FAKULTA MECHATRONIKY,
INFORMATIKY A MEZIOBOROVÝCH
STUDIÍ TUL

Numerická derivace

SEM2 – LS 2023/2024

Pavel Exner, Petr Rálek
NTI, FM TUL

pavel.exner@tul.cz, petr.ralek@tul.cz

[edit: 7. dubna 2024]

Taylorův rozvoj

Připomeňme si Taylorův rozvoj funkce $f(x)$ v okolí bodu x_0.
Parametr $h > 0$ určuje vzdálenost of bodu x_0.

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + \frac{h^3}{6} f'''(x_0) + \cdots + \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(\xi^+), \tag{1}$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) - \frac{h^3}{6} f'''(x_0) + \cdots + \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(\xi^-), \tag{2}$$

kde $\xi^+ \in (x_0, x_0 + h)$ a $\xi^- \in (x_0 - h, x_0)$.
Poslední člen vyjadřuje chybu při zanedbání členů řádu n a vyšších.

Buď přímo z Taylorova rozvoje, nebo jejich vhodnou kombinací nyní odvodíme derivační vztahy založené pouze na výpočtu funkčních hodnot.

Diferenční vzorce I

Dopředná diference (FD – forward difference)
Z (1) přímo vyjádříme 1. derivaci:

$$FD(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}, \qquad f'(x_0) \approx FD(x_0) - \frac{h}{2} f''(\xi^+).$$

Zpětná diference (BD – backward difference)
Z (2) přímo vyjádříme 1. derivaci:

$$BD(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h}, \qquad f'(x_0) \approx BD(x_0) + \frac{h}{2} f''(\xi^-).$$

Vidíme, že oba vztahy jsou vzhledem k h **prvního** řádu, tedy že chyba závisí na h lineárně.

Diferenční vzorce II

Centrální diference (CD_1 – central difference)
Odečtením (2) od (1) a vyjádřením 1. derivace, dostaneme:

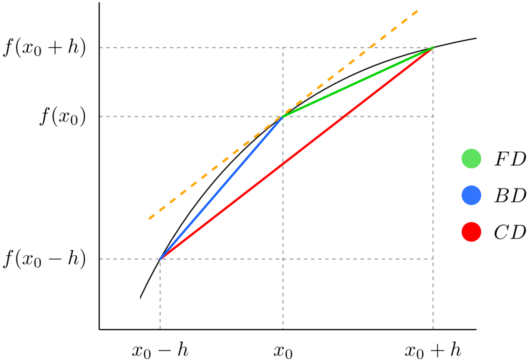
$$CD_1(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h},$$

$$f'(x_0) \approx CD_1(x_0) - \frac{h^2}{6}\Big(f'''(\xi^+) + f'''(\xi^-)\Big).$$

Tento vztah je vzhledem k h **druhého** řádu, tedy závislost chyby na h je kvadratická.

Diferenční vzorce III

Diferenční vztahy pro první derivaci můžeme interpretovat graficky, tečnu (derivaci) nahrazujeme pomocí sečen:



Pozn.: $\lim\limits_{h \to 0} FD(x_0, h) = f'(x_0)$ nám připomíná definici derivace

Chyby diferenčních vzorců I

Analyzujme chybu dopředné diference. Ta se skládá z chyby diskretizační a zaokrouhlovací

$$E = E_D + E_R.$$

Pokud víme, že 2. derivace je v okolí bodu x_0 omezená

$$\left|f''(x)\right| < M, \quad \forall x \in (x_0, x_0 + h),$$

pak je i diskretizační chyba omezená:

$$E_D = \frac{1}{2} h f''(\xi^+) < \frac{M}{2} h$$

Chyby diferenčních vzorců II

Zaokrouhlovací chyby vznikají při výpočtu v aritmetice s konečnou přesností. Předpokládejme omezenost funkce $|f(x)| < F$. Označme zaokrouhlené hodnoty symbolem $*$.

$$
\begin{aligned}
E_R &= \left| \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} - \frac{f^*(x_0+h) - f^*(x_0)}{h} \right| \\
&= \left| \frac{f(x_0+h) - f^*(x_0+h)}{h} - \frac{f(x_0) - f^*(x_0)}{h} \right| \\
&\leq \frac{1}{h} \Big(\left| f(x_0+h) - f^*(x_0+h) \right| - \left| f(x_0) - f^*(x_0) \right| \Big) \\
&\leq \frac{\epsilon}{h} \left| f(x_0+h) \right| + \frac{\epsilon}{h} \left| f(x_0) \right| \leq \frac{2\epsilon}{h} F
\end{aligned}
$$

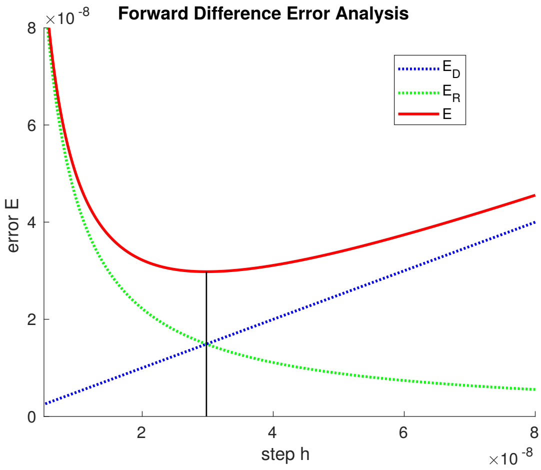
Chyby diferenčních vzorců III

Celková chyba je tedy:

$$E \leq \frac{M}{2}h + 2\epsilon F \frac{1}{h}$$

Minimum chyby
(tedy optimální volba h)
leží v bodě

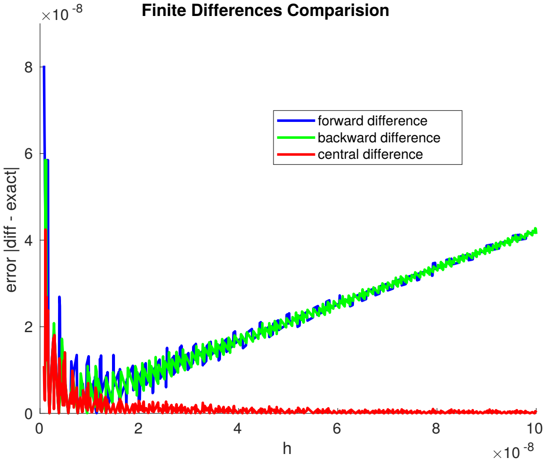
$$h_{opt} = \sqrt{\frac{2\epsilon F}{M}}$$



Chyby diferenčních vzorců IV

Numerický experiment – diskretizační × zaokrouhlovací chyba.

$$f(x) = \sin(x), \quad x_0 = 1$$



Diferenční vzorce pro 2. derivaci

Centrální diference pro derivaci 2. řádu (CD_2)
Sečtením (1) a (2) a vyjádřením 2. derivace, dostaneme:

$$CD_2(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2},$$

$$f''(x_0) \approx CD_2(x_0) - \frac{h^2}{12}\left(f^{(4)}(\xi^+) + f^{(4)}(\xi^-)\right).$$

Tento vztah je vzhledem k h **druhého** řádu, tedy závislost chyby na h je kvadratická.

Úkol

Proveďte srovnání diferenčních vzorců pro první derivaci pro

$$f(x) = \sin(x), \quad x_0 = 1.$$

- Zvolte vhodně krok h tak, abyste ověřili řád diferencí. Vykreslete vhodně do grafu.
- Zvolte vhodně krok h tak, abyste prokázali vliv zaokrouhlovací chyby. Vykreslete vhodně do grafu.