Numerická derivace

- výpočet derivace v počítači závisí na reprezentaci funkce v počítači, např. často máme funkce reprezentované jako rozvoj do určité (analytické) báze $\phi_i(x)$

$$f(x) \simeq \sum_{i=1}^{n} c_i \phi_i(x) \qquad (*)$$

a derivace pak můžeme počítat přímo pomocí

$$\left.\frac{d^m f(x)}{dx^m}\right|_{x=z} \approx \sum_{i=1}^{n} c_i \left.\frac{d^m \phi_i(x)}{dx^m}\right|_{x=z}$$

pokud lze derivace báze rozumně počítat (např. pro polynomy apod.)

- pokud máme funkci zadanou body a funkčními hodnotami, pak je nutné funkci aproximovat, buď pomocí (*) např. metodou nejmenších čtverců, nebo interpolací, nejčastěji polynomiální, a derivovat tuto aproximaci

- i tehdy, když můžeme funkci $f(x)$ vyčíslit v libovolném bodě, ale ne už její derivaci, (např. $f(x)$ je řešením složitého problému) není vhodné používat nejjednodušší aproximace derivací jako např.

$$\left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x_0} \approx \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

kdy volíme x_1 co nejblíže x_0, neboli h volíme malé, protože vznikají problémy se zaokrouhlovací chybou (odečítání dvou blízkých čísel)

- chyba se totiž v tomto případě chová jako $\mathcal{O}(h)$ (viz později) a potřebujeme-li vysokou přesnost, je nutné volit velmi malé h a zaokrouhl. chyba může výsledek hodně ovlivnit

$\Rightarrow$ je vhodné použít vícebodové aproximace, u kterých se chyba chová jako $\mathcal{O}(h^p)$, $p>1$ a není pak nutné volit tak malá h

- v případě, že máme $f(x)$ zadanou v bodech $x_0, \dots, x_n$ a k její aproximaci použijeme polynomiální interpolaci

$$f(x) \approx L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_{n,i}(x) f(x_i)$$

kde $l_{n,i}(x)$ lze vyjádřit jako

$$l_{n,i}(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x-x_i)\,\omega_n'(x_i)}$$

kde $\omega_n(x) = \prod_{j=0}^{n} (x-x_j)$ a $\omega_n'(x) = \sum_{i=0}^{n} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (x-x_j)$

a tedy $\omega_n'(x_k) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (x_k - x_j)$,

dostaneme derivováním $L_n(x)$ aproximaci

$$\boxed{\left.\frac{d^m f}{dx^m}\right|_{x=z} \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \left.\frac{d^m l_{n,i}(x)}{dx^m}\right|_{x=z} = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, c_{n,i}^{m}(z)}$$

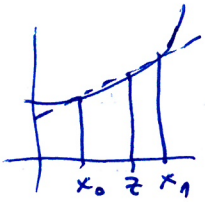
- Koeficienty $c_{n,i}^{m}(z)$ závisí jak na počtu použitých bodů n, tak na bodu z, ve kterém derivaci počítáme.

Lze je určit různými způsoby:

1) přímá derivace $l_{n,i}(x)$ – ne příliš efektivní, vyžaduje konstrukci polynomů $l_{n,i}(x)$

2) řešením soustavy lineárních rovnic, které vychází z Taylorových rozvojů $f(x)$ v x_i – též ne příliš efektivní, výhoda je, že dostáváme i chybové členy

Př. rozvineme-li



$$f(x_0) = f(z) + \frac{f'(z)}{1!}(x_0 - z) + \frac{f''(z)}{2!}(x_0-z)^2 + \mathcal{O}((x_0-z)^3)$$

$$f(x_1) = f(z) + f'(z)(x_1 - z) + \frac{f''(z)}{2!}(x_0-z)^2 + \mathcal{O}((x_1-z)^3)$$

a vyřešíme-li tuto soustavu vůči $f(z)$ a $f'(z)$, dostaneme

lineární interpolace $f(x)$ $\rightarrow$ $$f(z) = \frac{x_1 - z}{x_1 - x_0} f(x_0) + \frac{z - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) + \frac{f''(z)}{2}(x_1 - z)(z - x_0)$$

$$f'(z) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} - \frac{f''(z)}{2} \underbrace{(x_1 + x_0 - 2z)}_{\pm h \text{ pro } z = x_0 \text{ nebo } x_1}$$

a 0 pro $z = \frac{x_0 + x_1}{2}$ $\Rightarrow$ chyba $\mathcal{O}(h^2)$

(více viz demonstrace v Mathematice)

3) efektivní výpočet koeficientů $c^m_{n,i}(z)$ navrhl Fornberg v Math. Comp. 51 (1988) 699 vycházející z rekurentních vztahů pro $\omega_n(x)$:

$$\omega_n(x) = (x - x_n)\,\omega_{n-1}(x)$$
$$\omega_n'(x) = (x - x_n)\,\omega_{n-1}'(x) + \omega_{n-1}(x)$$

z nichž plynou vztahy

$$\left.\begin{aligned} l_{n,i}(x) &= \frac{(x-x_n)}{(x_i - x_n)}\, l_{n-1,i} \quad \text{pro } 0 \le i \le n-1 \\ \text{a} \quad l_{n,n}(x) &= \frac{\omega_{n-2}(x_{n-1})}{\omega_{n-1}(x_n)}\,(x - x_{n-1})\, l_{n-1,n-1}\,. \end{aligned}\right\} (*)$$

– vyjádříme-li nyní $l_{n,i}(x)$ pomocí Taylorova rozvoje v z jako

$$l_{n,i}(x) = \sum_{m=0}^{n} \frac{c^m_{n,i}(z)}{m!}\,(x-z)^m$$

a dosadíme do (*), pak porovnáním členů u $(x-z)^k$ nakonec dostaneme

$$c^m_{n,i} = \frac{1}{x_n - x_i}\left[(x_n - z)\,c^m_{n-1,i} - m\,c^{m-1}_{n-1,i}\right] \quad \text{pro } 0 \le i \le n-1 \text{ a } n \ge m \ge 1$$

a

$$c^m_{n,n} = \frac{\omega_{n-2}(x_{n-1})}{\omega_{n-1}(x_n)}\left[m\,c^{m-1}_{n-1,n-1} - (x_{n-1} - z)\,c^m_{n-1,n-1}\right]$$

a speciálně

$$c^0_{n,i} = \frac{x_n - z}{x_n - x_i}\,c^0_{n-1,i} \quad \text{a} \quad c^0_{0,0}(z) = 1.$$

$$c^0_{n,n} = \frac{\omega_{n-2}(x_{n-1})}{\omega_{n-1}(x_n)}\,(z - x_{n-1})\,c^0_{n-1,n-1}$$

kde $\omega_{-1}(x) = 1$ a $c^m_{n,i} = 0$ pro $m > n$.

Pozn: Tyto rekurentní vztahy používá Mathematica.

Chyba takto získaných aproximací je obecně $O(h^{n+1-m})$ pro m-tou derivaci a $(n+1)$-bodovou formuli, ale u symetrických vztahů je obvykle o řád lepší.

4) pro rovnoměrné sítě (ekvidistantní grid), kdy

$$x_i = x_0 + ih \quad , i = 1, \dots, n$$

jsou koeficienty jednodušší, a zvláště pro derivace v bodech x_i jsou pouze funkcemi kroku h (viz později)

5] k odvození přesnějších vztahů pro derivaci lze použít i tzv. <u>Richardsonovu extrapolaci</u>, kdy obecně ze známého chování chyby extrapolujeme k $h \to 0$

Př. centrovaná diference v bodě x_i aproximuje první derivaci s chybou $\mathcal{O}(h^2)$, můžeme tedy psát

$$\underbrace{D_h}_{\text{operátor contr. diference s krokem } h} f(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = f'(x_i) + ch^2 + \mathcal{O}(h^4)$$

$$D_{2h} f(x_i) = \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} = f'(x_i) + c\,4h^2 + \mathcal{O}(h^4)$$

kde c je neznámá konstanta. Odtud

$$f'(x_i) + \mathcal{O}(h^4) = \frac{4D_h f(x_i) - D_{2h} f(x_i)}{3} = \qquad (*)$$

$$= \frac{4}{6h}(f_{i-1} - f_{i-1}) - \frac{1}{12h}(f_{i+2} - f_{i-2}) =$$

$$= \frac{1}{12h}\left(-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2}\right)$$

výraz $(*)$ je speciálním případem obecné Richardsonovy extrapolace

$$\left.\begin{aligned} A_h &= A + Ch^k + \mathcal{O}(h^{k+1}) \\ A_{2h} &= A + C(2h)^k + \mathcal{O}(h^{k+1}) \end{aligned}\right\} \Rightarrow A + \mathcal{O}(h^{k+1}) = \frac{2^k A_h - A_{2h}}{2^k - 1}$$

- <u>optimální volba h pro výpočet derivace</u>

  - dvě chyby mají vliv na přesnost

    1) <u>chyba aproximace</u> – závisí na vzorci typicky $\mathcal{O}(h^k)$, např. $f'_0 \approx \frac{f_1 - f_0}{h} + \mathcal{O}(h)$, přesněji $\frac{hf''}{2}$

    2) <u>chyba zaokrouhlovací</u> – odhad absolutní chyby odečítání $f(x+h) - f(x)$ je $\frac{2\varepsilon|f|}{h}$ kde ε je strojové epsilon

$\Rightarrow$ optimální volba h je taková, že jsou chyby srovnatelné

$$\frac{h_{opt}|f''|}{2} \simeq \frac{2\varepsilon|f|}{h_{opt}} \Rightarrow h_{opt} \simeq 2\sqrt{\frac{|f|}{|f''|}}\sqrt{\varepsilon}$$

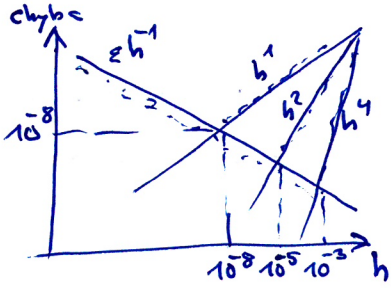
jistá charakt. škála, kde se mění f

(pro double $\sim 10^{-8}$)

podobně

$\mathcal{O}(h^2) \to h_{opt} \approx \sqrt[3]{\varepsilon} \approx 10^{-5} \Rightarrow h^2 \approx 10^{-10}$

$\mathcal{O}(h^4) \to h_{opt} \approx \sqrt[5]{\varepsilon} \approx 10^{-3} \qquad h^4 \approx 10^{-12}$



Vzorce pro numerickou derivaci a integraci na rovnoměrné síti pomocí operátorů na polynomech

- definujme následující operátory na prostoru polynomů do určitého stupně n

$$I\,p(x) = p(x) \qquad \text{identita}$$
$$E\,p(x) = p(x+h) \qquad \text{posunutí}$$
$$\Delta\,p(x) = p(x+h) - p(x) \qquad \text{dopředná diference}$$
$$\nabla\,p(x) = p(x) - p(x-h) \qquad \text{zpětná diference}$$
$$\delta\,p(x) = p(x+\tfrac{h}{2}) - p(x-\tfrac{h}{2}) \qquad \text{centrovaná diference}$$

tyto operátory jsou závislé na h, ale tuto závislost vyznačovat obvykle nebudeme

- jde o lineární operátory a standardně jsou definovány i operátory $A^2, \dots A^k$ k op. A, $A^0 = I$ a A^{-1} je operátor, pro nějž $A^{-1}(A\,p(x)) = p(x)$ pro lib. polynom (pro některé op. jako diference však není operace $A^{-1}p(x)$ jednoznačná, výsledek je určen až na konstantu)

- exponenciála je dána Taylorovým rozvojem
  např. $$e^{\Delta} = I + \Delta + \frac{\Delta^2}{2} + \dots$$
  a obdobně jiné funkce, ovšem pro polynomy stupně nejvýše n je $\Delta^m p_n(x) = \nabla^m p_n(x) = \delta^m p_n(x) = 0$ pro $m > n$
  (neboť se vždy sníží řád polynomu minimálně o 1)
  a tedy Taylorova řada je konečná

- protože $\Delta = E - I$, platí $\Delta^n = (E-I)^n = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{n}{k} E^{n-k}$
  neboli (označíme-li $x_i = x_0 + ih$, $i = 1, \dots n$ a $p_i = p(x_i)$)

$$\Delta p_i = p_{i+1} - p_i$$
$$\Delta^2 p_i = p_{i+2} - 2p_{i+1} + p_i$$
$$\Delta^3 p_i = p_{i+3} - 3p_{i+2} + 3p_{i+1} - p_i \qquad \text{atd.}$$

obdobně pro $\nabla = I - E^{-1}$, a tedy $\nabla^n = (I - E^{-1})^n = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{n}{k} E^{-k}$

$$\nabla p_i = p_i - p_{i-1}$$
$$\nabla^2 p_i = p_i - 2p_{i-1} + p_i \qquad \text{atd.}$$

- <u>derivace</u>: zaveďme $Dp(x) = p'(x)$

a pomocí Taylora máme

$$(I+\Delta)p(x) = Ep(x) = p(x+h) = p(x) + h\,p'(x) + \frac{h^2}{2!}p''(x) + \dots =$$

$$= \left(I + hD + \frac{(hD)^2}{2!} + \dots\right)p(x) = e^{hD}p(x)$$

odkud $$\boxed{hD = \ln(I+\Delta) = \Delta - \frac{1}{2}\Delta^2 + \frac{1}{3}\Delta^3 - \dots + (-1)^{k+1}\frac{\Delta^k}{k} + \dots}$$

obdobně pro zpětnou diferenci

$$e^{-hD} = I - \nabla \quad \Rightarrow \quad \boxed{hD = \nabla + \frac{\nabla^2}{2} + \frac{\nabla^3}{3} + \dots}$$

- aplikujeme-li tyto vztahy na interpolační polynom funkce $f(x)$ jdoucí body $f_i = f(x_i)$, $x_i = x_0 + ih$, a omezíme-li se na prvních několik členů, dostaneme vzorce pro přibližnou derivaci, např. dopředná konečná diference dává

$$Df_i = f'(x_i) \cong \frac{\Delta f_i}{h} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \qquad \text{chyba } \mathcal{O}(h)$$

$$\cong \frac{1}{h}\left(\Delta - \frac{\Delta^2}{2}\right)f_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{2h} =$$

$$= \frac{-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2h} \qquad \text{chyba } \mathcal{O}(h^2)$$

- pro centrovanou diferenci vezmeme

$$\delta_{2h} = \Delta + \nabla = e^{hD} - e^{-hD} = 2\sinh(hD)$$

a tedy $$hD = \sinh^{-1}\frac{\Delta+\nabla}{2} = \frac{\Delta+\nabla}{2} - \frac{1}{6}\left(\frac{\Delta+\nabla}{2}\right)^3 + \dots$$

- integrace: nyní definujeme

formální integrace přes s

$$Jp(x) = \int_x^{x+h} p(t)\,dt = h\int_0^1 E^s p(x)\,ds = h\int_0^1 e^{s\ln E}\,ds\,p(x) = h\frac{E-I}{\ln E}p(x) = \frac{h\Delta}{\ln(I+\Delta)}p(x)$$

substituce $t = x + sh$, $dt = h\,ds$ a využití $E^s p(x) = p(x+sh)$

neboli $$Jp(x) = \frac{h\Delta}{hD}p(x) = \frac{\Delta}{D}p(x) \qquad \text{a tedy} \qquad JD = DJ = \Delta$$

opět Taylorem

$$\boxed{J = \frac{h\Delta}{\ln(I+\Delta)} = h\left(I + \frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{12}\Delta^2 + \frac{1}{24}\Delta^3 - \frac{19}{720}\Delta^4 + \dots\right)}$$

trikem $\ln(I+\Delta) = \Delta(I-R)$, kde $R = \frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{3}\Delta^2 + \dots$

a $$J = \frac{h}{I-R} = h(1 + R + R^2 + \dots)$$

- opět ponecháním prvních členů máme aproximaci integrálu přes interpolační polynom dané funkce, např.

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = Jf(x)\Big|_{x_0} \cong hf_0 + \frac{h}{2}(f_1 - f_0) = \frac{h(f_1+f_0)}{2} + \mathcal{O}(h^3)$$