Kapitola 9. Numerické derivování

Definice: Existuje-li pro danou funkci $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ vlastní (tj. konečná) limita

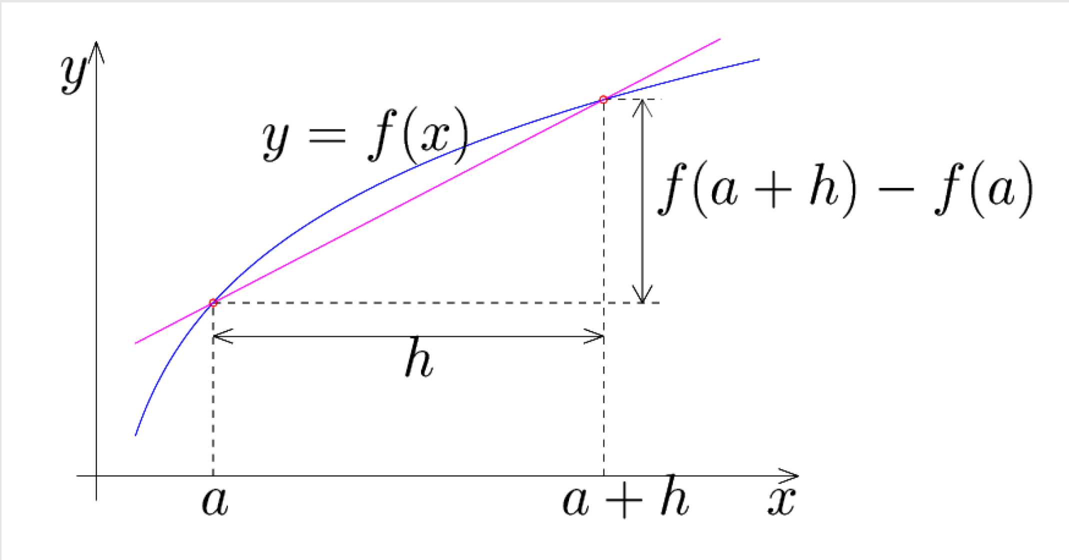
$$\lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

říkáme, že funkce $f(x)$ **má v bodě a derivaci**.
Příslušnou limitu značíme $f'(a)$.

Poznámka:

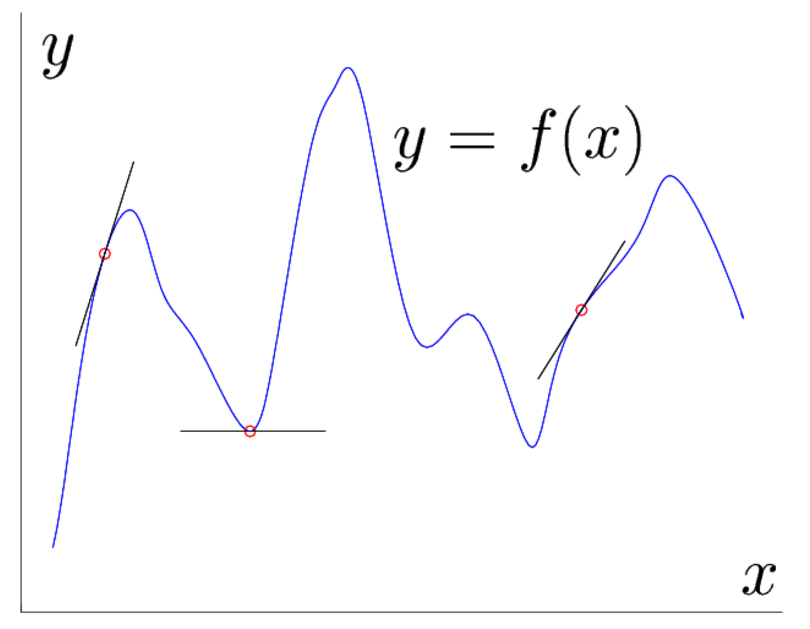
Geometrický význam derivace $f'(a)$ je směrnice tečny křivky dané rovnicí $y = f(x)$ v bodě a (neboť tečna v bodě a je limitní polohou sečny pro $h \to 0$).

Fyzikálně značí derivace funkce $y = f(x)$, kde x je čas a y dráha pohybu, limitu z průměrné rychlosti, tedy okamžitou rychlost v čase a.



Poznámka:

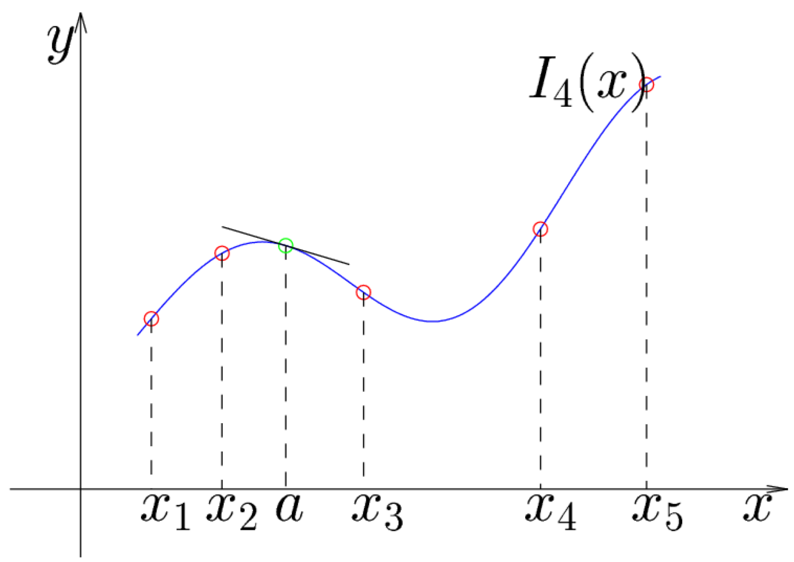
Pro danou funkci $f(x)$ vyjadřuje derivace $f'(x_0)$ míru „stoupání“, resp. „klesání“ v bodě x_0 .



Způsoby odvození vzorců pro výpočet derivace

1. Odvození pomocí interpolačního polynomu

Pro funkci f, která je zadána tabulkou, sestrojíme interpolační polynom a derivaci funkce f v bodě a ztotožníme s derivací tohoto interpolačního polynomu v bodě a.



$$f'(a) \approx I_n'(a)$$
$$f^{(k)}(a) \approx I_n^{(k)}(a)$$

Poznámky:

- Stupeň polynomu nemůže být nižší než řád počítané derivace.
- Pro jednoduchost hledáme hodnotu derivace v uzlovém bodě a navíc uvažujeme ekvidistantní uzly s krokem h.

2. Odvození pomocí Taylorova rozvoje

Pro dostatečně hladkou funkci f platí (pro $h > 0$):

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(\xi_1),\quad \xi_1\in(x_0,x_0+h)$$
$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(\xi_2),\quad \xi_2\in(x_0-h,x_0)$$

Z první rovnice potom plyne vztah

$$f'(x_0)=\underbrace{\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}}_{=D_Pf(x_0,h)}-\frac{1}{2}hf''(\xi_1)$$

Podobně ze druhé rovnice

$$f'(x_0)=\underbrace{\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}}_{=D_Lf(x_0,h)}+\frac{1}{2}hf''(\xi_2)$$

Obdrželi jsme dva základní **dvoubodové** vzorce $D_Pf(x_0,h)$ a $D_Lf(x_0,h)$, tzv. pravou a levou poměrnou diferenci.

Podobně odvodíme další vzorce pomocí Taylorova rozvoje vyšších řádů. Platí:

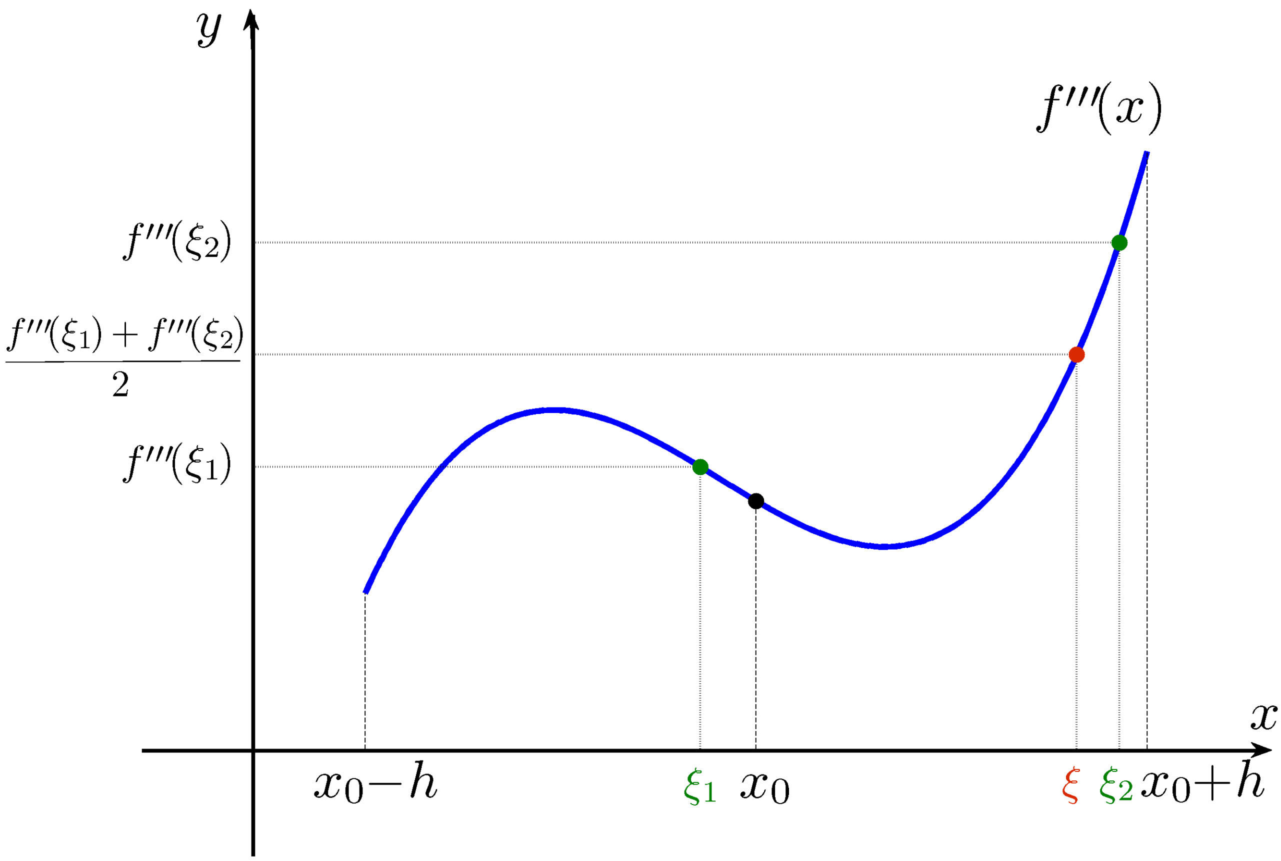
$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+\frac{h^3}{6}f'''(\xi_1),\quad \xi_1\in(x_0,x_0+h)$$
$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(\xi_2),\quad \xi_2\in(x_0-h,x_0)$$

Po odečtení obdržíme:

$$f(x_0+h)-f(x_0-h)=2hf'(x_0)+\frac{h^3}{6}(f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2))$$

Odtud vyjádříme první derivaci a získáme **tříbodový** vzorec $D_Cf(x_0,h)$, tzv. centrální poměrnou diferenci

$$f'(x_0)=\underbrace{\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}}_{D_Cf(x_0,h)}-\underbrace{\frac{h^2}{12}(f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2))}_{\frac{h^2}{6}f'''(\xi)}$$



Uvedené vzorce jsou pro výpočet první derivace $f'(x_0)$.

Pro výpočet druhé derivace $f''(x_0)$ lze použít například vzorec, který dostaneme po sečtení vztahů:

$$f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_1), \qquad \xi_1 \in (x_0, x_0+h)$$

$$f(x_0-h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_2), \qquad \xi_2 \in (x_0-h, x_0)$$

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

Odtud vyjádříme druhou derivaci a získáme **tříbodový** vzorec pro druhou derivaci

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2} - \underbrace{\frac{h^2}{24}(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2))}_{\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)}$$

Poznámka:

Samozřejmě lze odvodit řadu dalších vzorců, přičemž platí, že čím více bodů použijeme, tím bude řád chyby vyšší.

Příklad: Pomocí uvedených tří vzorců vypočtěte přibližnou hodnotu první derivace funkce $f(x) = \mathrm{e}^x(1-x)$ v bodě $x_0 = 1$. Použijte krok $h = 0{,}1$.

Řešení:

Nejprve si pro kontrolu analyticky zjistíme přesnou hodnotu první derivace funkce f bodě x_0.

$$f'(x) = \mathrm{e}^x(1-x) + \mathrm{e}^x(-1) = -x\mathrm{e}^x, \quad \text{tj.} \quad f'(1) = -1\mathrm{e}^1 = -\mathrm{e} \approx -2,7182$$

Nyní použijeme pravou, levou a centrální poměrnou diferenci:

1.
$$\begin{aligned} D_P f(x_0,h) &= \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = \frac{\mathrm{e}^{1,1}(1-1,1)-\mathrm{e}^1(1-1)}{0,1} = \\ &= \frac{-0,1\mathrm{e}^{1,1}}{0,1} = -\mathrm{e}^{1,1} \approx -3,0041 \qquad (\text{chyba } 0,2858) \end{aligned}$$

2.
$$\begin{aligned} D_L f(x_0,h) &= \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h} = \frac{\mathrm{e}^1(1-1)-\mathrm{e}^{0,9}(1-0,9)}{0,1} = \\ &= \frac{-0,1\mathrm{e}^{0,9}}{0,1} = -\mathrm{e}^{0,9} \approx -2,4596 \qquad (\text{chyba } 0,2586) \end{aligned}$$

3.
$$\begin{aligned} D_C f(x_0,h) &= \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h} = \frac{\mathrm{e}^{1,1}(1-1,1)-\mathrm{e}^{0,9}(1-0,9)}{0,2} = \\ &= \frac{-0,1\mathrm{e}^{1,1}-0,1\mathrm{e}^{0,9}}{0,2} = -\frac{\mathrm{e}^{1,1}+\mathrm{e}^{0,9}}{2} \approx -2,7318 \\ &\qquad (\text{chyba } 0,0136) \end{aligned}$$

Všimněme si velikosti chyb v jednotlivých případech. Potvrzuje se fakt, že chyba prvních dvou (dvoubodových) vzorců je řádu h, tj. v řádu desetin a chyba posledního (tříbodového) vzorce je řádu h^2, tj. v řádu setin.

Podmíněnost úlohy numerického derivování

Uvažujme nyní např. vzorec s pravou diferencí $D_P f(x_0,h)$, tj. platí

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}}_{D_P f(x_0,h)} - \underbrace{\frac{1}{2}hf''(\xi)}_{\text{chyba metody}}$$

Chybu metody označme r_1.

Platí-li $|f''(x)| < M$ pro $x \in (x_0, x_0+h)$, potom $|r_1| \leq \frac{M}{2}h$.

Musíme uvážit chyby měření (zaokrouhlovací chyby) - označíme r_2.

Označíme-li

$$f(x_0), f(x_0+h) \quad \ldots\ldots \text{ přesné hodnoty}$$
$$f^\star(x_0), f^\star(x_0+h) \quad \ldots\ldots \text{ vstupní hodnoty}$$

Potom pro r_2 platí

$$r_2 = \underbrace{\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}}_{\text{přesná hodnota vzorce}} - \underbrace{\frac{f^\star(x_0+h)-f^\star(x_0)}{h}}_{\text{vypočtená hodnota vzorce}}$$

A dále

$$\begin{aligned} |r_2| &= \left| \frac{f(x_0+h)-f^\star(x_0+h)}{h} + \frac{f^\star(x_0)-f(x_0)}{h} \right| \leq \\ &\leq \frac{|f(x_0+h)-f^\star(x_0+h)|}{h} + \frac{|f^\star(x_0)-f(x_0)|}{h} \leq \\ &\leq \frac{\varepsilon}{h} + \frac{\varepsilon}{h} = \frac{2\varepsilon}{h} \end{aligned}$$

Využili jsme zde odhady

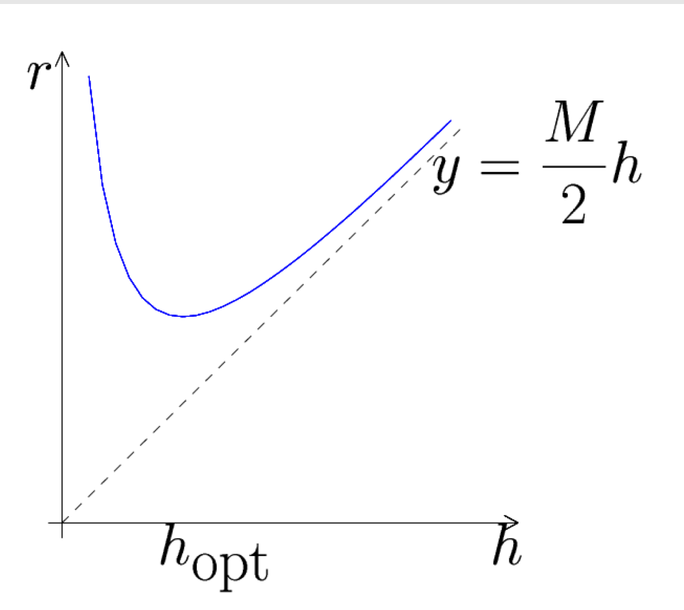
$$|f^\star(x_0+h)-f(x_0+h)| \leq \varepsilon$$

$$|f^\star(x_0)-f(x_0)| \leq \varepsilon$$

číslo ε může představovat např. strojovou přesnost.

Pro celkovou chybu r potom platí

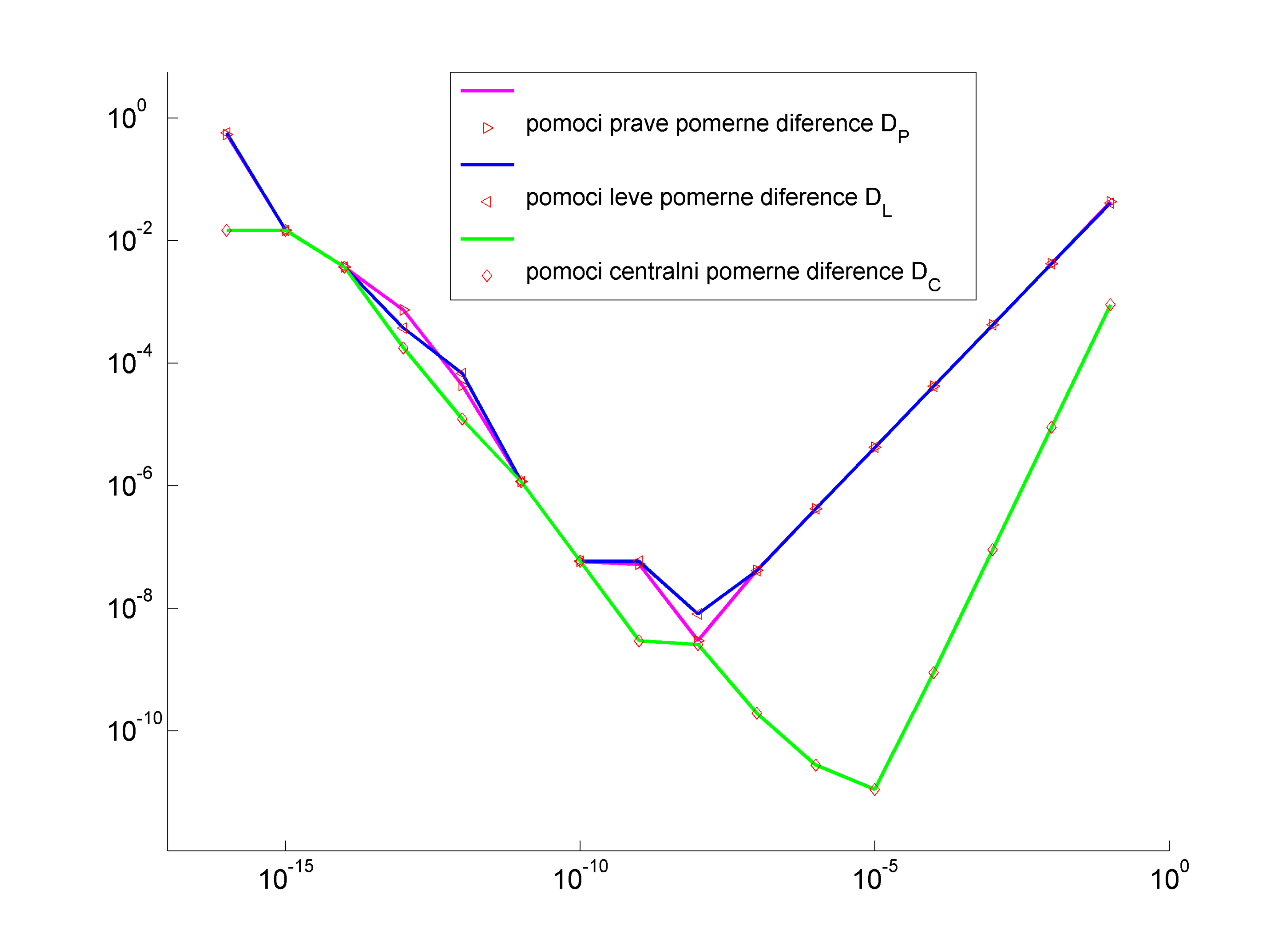
$$|r| \leq |r_1| + |r_2| \leq \frac{M}{2}h + \frac{2\varepsilon}{h}$$



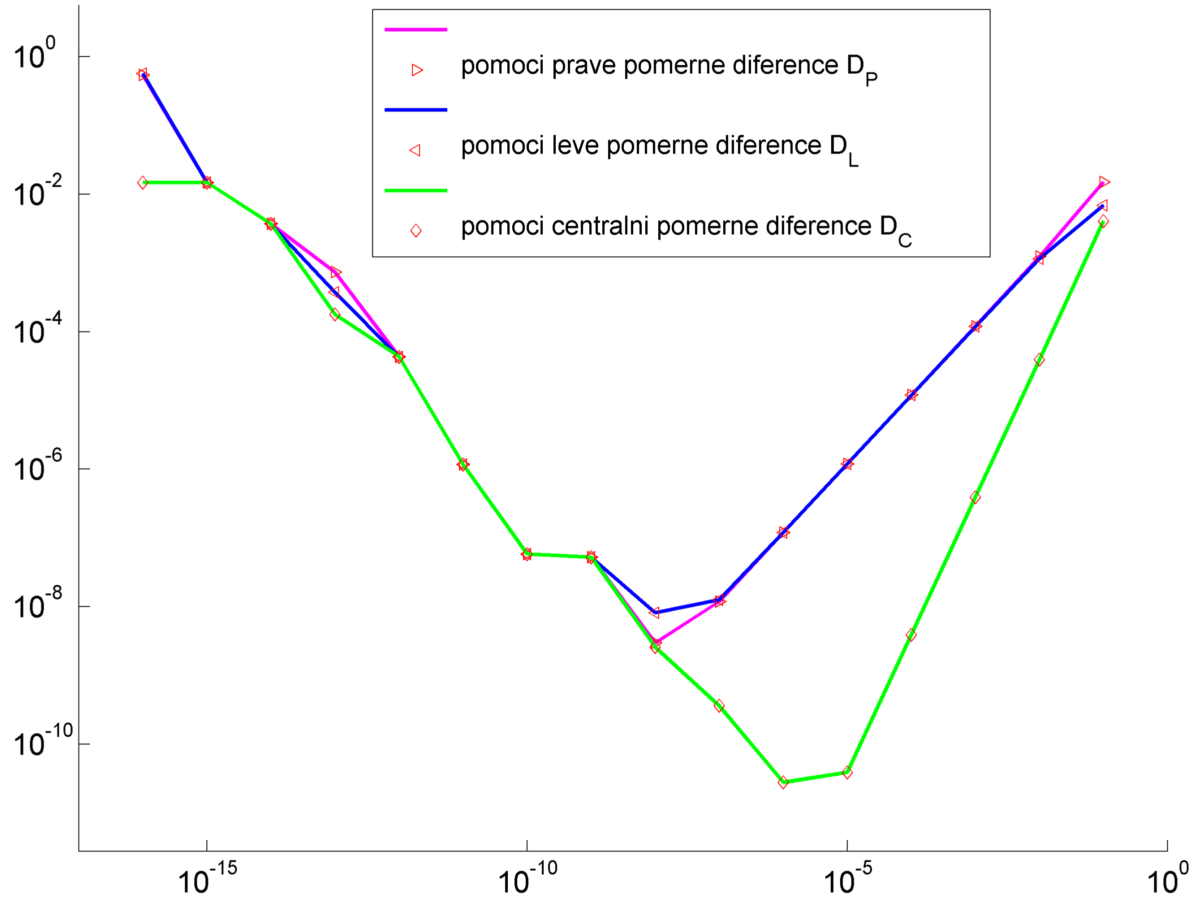
- Úloha numerického derivování je špatně podmíněná ! (pro zmenšující se h roste chyba)
- Lze najít optimální krok h_{opt}

V následujících příkladech ukažte chybu 3 odvozených vzorců pro výpočet první derivace funkce $f(x)$ v bodě x_0 při použití kroků $h = 10^{-16}, 10^{-15}, \ldots, 10^{-1}$.

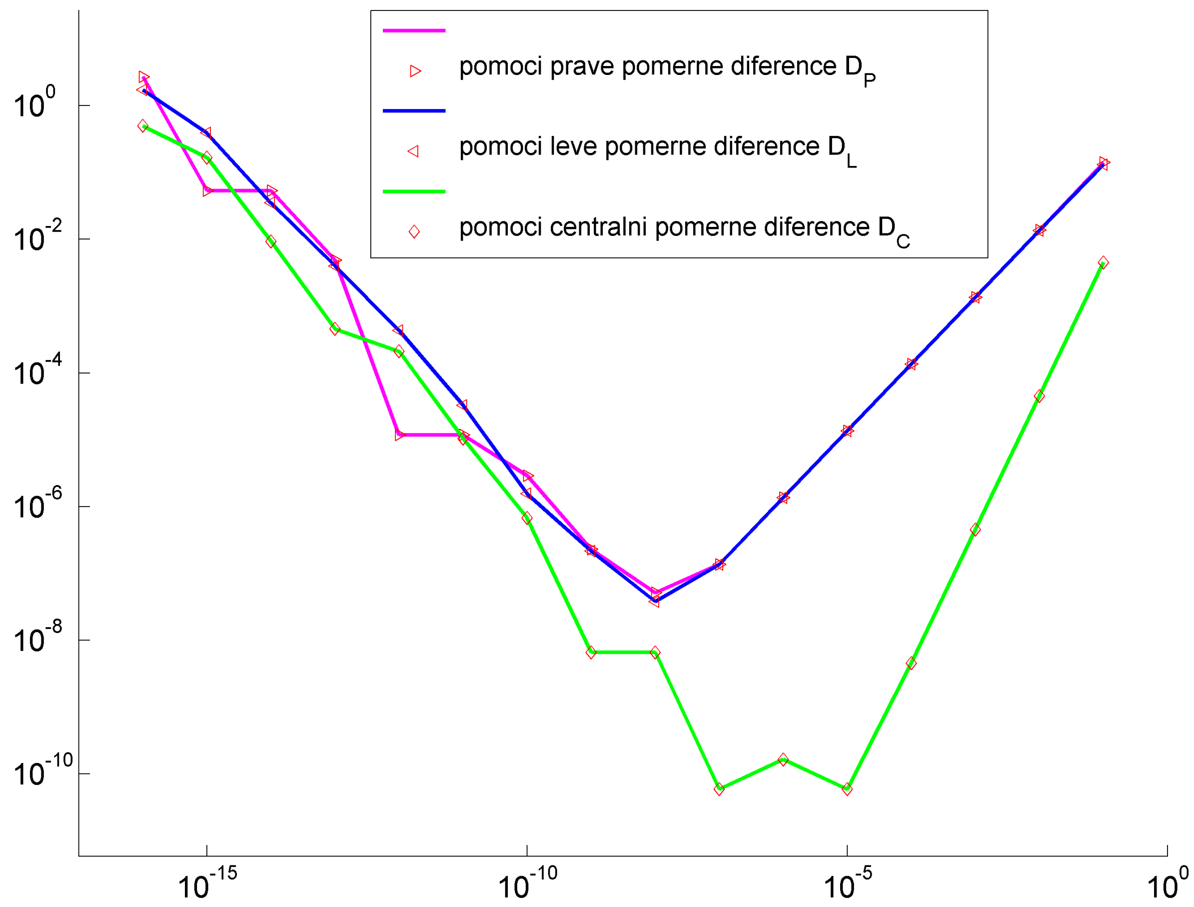
Příklad 1 $f(x) = \sin x,\ x_0 = 1.$



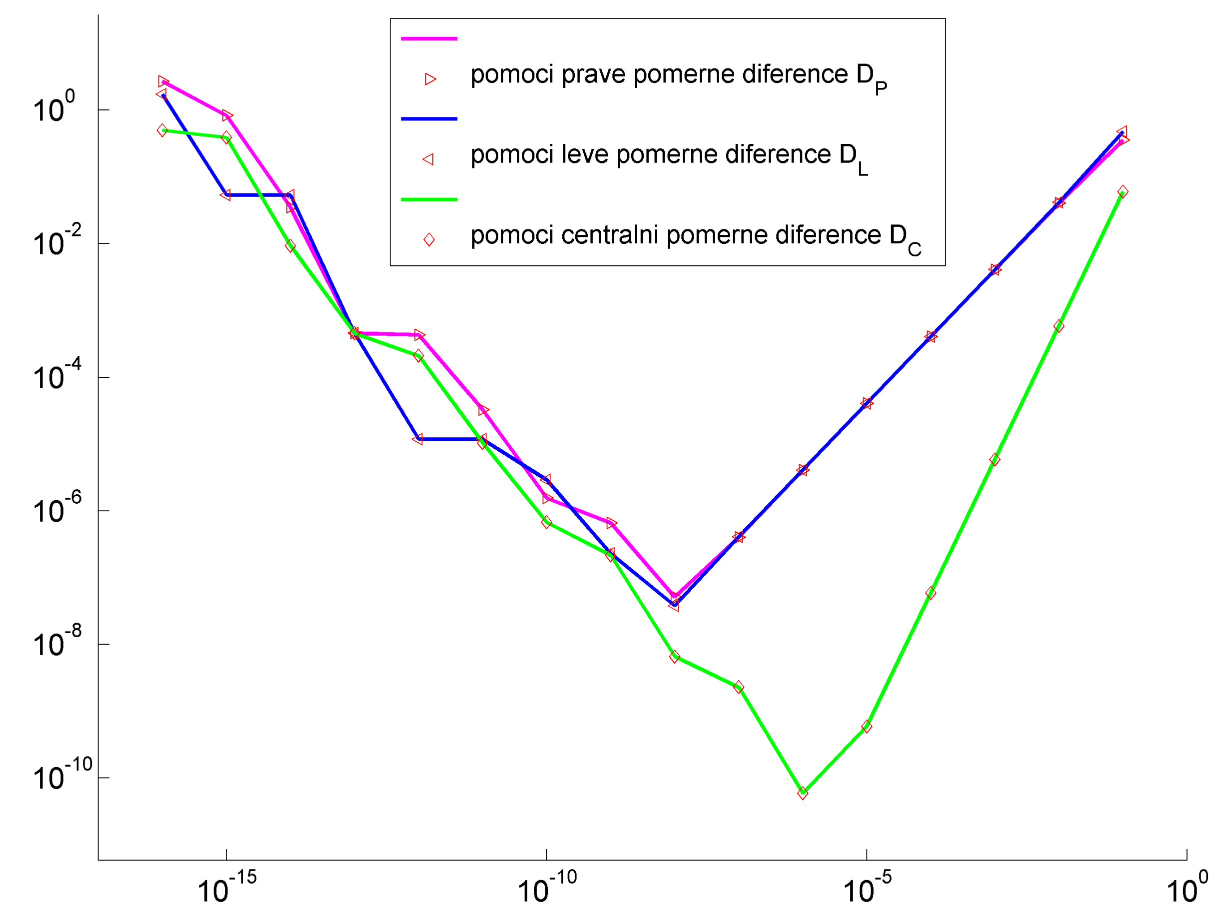
Příklad 2 $f(x) = \sin \dfrac{1}{x},\ x_0 = 1.$



Příklad 3 $f(x) = \mathrm{e}^x$, $x_0 = 1$.



Příklad 4 $f(x) = \mathrm{e}^{\frac{1}{x}}$, $x_0 = 1$.



Poznámka:

Na základě špatné podmíněnosti se zdá, že nebude možné při výpočtu derivace dosáhnout libovolné přesnosti.

Zvýšení přesnosti ale můžeme dosáhnout

1) použitím vzorce s chybou vyššího řádu
2) použitím tzv. Richardsonovy extrapolace

Richardsonova extrapolace

Jde o obecný princip, který se používá nejen u numerického derivování.

Myšlenka vychází z toho, že na základě znalosti výrazu pro rozvoj chyby využijeme dvou přibližných výsledků k získání třetího, který bude přesnější.

Tento proces eliminace chyb budeme demonstrovat např. na poměrné centrální diferenci $D_C f(x_0, h)$.

Vyjdeme z Taylorova rozvoje:

(1) $$f(x_0+h) = f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+\frac{h^3}{6}f'''(x_0)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0)+\frac{h^5}{5!}f^{(5)}(\xi_1)$$

(2) $$f(x_0-h) = f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(x_0)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0)-\frac{h^5}{5!}f^{(5)}(\xi_2)$$

(1)−(2) $$f(x_0+h)-f(x_0-h) = 2hf'(x_0)+\frac{h^3}{3}f'''(x_0)+\underbrace{\frac{h^5}{5!}\left(f^{(5)}(\xi_1)+f^{(5)}(\xi_2)\right)}_{O(h^5)}$$

$$\boxed{\underbrace{\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}}_{D_Cf(x_0,h)} = f'(x_0)+\underline{\frac{h^2}{6}f'''(x_0)}+O(h^4)} \qquad \circledast$$

Stejný vzorec použijeme pro výpočet s krokem $\bar{h}=2h$.

$$D_Cf(x_0,\bar{h}) = f'(x_0)+\frac{\bar{h}^2}{6}f'''(x_0)+O(\bar{h}^4)$$

$$\boxed{D_Cf(x_0,2h) = f'(x_0)+\underline{4\frac{h^2}{6}f'''(x_0)}+O(h^4)} \qquad \circledast\circledast$$

Podtržené členy chceme eliminovat – rovnici $\circledast$ vynásobíme 4

$$4D_Cf(x_0,h) = 4f'(x_0)+4\frac{h^2}{6}f'''(x_0)+O(h^4)$$

Odečteme $\circledast\circledast$

$$D_Cf(x_0,2h) = f'(x_0)+4\frac{h^2}{6}f'''(x_0)+O(h^4)$$

$$4D_Cf(x_0,h)-D_Cf(x_0,2h) = 3f'(x_0)+O(h^4)$$

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{4D_Cf(x_0,h)-D_Cf(x_0,2h)}{3}+O(h^4)}$$

nebo jinak zapsáno

$$\boxed{f'(x_0) = D_Cf(x_0,h)+\frac{D_Cf(x_0,h)-D_Cf(x_0,2h)}{3}+O(h^4)}$$

Poznámka:

Tímto způsobem jsme eliminovali chybu řádu h^2. Algoritmus Richardsonovy extrapolace lze samozřejmě použít opakovaně pro eliminaci chyb vyšších řádů. Tato metoda je potom velmi efektivní.

Pokud bychom chtěli stejným způsobem eliminovat chybu řádu např. 4, potom bychom dostali:

$$D_Cf(x_0,h) = f'(x_0)+Kh^4 \qquad \Big/ \cdot 2^4 \quad \text{a odečteme 2. rovnici}$$

$$D_Cf(x_0,2h) = f'(x_0)+K2^4h^4$$

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{2^4D_Cf(x_0,h)-D_Cf(x_0,2h)}{2^4-1}}$$

$$\boxed{f'(x_0) = D_Cf(x_0,h)+\frac{1}{2^4-1}\left(D_Cf(x_0,h)-D_Cf(x_0,2h)\right)}$$

Pro eliminaci chyb vyšších řádů postupujeme analogicky, tj. místo **4** použijeme příslušný řád.

Poznámka:

V názvu metody se objevuje slovo extrapolace. Je to proto, že nová hodnota derivace je lineární kombinací

Při určování rozvoje chyb jednotlivých vzorců vycházíme z Taylorova rozvoje funkce f.

Rozvoj chyby pro $D_P f(x_0,h)$ a $D_L f(x_0,h)$

$$(1)\qquad f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0) + \frac{h^5}{120}f^{(5)}(\xi_1), \qquad \xi_1 \in (x_0, x_0+h)$$

$$(2)\qquad f(x_0-h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0) - \frac{h^5}{120}f^{(5)}(\xi_2), \qquad \xi_2 \in (x_0-h, x_0)$$

$$(1)\quad \Rightarrow \quad f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}}_{D_P f(x_0,h)} - \underbrace{\frac{h}{2}f''(x_0)}_{c_1 h} - \underbrace{\frac{h^2}{6}f'''(x_0)}_{c_2 h^2} - \underbrace{\frac{h^3}{24}f^{(4)}(x_0)}_{c_3 h^3} - \underbrace{\frac{h^4}{120}f^{(5)}(\xi_1)}_{O(h^4)}$$

$$(2)\quad \Rightarrow \quad f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h}}_{D_L f(x_0,h)} + \underbrace{\frac{h}{2}f''(x_0)}_{c_1 h} - \underbrace{\frac{h^2}{6}f'''(x_0)}_{c_2 h^2} + \underbrace{\frac{h^3}{24}f^{(4)}(x_0)}_{c_3 h^3} - \underbrace{\frac{h^4}{120}f^{(5)}(\xi_2)}_{O(h^4)}$$

Rozvoj chyby pro $D_C f(x_0,h)$

$$f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0) + \frac{h^5}{120}f^{(5)}(x_0) + \frac{h^6}{720}f^{(6)}(x_0) + \frac{h^7}{7!}f^{(7)}(\xi_1), \qquad \xi_1 \in (x_0, x_0+h)$$

$$f(x_0-h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0) - \frac{h^5}{120}f^{(5)}(x_0) + \frac{h^6}{720}f^{(6)}(x_0) - \frac{h^7}{7!}f^{(7)}(\xi_2), \qquad \xi_2 \in (x_0-h, x_0)$$

Po odečtení:

$$f(x_0+h) - f(x_0-h) = 2hf'(x_0) + \frac{1}{3}h^3 f'''(x_0) + \frac{1}{60}h^5 f^{(5)}(x_0) + \underbrace{\frac{h^7}{7!}\left(f^{(7)}(\xi_1) + f^{(7)}(\xi_2)\right)}_{=O(h^7)}$$

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}}_{D_C f(x_0,h)} - \underbrace{\frac{1}{6}h^2 f'''(x_0)}_{c_1 h^2} - \underbrace{\frac{1}{120}h^4 f^{(5)}(x_0)}_{c_2 h^4} - \underbrace{\frac{h^6}{7!}2f^{(7)}(\xi)}_{O(h^6)}$$

Algoritmus Richardsonovy extrapolace

Na základě znalosti rozvoje chyby příslušného vzorce můžeme pro zpřesňování hodnoty vypočtené derivace použít následující algoritmus.

Algoritmus (např. pro vzorec $D_C f$)

Pro $s = 0, 1, 2, \ldots, S$

$T_{s,0} = D_c f(x_0, 2^{-s}h)$

Pro $k = 1, 2, \ldots, s$

$$T_{s,k} = T_{s,k-1} + \frac{T_{s,k-1} - T_{s-1,k-1}}{\underbrace{4^k}_{(*)} - 1}$$

$(*)$ $4^k = 2^{2k}$, protože v rozvoji chyby tohoto vzorce jsou pouze sudé mocniny h.

Schéma

h	T_{00}			
$\frac{h}{2}$	T_{10}	T_{11}		
$\frac{h}{4}$	T_{20}	T_{21}	T_{22}	
$\frac{h}{8}$	T_{30}	T_{31}	T_{32}	T_{33}

Poznámka: Pokud se např. rovnají T_{22} a T_{32}, nemusíme počítat T_{33}, protože vyjde stejně.

Příklad:

Použijte opakovanou Richardsonovu extrapolaci pro výpočet derivace funkce $f(x) = \ln x$ v bodě $x_0 = 3$ pomocí centrální poměrné diference s kroky $h = 0,8;\ 0,4;\ 0,2$ a $0,1$.

Řešení:

Ukázali jsme, že pro dostatečně hladkou funkci f platí vztah

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}}_{D_C f(x_0,h)} + \underbrace{c_1 h^2 + c_2 h^4 + c_3 h^6 + \ldots}_{\text{rozvoj chyby}},$$

kde čísla c_1, c_2, c_3 představují kontanty obsahující příslušné derivace.

Výsledky zapíšeme přehledně do tabulky:

h	$f'(x_0,h)$	1. korekce $[\frac{4}{3}; -\frac{1}{3}]$	2. korekce $[\frac{16}{15}; -\frac{1}{15}]$
$0,8$	$0,341589$		
$0,4$	$0,335329$	$\frac{4}{3}0,335329 - \frac{1}{3}0,341589 = \\ = 0,333242$	
$0,2$	$0,333828$	$\frac{4}{3}0,333828 - \frac{1}{3}0,335329 = \\ = 0,333327$	$\frac{16}{15}0,333327 - \frac{1}{15}0,333242 = \\ = \mathbf{0,333332}$
$0,1$	$0,333456$	$\frac{4}{3}0,333456 - \frac{1}{3}0,333828 = \\ = 0,333332$	$\frac{16}{15}0,333332 - \frac{1}{15}0,333327 = \\ = \mathbf{0,333332}$

Ve výpočtu jsme použili jednak 1. korekci pro eliminaci chyby řádu h^2, ale dále také 2. korekci, která eliminovala chybu řádu h^4.

V tabulce chybí sloupec pro 3. korekci. Důvod je ten, že se hodnoty, ze kterých by se extrapolovala nová hodnota, rovnají (dostali bychom to samé číslo).

Pro úplnost dodejme, že přesná hodnota derivace je $f'(x) = \frac{1}{x}$, tj. $f'(3) = \frac{1}{3}$.

Pomocí následujících výsledků lze porovnat efektivitu při použití různých vzorců.

výsledky v MATLABu

```
>> derivace_richardson('D_P', '-sin(exp(x))', 1, 0.4, 3);
----------------------------------------------------------------
  Vypocte hodnotu prvni derivace zadane funkce
  f=-sin(exp(x)) v bode x0=1.000000 s kroky
  h=[0.4, 0.2, 0.1, 0.05]

  Pro vypocet se pouzije vzorec prave pomerne diference D_P.
  Ke zpresneni se pouzije Richardsonova extrapolace.
----------------------------------------------------------------

 !     h     |  D_P(f,x0,h)  |   1.korekce   |   2.korekce   |   3.korekce   |
 ==============================================================================
 |  0.40000  |  3.006234654  |
 |  0.20000  |  2.941793905  |  2.877353156  |
 |  0.10000  |  2.737868276  |  2.533942647  |  2.419472477  |
 |  0.05000  |  2.612795286  |  2.487722295  |  2.472315512  |  2.479864517  |

  Presna hodnota derivace funkce f v bode x0 je   2.478349732955
```

výsledky v MATLABu

```
>> derivace_richardson('D_L', '-sin(exp(x))', 1, 0.4, 3);
----------------------------------------------------------------
  Vypocte hodnotu prvni derivace zadane funkce
  f=-sin(exp(x)) v bode x0=1.000000 s kroky
  h=[0.4, 0.2, 0.1, 0.05]

  Pro vypocet se pouzije vzorec leve pomerne diference D_L.
  Ke zpresneni se pouzije Richardsonova extrapolace.
----------------------------------------------------------------

 !     h      |  D_L(f,x0,h)  |   1.korekce    |   2.korekce    |   3.korekce    |
 ==================================================================================
 |  0.40000   |  1.394507747  |
 |  0.20000   |  1.912110950  |  2.429714153  |
 |  0.10000   |  2.195575019  |  2.479039089  |  2.495480735  |
 |  0.05000   |  2.338245228  |  2.480915437  |  2.481540886  |  2.479549479  |

  Presna hodnota derivace funkce f v bode x0 je   2.478349732955
```

výsledky v MATLABu

```
>> derivace_richardson('D_C', '-sin(exp(x))', 1, 0.4, 3);
----------------------------------------------------------------
  Vypocte hodnotu prvni derivace zadane funkce
  f=-sin(exp(x)) v bode x0=1.000000 s kroky
  h=[0.4, 0.2, 0.1, 0.05]

  Pro vypocet se pouzije vzorec centralni pomerne diference D_C.
  Ke zpresneni se pouzije Richardsonova extrapolace.
----------------------------------------------------------------

 !     h      |  D_C(f,x0,h)  |   1.korekce    |   2.korekce    |   3.korekce    |
 ==================================================================================
 |  0.40000   |  2.200371201  |
 |  0.20000   |  2.426952427  |  2.502479503  |
 |  0.10000   |  2.466721648  |  2.479978054  |  2.478477958  |
 |  0.05000   |  2.475520257  |  2.478453127  |  2.478351465  |  2.478349457  |

  Presna hodnota derivace funkce f v bode x0 je   2.478349732955
```

Aproximaci derivace funkce jsme již použili např. u odvození metody sečen z Newtonovy metody.

Newtonova metoda

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$$

metoda sečen

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k)\frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

Metoda konečných diferencí

... jeden ze způsobů řešení okrajových úloh.

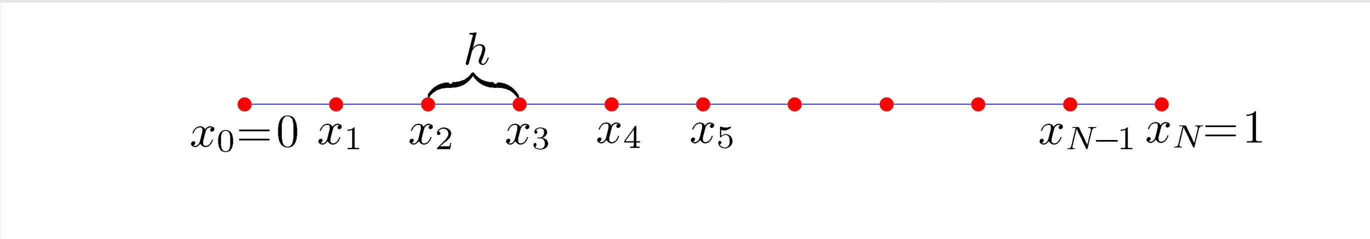
Řešme okrajovou úlohu (ODR 2.řádu)

$$\boxed{\begin{array}{c} -u'' + q(x)u = f(x) \qquad x \in (0,1) \\ u(0) = g_0 \\ u(1) = g_1 \end{array}} \qquad \circledast$$

q, f ... dané funkce definované a spojité na $\langle 0,1\rangle$, $q(x) \geq 0$
g_0, g_1 ... daná čísla

($\Rightarrow$ úloha má právě 1 klasické řešení)

Interval $\langle 0,1\rangle$ rozdělíme na N stejných podintervalů (ekvidistantní síť)



$$S = \{x_i = ih; \quad i = 0,1,\dots,N\} \quad \dots \text{ síť;} \quad h \ \dots \text{ krok sítě.}$$

Přibližné řešení konstruujeme jako funkci diskrétního argumentu x_i.

Přibližné řešení je určeno vektorem $\mathbf{U} = [U_0, U_1, U_2, \dots, U_{N-1}, U_N]$, kde složky U_i aproximují hodnoty $u(x_i)$ přesného řešení v uzlech sítě.

Klasické řešení splňuje rovnici $\circledast$ v každém bodě $x \in (0,1)$, tj.

$$-u''(x) + q(x)u(x) = f(x)$$

Na $\langle 0,1\rangle$ jsme zvolili rovnoměrnou síť S a v <u>každém vnitřním bodě</u> této sítě musí platít:

$$\boxed{-u''(x_i) + q(x_i)u(x_i) = f(x_i), \quad i = 1,2,\dots,N-1} \qquad \circledast\circledast$$

druhou derivaci aproximujeme druhou poměrnou diferencí

$$\boxed{u''(x_i) \approx \frac{1}{h}\left[\frac{u(x_i+h) - u(x_i)}{h} - \frac{u(x_i) - u(x_i-h)}{h}\right] = \frac{1}{h^2}\big[u(x_i-h) - 2u(x_i) + u(x_i+h)\big]}$$

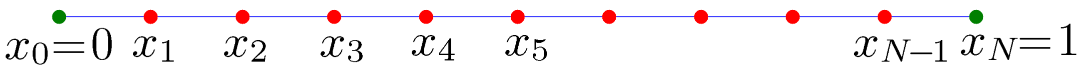
soustavu $\circledast\circledast$ nahradíme soustavou přibližných rovností

$$\boxed{-\frac{1}{h^2}\left[u(x_i-h) - 2u(x_i) + u(x_i+h)\right] + q(x_i)u(x_i) \approx f(x_i)}$$

tj.

$$\boxed{\begin{aligned} -\frac{1}{h^2}(U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}) + q(x_i)U_i &= f(x_i) \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1 \\ U_0 &= g_0 \\ U_N &= g_1 \end{aligned}}$$

... soustava diferenčních rovnic



Neznáme hodnoty uvnitř intervalu, tj. v $x_1, x_2, \ldots, x_{N-1}$.
V první rovnici figuruje hodnota U_0, ta je ale rovna g_0 a tento člen převedeme na pravou stranu.
Obdobně pro poslední rovnici, za U_N dosadíme g_N a převedeme na pravou stranu.

Získaná soustava:

$$\underbrace{\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 2+h^2q_1 & -1 & 0 & & \ldots & 0 \\ -1 & 2+h^2q_2 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & -1 & 2+h^2q_3 & -1 & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & -1 & 2+h^2q_{N-2} & -1 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & -1 & 2+h^2q_{N-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{N-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{U}} = \underbrace{\begin{bmatrix} f_1 + \frac{g_0}{h^2} \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{N-1} - \frac{g_1}{h^2} \end{bmatrix}}_{\mathbf{F}}$$

Soustava lineárních algebraických rovnic $\boxed{\mathbf{AU} = \mathbf{F}}$

$\mathbf{A}$ ... symetrická, třídiagonální, pozitivně definitní ($\Rightarrow$ regulární)

- symetrie matice je důsledek symetrie použité diferenční aproximace u'' a očíslování uzlů (zde je vše přirozené, význam u parciálních diferenciálních rovnic)

- pro regulární matici soustavy $\exists!$ řešení

Otázky:

S jakou přesností přibližné řešení aproximuje přesné řešení?

Zmenšuje se chyba přibližného řešení, zjemňujeme-li síť, tj. $h \to 0$?

Poznámka: Pro aproximaci derivací lze samozřejmě použít i jiné vzorce.
Použijeme-li např. vzorec 7, bude výsledná matice soustavy opět pásová, šíře pásu bude nyní 5.

	Derivace	Aproximace	Odhad chyby	Schematický zápis
1	$u'(x_i)$	$\frac{1}{h}(u_{i+1}-u_i)$	$\frac{1}{2}h \max\limits_{\langle x_i, x_{i+1}\rangle} \lvert u''(x)\rvert,\ u\in C^2$	$\frac{1}{h}\left\{ \underset{i}{-1} \text{ --- } \underset{i+1}{1} \right\}$
2	$u'(x_i)$	$\frac{1}{h}(u_i-u_{i-1})$	$\frac{1}{2}h \max\limits_{\langle x_{i-1}, x_i\rangle} \lvert u''(x)\rvert,\ u\in C^2$	$\frac{1}{h}\left\{ \underset{i-1}{-1} \text{ --- } \underset{i}{1} \right\}$
3	$u'(x_i)$	$\frac{1}{2h}(u_{i+1}-u_{i-1})$	$\frac{1}{6}h^2 \max\limits_{\langle x_{i-1}, x_{i+1}\rangle} \lvert u^{(3)}(x)\rvert,\ u\in C^3$	$\frac{1}{2h}\left\{ \underset{i-1}{-1} \text{ --- } \underset{i}{\bullet} \text{ --- } \underset{i+1}{1} \right\}$
4	$u'(x_i)$	$\frac{1}{2h}(-u_{i+2}+4u_{i+1}-3u_i)$	$\frac{1}{3}h^2 \max\limits_{\langle x_i, x_{i+2}\rangle} \lvert u^{(3)}(x)\rvert,\ u\in C^3$	$\frac{1}{2h}\left\{ \underset{i}{-3} \text{ --- } \underset{i+1}{4} \text{ --- } \underset{i+2}{-1} \right\}$
5	$u'(x_i)$	$\frac{1}{2h}(3u_i-4u_{i-1}+u_{i-2})$	$\frac{1}{3}h^2 \max\limits_{\langle x_{i-2}, x_i\rangle} \lvert u^{(3)}(x)\rvert,\ u\in C^3$	$\frac{1}{2h}\left\{ \underset{i-2}{1} \text{ --- } \underset{i-1}{-4} \text{ --- } \underset{i}{3} \right\}$
6	$u''(x_i)$	$\frac{1}{h^2}(u_{i+1}-2u_i+u_{i-1})$	$\frac{1}{12}h^2 \max\limits_{\langle x_{i-1}, x_{i+1}\rangle} \lvert u^{(4)}(x)\rvert,\ u\in C^4$	$\frac{1}{h^2}\left\{ \underset{i-1}{1} \text{ --- } \underset{i}{-2} \text{ --- } \underset{i+1}{1} \right\}$
7	$u''(x_i)$	$\frac{1}{12h^2}(-u_{i-2}+16u_{i-1}-30u_i+16u_{i+1}-u_{i+2})$	$0(h^4),\ u\in C^6$	$\frac{1}{12h^2}\left\{ \underset{i-2}{-1} \text{ --- } \underset{i-1}{16} \text{ --- } \underset{i}{-30} \text{ --- } \underset{i+1}{16} \text{ --- } \underset{i+2}{-1} \right\}$

Ukažme si jak postupovat při diskretizaci úlohy s derivací v okrajové podmínce.

Je-li na některém z konců intervalu zadána Neumannova nebo Newtonova okrajová podmínka, musíme předchozí postup modifikovat, neboť neznáme hodnotu $u(0)$ nebo $u(1)$.

V takovém případě musíme sestavit také diferenční aproximaci příslušné okrajové podmínky a připojit ji k soustavě diferenčních rovnic, jež ve vnitřních uzlech aproximují diferenciální rovnici.

Ukážeme tři takové možné aproximace pro řešení následující úlohy.

$$\boxed{\begin{aligned} -u'' + q(x)u &= f(x) && x\in(0,1) \\ \alpha_0 u(0) - \beta_0 u'(0) &= g_0 && \beta_0 > 0 \\ u(1) &= g_1 \end{aligned}} \qquad (\spadesuit)$$

Ve vnitřních uzlech sítě aproximujeme diferenciální rovnici ($\spadesuit$) stejnými diferenčními rovnicemi jako v předchozím případě

$$\boxed{-\frac{1}{h^2}(U_{i-1}-2U_i+U_{i+1}) + q(x_i)U_i \quad = \quad f(x_i) \qquad i = 1,2,\dots,N-1}$$

V těchto rovnicích vystupují neznámé $U_0, U_1, \dots, U_{N-1}, U_N$.

Abychom dostali stejný počet rovnic jako neznámých, musíme tedy (na základě okrajových podmínek) k získaným $N-1$ rovnicím ještě 2 rovnice připojit. Jednu z nich dostaneme z Dirichletovy okrajové podmínky v bodě $x=1$ tak, že položíme $\boxed{U_N = g_1}$. Levou okrajovou podmínku (v bodě $x=0$) můžeme zužitkovat různými způsoby.

1.způsob

Aproximujeme-li $u(0)$ pomocí vzorce 1 (tj. pravé poměrné diference), dojdeme k diferenční rovnici

$$\alpha_0 U_0 - \beta_0 \frac{U_1 - U_0}{h} = g_0 \quad (\beta_0 \neq 0),$$

kterou klasické řešení splňuje s chybou velikosti $O(h)$. Rovnici vynásobíme číslem $1/(h\beta_0)$ a upravíme na tvar

$$\boxed{\frac{1}{h^2}\Big[(1-\frac{\alpha_0}{\beta_0}h)U_0 - U_1\Big] = \frac{g_0}{h\beta_0}};$$

tuto úpravu děláme proto, aby výsledná matice soustavy síťových rovnic byla symetrická.

Předchozí rovnici přidáme k získaným diferenčním rovnicím a dosadíme g_1 za U_N. Dostaneme opět soustavu lineárních algebraických rovnic se symetrickou třídiagonální maticí (pozor: $\mathbf{U} = [U_0, U_1, \dots, U_{N-1}]^T$).

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 1+\frac{\alpha_0 h}{\beta_0} & -1 & 0 & & \dots & 0 \\ -1 & 2+h^2q_1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2+h^2q_2 & -1 & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & -1 & 2+h^2q_{N-2} & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2+h^2q_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_0 \\ U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{g_0}{h\beta_0} \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} - \frac{g_1}{h^2} \end{bmatrix}$$

Matice soustavy je řádu N a lze dokázat, že je regulární. Přibližné řešení lze proto jednoznačně stanovit a dá se ukázat, že jeho **chyba je velikosti** $O(h)$.

Tato skutečnost, tj. snížení řádu chyby metody, možná překvapí, neboť síťová rovnice pro všechny uzly s výjimkou x_0 aproximuje diferenciální rovnici s diskretizační chybou $O(h^2)$. Přesto však okolnost, že jsme se v jediné rovnici dopustili diskretizační chyby velikosti $O(h)$, ovlivní velikost chyby metody nejen v blízkosti bodu x_0, ale ve všech bodech sítě. Jde tu o jev, který je pro užití diferenční metody typický a ukazuje, že chceme-li využít přesnosti, s níž jsme aproximovali diferenciální rovnici samotnou, musíme stejně přesně aproximovat i okrajové podmínky.

2.způsob

Bezprostřední možnost přesnější náhrady hodnoty derivace v okrajové podmínce spočívá v užití vzorců 4 a 5 z tabulky. Tyto aproximace mají pro $u \in C^3$ diskretizační chybu $O(h^2)$.

Vzniklá soustava diferenčních rovnic však již není třídiagonální, není symetrická a navíc se při jejím řešení standardními metodami mohou vyskytnout numerické problémy. Proto tento postup nedoporučujeme.

3.způsob

Hodnotu $u'(0)$ aproximujeme pomocí vzorce 3 (centrální poměrná diference).

$$u'(0) \approx \frac{1}{2h}\Big[u(x_1) - u(x_{-1})\Big],$$

kde $x_{-1} = -h$.

Chyba aproximace je druhého řádu. Okrajovou podmínku $\alpha_0 u(0) - \beta_0 u'(0) = g_0$ tak nahradíme diferenční rovnicí

$$\alpha_0 U_0 - \beta_0 \frac{U_1 - U_{-1}}{2h} = g_0 \quad (\beta_0 \neq 0). \tag{$\heartsuit$}$$

Je zde však navíc další neznámá U_{-1} a potřebujeme proto připojit ještě jednu rovnici.

Nejjednodušeji to provedeme tak, že žádáme platnost rovnice pro vnitřní uzly i pro hraniční uzel x_0, tj. platnost rovnice

$$-\frac{1}{h^2}(U_{-1} - 2U_0 + U_1) + q(x_0)U_0 = f(x_0). \tag{$\diamondsuit$}$$

(Jde vlastně o aproximaci diferenciální rovnice v bodě x0 $= 0$).

Fiktivní hodnotu U_{-1},která nemá význam aproximace přesného řešení naší okrajové úlohy (neboť toto řešení uvažujeme pouze na intervalu $\langle 0, 1\rangle$), z rovnic ($\heartsuit$), ($\diamondsuit$) vyloučíme

$$U_{-1} = h^2\Big(q_0U_0 - f_0\Big) + 2U_0 - U_1,$$

dosadíme

$$\alpha_0 U_0 - \beta_0 \frac{U_1 - h^2(q_0 U_0 - f_0) - 2U_0 + U_1}{2h} = g_0$$

a dospějeme k diferenční rovnici

$$\Big(\alpha_0 + \frac{1}{2}\beta_0 h q_0\Big) U_0 - \beta_0 \frac{U_1 - U_0}{h} = g_0 + \frac{1}{2}\beta_0 h f_0,$$

která aproximuje okrajovou podmínku v bodě $x_0 = 0$ a kterou dostatečně hladké přesné řešení naší okrajové úlohy splňuje s chybou řádové velikosti $O(h^2)$. Rovnici upravíme na tvar

$$\boxed{\frac{1}{h^2}\Big[(1 + \frac{\alpha_0 h}{\beta_0} + \frac{1}{2}h^2 q_0)U_0 - U_1\Big] = \frac{g_0}{h\beta_0} + \frac{1}{2}f_0}$$

a připojíme ji k diferenčním rovnicím pro vnitřní uzly.

Dá se ukázat, že **chyba přibližného řešení je** v tomto případě velikosti $O(h^2)$.