangeův polynom v Newtonově tvaru a jeho derivaci

$$
\begin{aligned}
\cancel{L_1(x)}\ f(x) &= \overbrace{f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0)}^{L_1(x)} + \underbrace{\frac{f''\xi(x))}{2}(x - x_0)(x - x_1)}_{R_1(x)}, \\
\cancel{L_1'(x)}\ f'(x) &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} + \frac{[f''(\xi(x)]'}{2}(x - x_0)(x - x_1) + \\
&\quad \frac{f''(\xi(x))}{2}((x - x_1) + (x - x_0)), \\
\underbrace{\cancel{L_1'(x_0)}}_{=f'(x_0)} &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\underbrace{x_1 - x_0}_{=h}} + \frac{f''(\xi(x))}{2}\underbrace{(x_0 - x_1)}_{-h}, \\
f'(x_0) &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(\xi(x))}{2}h
\end{aligned}
$$

- a tedy platí

$$
\left| \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \right| = \left| \frac{f''(\xi(x))}{2}h \right| = O(h).
$$

Zpětná diference pro 1. derivaci



Theorem 12

Nechť $f \in C^3\langle x_{-1}, x_0\rangle$, kde $h = x_0 - x_{-1}$. Pak platí, že

$$\left|\frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h} - f'(x_0)\right| = O(h),$$

tj. tzv. ***zpětná konečná diference*** *tvaru*

$$\frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h},$$

aproximuje první derivaci s přesností prvního řádu.

Důkaz. $f(x) = f(x_{-1}) + f[x_{-1}, x_0](x - x_{-1}) + \frac{1}{2} f''(\xi(x))(x - x_{-1})(x - x_0)$

Lze ukázat podobně jako předchozí větu. □

Centrální diference pro 1. derivaci

Theorem 13

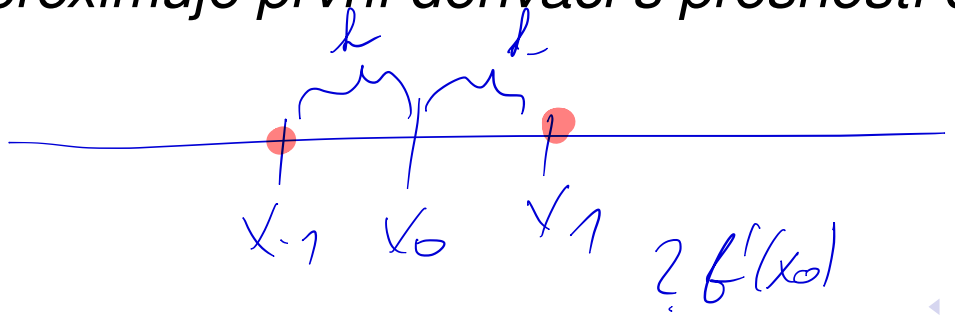
Nechť $f \in C^4\langle x_{-1}, x_1\rangle$, kde uzly x_{-1}, x_0 a x_1 jsou rozloženy ekvidistantně se vzdáleností sousedních uzlů rovnou h. Pak platí, že

$$\left|\frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h} - f'(x_0)\right| = O(h^2),$$

tj. tzv. ***centrální konečná diference*** *tvaru*

$$\frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h},$$

aproximuje první derivaci s přesností druhého řádu.



Centrální diference pro 1. derivaci

Důkaz.

- nyní konstruujeme Lagrangeův polynom 2. stupně, opět v Newtonově tvaru

$$
\begin{aligned}
f \quad \cancel{L_2}(x) &= \underbrace{f(x_{-1}) + f[x_{-1}, x_0](x - x_{-1}) + f[x_{-1}, x_0, x_1](x - x_{-1})(x - x_0)}_{L_2(x)} + \\
&\quad \underbrace{\frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}(x - x_{-1})(x - x_0)(x - x_1)}_{R_2(x)}.
\end{aligned}
$$

$f \in C^3(\ldots)$

$\frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}$

- jeho derivace má tvar

$$
\begin{aligned}
\cancel{L_2'(x)}\ f'(x) &= f[x_{-1}, x_0] + \\
&f[x_{-1}, x_0, x_1]\,[(x - x_0) + (x - x_{-1})] + \\
&\frac{[f^{(3)}(\xi(x))]'}{3!}(x - x_{-1})(x - x_0)(x - x_1) + \\
&\frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}\,[(x - x_0)(x - x_1) + (x - x_{-1})(x - x_1) + (x - x_{-1})(x - x_0)]
\end{aligned}
$$

$\square$

Centrální diference pro 1. derivaci

- dále dostáváme

$$
\begin{aligned}
\cancel{L_2'(x_0)} &= f[x_{-1},x_0] + f[x_{-1},x_0,x_1]\underbrace{(x_0-x_{-1})}_{h} + \\
&\quad \frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}\left[\underbrace{(x_0-x_{-1})}_{h}\underbrace{(x_0-x_1)}_{h}\right] \\
&= \frac{f(x_0)-f(x_{-1})}{h} + h\frac{f[x_0,x_1]-f[x_{-1},x_0]}{2h} + \frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}h^2 \\
&= \frac{f(x_0)-f(x_{-1})}{h} + \frac{1}{2}\left(\frac{f_1-f_0}{h} - \frac{f_0-f_{-1}}{h}\right) + \frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}h^2 \\
f'(x_0) &= \frac{f(x_1)-f(x_{-1})}{2h} + \frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}h^2
\end{aligned}
$$

$f(x_0)$

$$\frac{f[x_0,x_1]-f[x_{-1},x_0]}{\underbrace{x_1-x_{-1}}_{2h}}$$

$f_0 = f(x_0)$
$f_1 = f(x_1)$
$f_{-1} = f(x_{-1})$

- a tedy

$$\left|\frac{f(x_1)-f(x_{-1})}{2h} - f'(x_0)\right| = \left|\frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}h^2\right| = O(h^2).$$

Numerický výpočet derivace pomocí Taylorova polynomu

Nyní si ukážeme, jak lze odvodit konečné diference z Taylorova polynomu:

- je to jednodušší
- **vystačíme si se slabšími předpoklady na funkci** f

Dopředná diference pro 1. derivaci

Theorem 14

Nechť $f \in C^2\langle x_0, x_1\rangle$, *kde* $h = x_1 - x_0$. *Pak platí, že*

$$\left| \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \right| = O(h),$$

tj. tzv. ***dopředná konečná diference*** *tvaru*

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{h},$$

aproximuje také ***první derivaci s přesností prvního řádu****.*

Dopředná diference pro 1. derivaci

Důkaz. $f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f''(\xi)(x - x_0)^2$

- sestrojíme Taylorův rozvoj v bodě x_0

$$f(x_1) = f(x_0) + f'(x_0)\underbrace{(x_1 - x_0)}_{h} + \underbrace{f''(\xi)\underbrace{(x_1 - x_0)^2}_{h^2}}_{\text{Lagrangeův tvar zbytku}}$$

pro $\xi \in \langle x_0, x_1 \rangle$

- to lze přepsat jako

$$f'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} + h f''(\xi)$$

$$f(x_1) = f(x_0) + hf'(x_0) + h^2 f''(\xi)$$

- a tedy

$$\left| \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \right| = \left| hf''(\xi) \right| = O(h).$$

Zpětná diference pro 1. derivaci

Theorem 15

Nechť $f \in C^2\langle x_{-1}, x_0\rangle$, *kde* $h = x_0 - x_{-1}$. *Pak platí, že*

$$\left| \frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h} - f'(x_0) \right| = O(h),$$

tj. tzv. ***zpětná konečná diference*** *tvaru*

$$\frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h},$$

aproximuje také ***první derivaci s přesností prvního řádu****.*

Zpětná diference pro 1. derivaci

Důkaz.

- sestrojíme Taylorův rozvoj v bodě x_0

$$f(x_{-1}) = f(x_0) + f'(x_0)\underbrace{(x_{-1} - x_0)}_{-h} + \underbrace{f''(\xi)\underbrace{(x_{-1} - x_0)^2}_{h^2}}_{\text{Lagrangeův tvar zbytku}}$$

pro $\xi \in \langle x_{-1}, x_0 \rangle$

- to lze přepsat jako

$$f(x_{-1}) = f(x_0) - hf'(x_0) + h^2 f''(\xi)$$

- a tedy $hf'(x_0) = f(x_0) - f(x_{-1}) + h^2 f''(\xi)$

$$\left| \frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h} - f'(x_0) \right| = \left| hf''(\xi) \right| = O(h).$$

Centrální konečná diference pro 1.derivaci

Theorem 16

Nechť $f \in C^3\langle x_{-1}, x_1\rangle$, kde uzly x_{-1}, x_0 a x_1 jsou rozloženy ekvidistantně se vzdáleností sousedních uzlů rovnou h. Pak platí, že

$$\left|\frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h} - f'(x_0)\right| = O(h^2),$$

tj. tzv. ***centrální konečná diference*** *tvaru*

$$\frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h},$$

aproximuje ***první derivaci s přesností druhého řádu****.*

Centrální konečná diference pro 1.derivaci

$\xi \in (x, x_0)$

Důkaz. $f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi)(x - x_0)^3$

- nyní použijeme Taylorovy rozvoje v bodě x_0 pro vyčíslení $f(x_{-1})$ a $f(x_1)$

$$
\begin{aligned}
f(x_1) &= f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x_1 - x_0)^2 + \\
&\quad \frac{f^{(3)}(\xi_1)}{3!}(x_1 - x_0)^3, \\
f(x_{-1}) &= f(x_0) + f'(x_0)(x_{-1} - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x_{-1} - x_0)^2 + \\
&\quad \frac{f^{(3)}(\xi_2)}{3!}(x_{-1} - x_0)^3,
\end{aligned}
$$

pro $\xi_1 \in \langle x_{-1}, x_0 \rangle, \xi_2 \in \langle x_0, x_1 \rangle$.

$\square$

Centrální konečná diference pro 1.derivaci

- to lze přepsat jako

$$f(x_1) = f(x_0) + hf'(x_0) + h^2 f''(x_0) + h^3 f^{(3)}(\xi_1),$$
$$f(x_{-1}) = f(x_0) - hf'(x_0) + h^2 f''(x_0) - h^3 f^{(3)}(\xi_2),$$

- a odečtením obou rovnic dostáváme

$$f(x_1) - f(x_{-1}) = 2hf'(x_0) + \frac{h^3}{6}\left(f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2)\right),$$

- a tedy

$$\left|\frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h} - f'(x_0)\right| = \frac{h^2}{12}\left|f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2)\right| = O(h^2).$$

$f \in C^3\langle x_{-1}, x_1\rangle$

(Centrální) diference pro 2.derivaci

Theorem 17

Nechť $f \in C^3\langle x_{-1}, x_1\rangle$, kde uzly x_{-1}, x_0 a x_1 jsou rozloženy ekvidistantně se vzdáleností sousedních uzlů rovnou h. Pak platí, že

$$\left| \frac{f(x_{-1}) - 2f(x_0) + f(x_1)}{h^2} - f''(x_0) \right| = O(h),$$

tj. tzv. ***(centrální) konečná diference*** *tvaru*

$$\frac{f(x_{-1}) - 2f(x_0) + f(x_1)}{h^2},$$

aproximuje ***druhou derivaci s přesností prvního řádu****.*

(Centrální) diference pro 2.derivaci

$|\xi_2 - \xi_1| \leq 2h$

Důkaz.

- vyjdeme z již známých Taylorových rozvojů

$$f(x_1) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) + \frac{1}{6}h^3 f^{(3)}(\xi_1),$$

$$f(x_{-1}) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) - \frac{1}{6}h^3 f^{(3)}(\xi_2),$$

- kde $\xi_1 \in \langle x_{-1}, x_0 \rangle, \xi_2 \in \langle x_0, x_1 \rangle$
- nyní oba rozvoje sečteme

$$f(x_1)+f(x_{-1}) = 2f(x_0)+h^2 f''(x_0)+\frac{1}{6}h^3 \left(f^{(3)}(\xi_1) - f^{(3)}(\xi_2)\right)$$

- a tedy

$$\begin{aligned} \left|\frac{f(x_{-1}) - 2f(x_0) + f(x_1)}{h^2} - f''(x_0)\right| &= \frac{1}{6}h\left|f^{(3)}(\xi_1) - f^{(3)}(\xi_2)\right| \\ &= O(h). \end{aligned}$$

$\square$

(Centrální) diference pro 2.derivaci

Theorem 18

Nechť $f \in C^4\langle x_{-1}, x_1\rangle$, kde uzly x_{-1}, x_0 a x_1 jsou rozloženy ekvidistantně se vzdáleností sousedních uzlů rovnou h. Pak platí, že

$$\left|\frac{f(x_{-1}) - 2f(x_0) + f(x_1)}{h^2} - f''(x_0)\right| = \cancel{O(h)}, \quad O(h^2)$$

tj. tzv. ***(centrální) konečná diference*** *tvaru*

$$\frac{f(x_{-1}) - 2f(x_0) + f(x_1)}{h^2},$$

aproximuje ***druhou derivaci s přesností druhého řádu****.*

Remark 19

Zde vidíme, že řád přesnosti aproximace nezáleží na samotném tvaru konečné diference, ale také ***na diferencovatelnosti funkce*** *f****.***

(Centrální) diference pro 2.derivaci

Důkaz.

- vyjdeme ze závěru předchozího důkazu

$$\left|\frac{f(x_{-1})-2f(x_0)+f(x_1)}{h^2}-f''(x_0)\right| = \frac{1}{6}h\left|f^{(3)}(\xi_1)-f^{(3)}(\xi_2)\right|$$

- upravíme rozdíl třetích derivací podle věty o přírůstku funkce

$$f^{(3)}(\xi_1)-f^{(3)}(\xi_2) = f^{(4)}(\xi_3)(\xi_2-\xi_1)$$

kde $\xi_3 \in \langle \xi_1, \xi_2 \rangle$

- a pak dostáváme

$$\left|f''(x_0)-\frac{f(x_{-1})-2f(x_0)+f(x_1)}{h^2}\right| = \overset{\frac{1}{6}}{\cancel{4}}h\left|f^{(4)}(\xi_3)\right|\underbrace{|\xi_2-\xi_1|}_{\leq 2h} \leq \overset{\frac{1}{3}}{\cancel{2}}h^2\left|f^{(4)}(\xi_3)\right|$$

jelikož $|\xi_2-\xi_1| \leq 2h$

- pak platí

$$\left|f''(x_0)-\frac{f(x_{-1})-2f(x_0)+f(x_1)}{h^2}\right| = O(h^2).$$

(Centrální) diference pro 2.derivaci

Důkaz.

- důkaz lze provést i bez použití věty o přírůstku funkce, pokud použijeme delší Taylorovy rozvoje

$$f(x_1) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) + \frac{1}{6}h^3 f^{(3)}(x_0) + \frac{1}{24}h^4 f^{(4)}(\xi_1),$$
$$f(x_{-1}) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) - \frac{1}{6}h^3 f^{(3)}(x_0) + \frac{1}{24}h^4 f^{(4)}(\xi_2),$$

- kde $\xi_1 \in \langle x_{-1}, x_0 \rangle, \xi_2 \in \langle x_0, x_1 \rangle$
- nyní oba rozvoje sečteme

$$f(x_1)+f(x_{-1}) = 2f(x_0)+h^2 f''(x_0)+\frac{1}{24}h^4 \left(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2) \right)$$

- a tedy

$$\begin{aligned} \left| \frac{f(x_{-1}) - 2f(x_0) + f(x_1)}{h^2} - f''(x_0) \right| &= \frac{1}{24}h^2 \left| f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2) \right| \\ &= O(h^2). \end{aligned}$$

Konečné diference

Theorem 20

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 $k = 1, \ldots, n$.

Remark 21

- *věta vlastně říká skoro to samé, co věta 8 o chybě aproximace derivace s použitím Lagrangeova polynomu*
- *vystačíme si ale se slabšími předpoklady*
- *důkaz této věty je velmi názorný a konstruktivní ve smyslu, že ukazuje, jak konstruovat libovolné konečně diference*

$f_i = f(x_i)$

Konečné diference

Důkaz. $x_{-m_1}, \dots, x_0, \dots, x_{m_2}$; $n = m_1 - 1 m_2$

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

$$
\begin{array}{lrcllll}
\alpha_1 & f_{-m_1} & = & f_0 + & c_{11} h f_0^{(1)} + & \dots c_{1k} h^k f_0^{(k)0} & \dots c_{1n} h^n f_0^{(n)} + & d_1 h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi_1) \\
\alpha_2 & f_{-m_1+1} & = & f_0 + & c_{21} h f_0^{(1)} + & \dots c_{2k} h^k f_0^{(k)} & \dots c_{2n} h^n f_0^{(n)} + & d_2 h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi_2) \\
 & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\
\alpha_n & f_{m_2} & = & f_0 + & c_{n1} h f_0^{(1)} + & \dots c_{nk} h^k f_0^{(k)} & \dots c_{nn} h^n f_0^{(n)} + & d_n h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi_n) \\
\hline
 & & & * & 0 h f_0^{(1)} & \dots 1 h^k f_0^{(k)} & \dots 0 h^n f_0^{(n)} & *
\end{array}
$$

$\rightarrow \frac{h^{n+1}}{h^k}$

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

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

$O(h^{n+1-k})$

$l = n+1-k$

$n = l + k - 1$

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

Shrnutí

Diference	k	r	Předpoklady Lagrange	Taylor
$\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$	1	1	$f \in C^3$	$f \in C^2$
$\frac{f(x_0)-f(x_{-1})}{h}$	1	1	$f \in C^3$	$f \in C^2$
$\frac{f(x_1)-f(x_{-1})}{2h}$	1	2	$f \in C^4$	$f \in C^3$
$\frac{f(x_1)-2f(x_0)+f(x_{-1})}{h^2}$	2	1	$f \in C^5$	$f \in C^3$
$\frac{f(x_1)-2f(x_0)+f(x_{-1})}{h^2}$	2	2	$f \in C^6$	$f \in C^4$

Shrnutí

- aproximace derivací pomocí Lagrangeova interpolačního polynomu
  - je o něco pracnější a vyžaduje vyšší diferencovatelnost funkce f
- **aproximace derivací pomocí Taylorova polynomu**
  - je jednodušší a vyžaduje nižší diferencovatelnost funkce f
  - důkaz/konstrukce názorně ukazuje vztah mezi derivací, přesností aproximace a diferencovatelností funkce f
- základní konečné diference, které jsme si ukázali, se často používají v metodě konečných prvků - MKP