DERIVACE FUNKCE

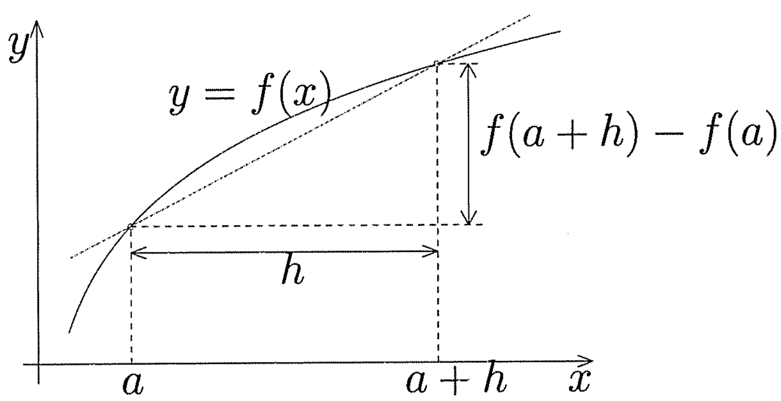
Připomeňme definici derivace reálné funkce jedné reálné proměnné.

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

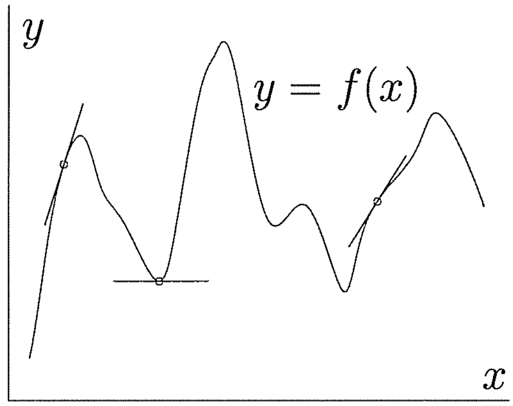
$$\lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

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.



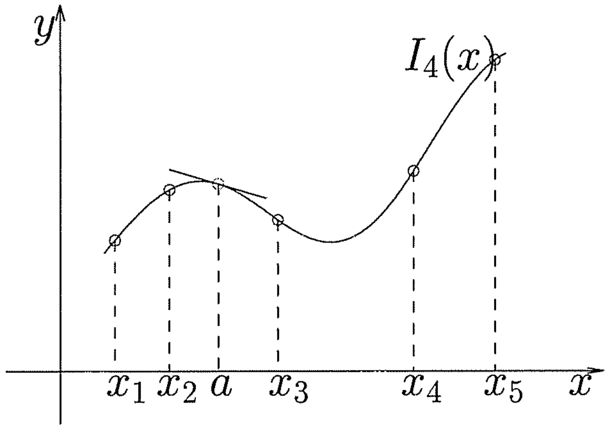
Poznámka: Pro danou funkci $f(x)$ vyjadřuje derivace $f'(x_0)$ míru „stoupání“, resp. „klesání“ v bodě x_0 .



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

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

Podobně ze druhé rovnice

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

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

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

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

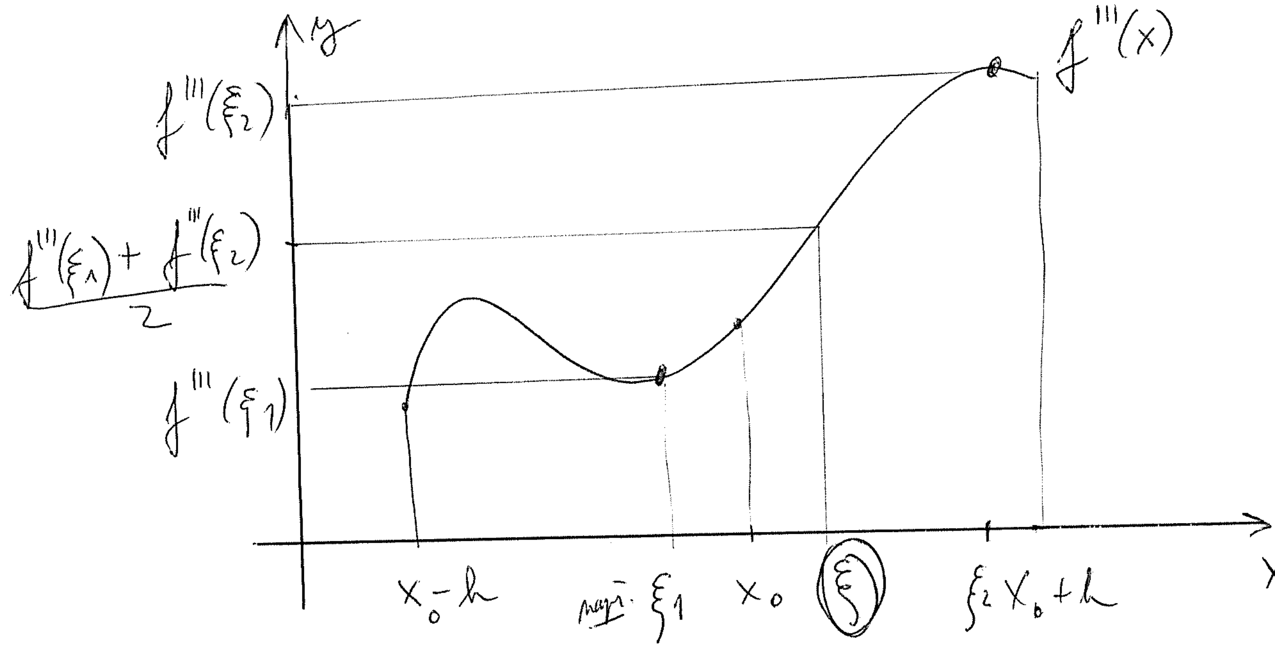
$$f(x_0-h) = f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x_0-h, x_0)$$

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 $D_C f(x_0, h)$, tzv. centrální poměrnou diferenci

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



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:

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

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

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

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 $f(x) = e^x(1-x)$ 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:

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

Nyní použijeme pravou, levou a centrální poměrnou diferenci:

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} & f(x_0), f(x_0+h) && \ldots\ldots \text{ přesné hodnoty} \\ & f^\star(x_0), f^\star(x_0+h) && \ldots\ldots \text{ vstupní hodnoty} \end{aligned}$$

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

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

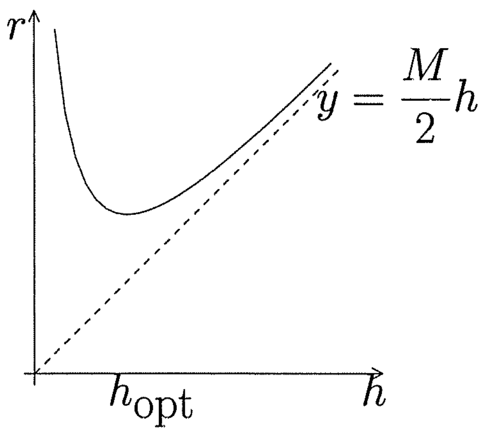
Využili jsme zde odhady

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

číslo ε může představovat např. strojovou přesnost.

Pro celkovou chybu r potom platí

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



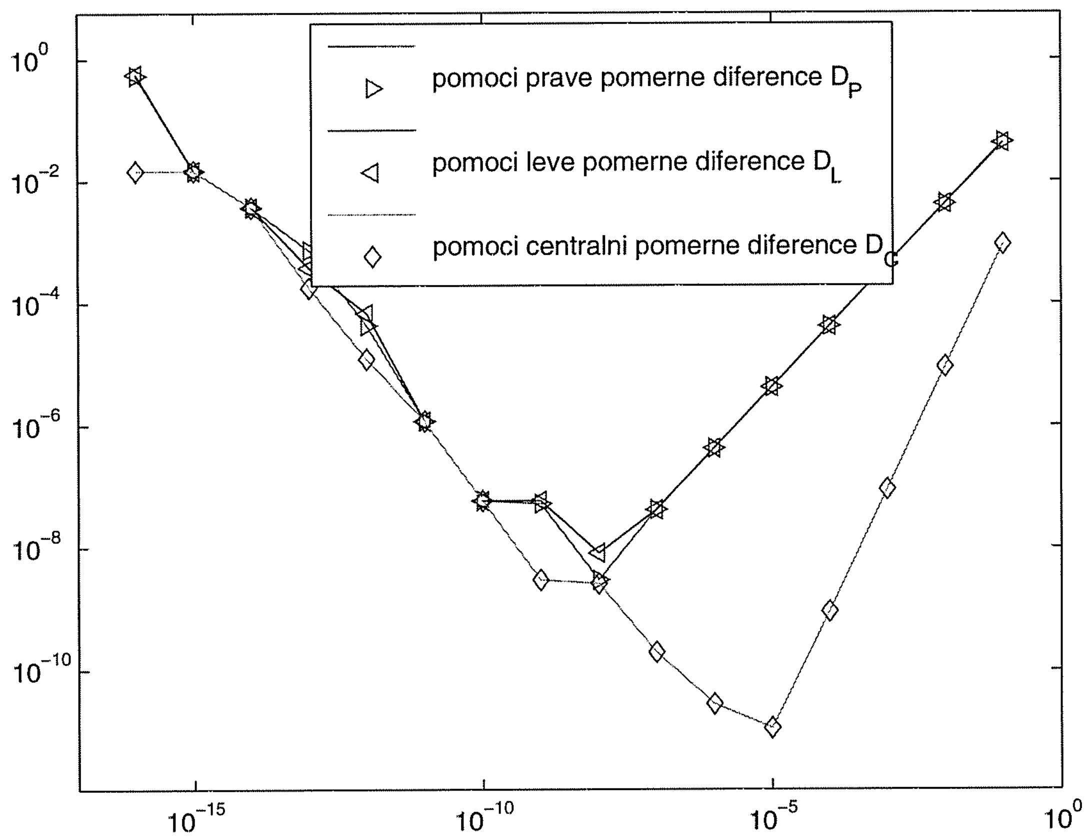
- Úloha numerického derivování je **špatně podmíněná** ! (pro zmenšující se h roste chyba)
- Lze najít optimální krok h_{opt}

Pr 1

$f(x) = \sin x$

$x_0 = 1$

$h = 10^{-16}, 10^{-15}, \dots 10^{-1}$

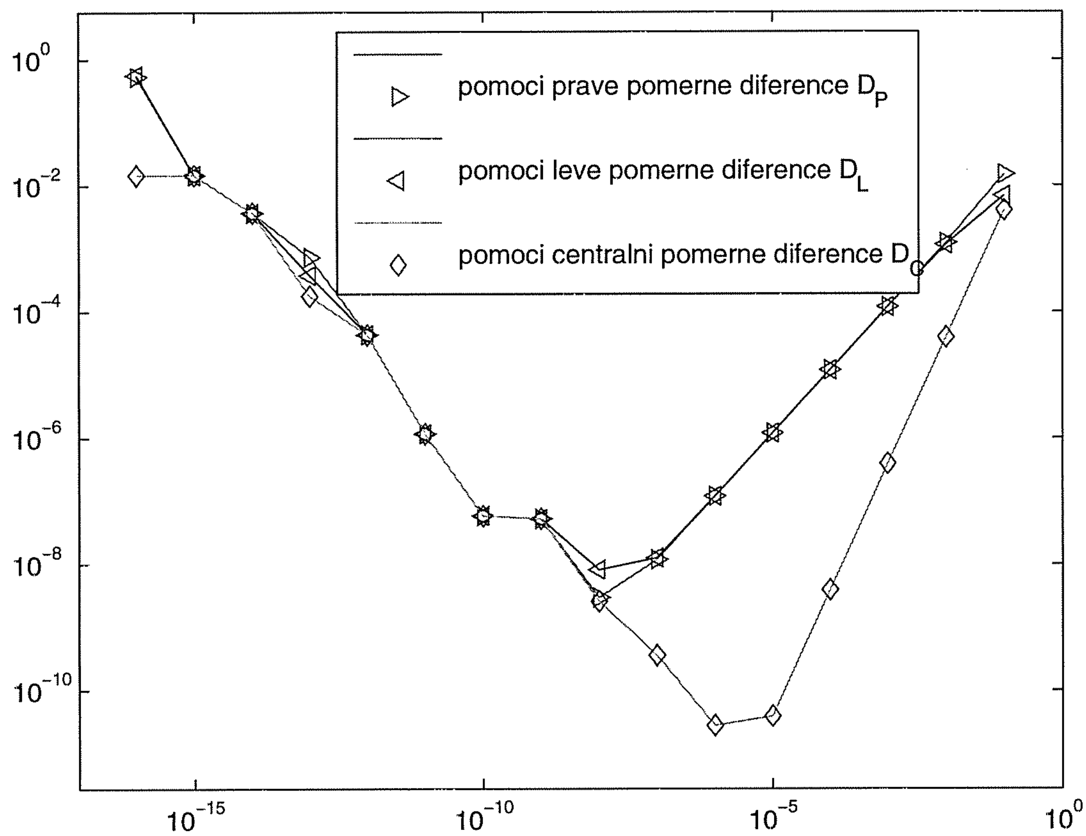


Pr 2

$f(x) = \sin \frac{1}{x}$

$x_0 = 1$

$h = 10^{-16}, 10^{-15}, \dots 10^{-1}$

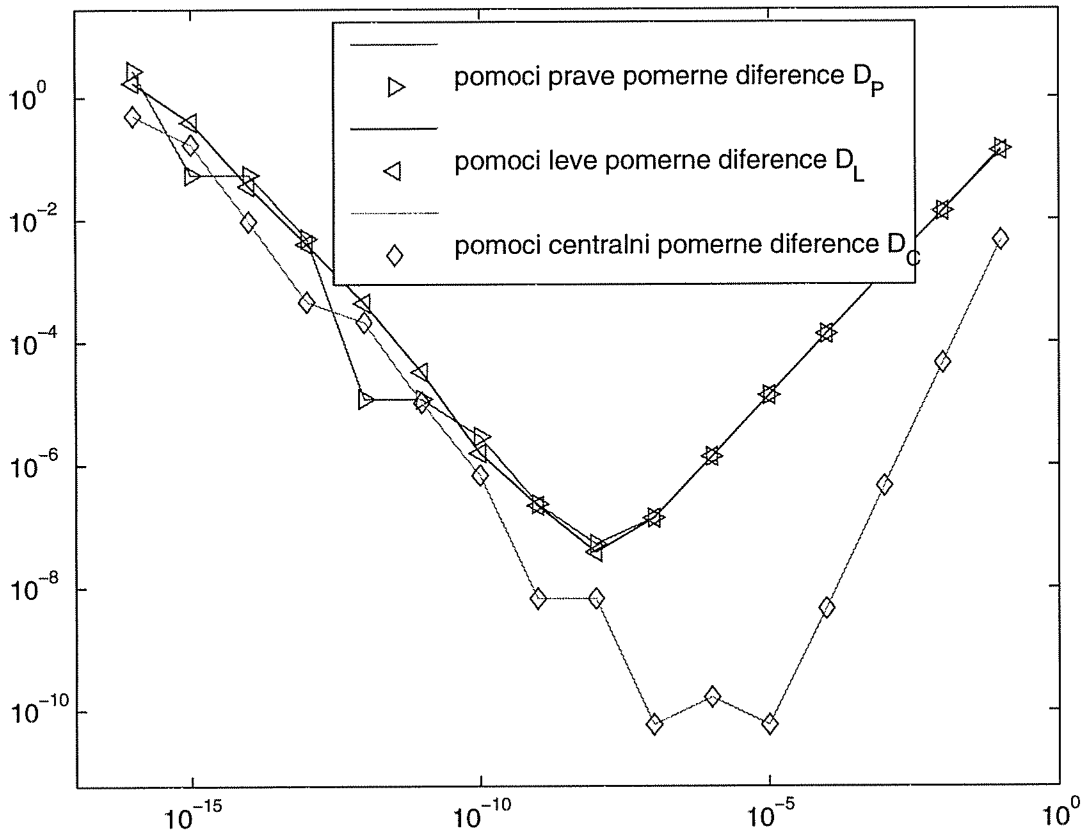


Pr 3

$f(x) = e^x$

$x_0 = 1$

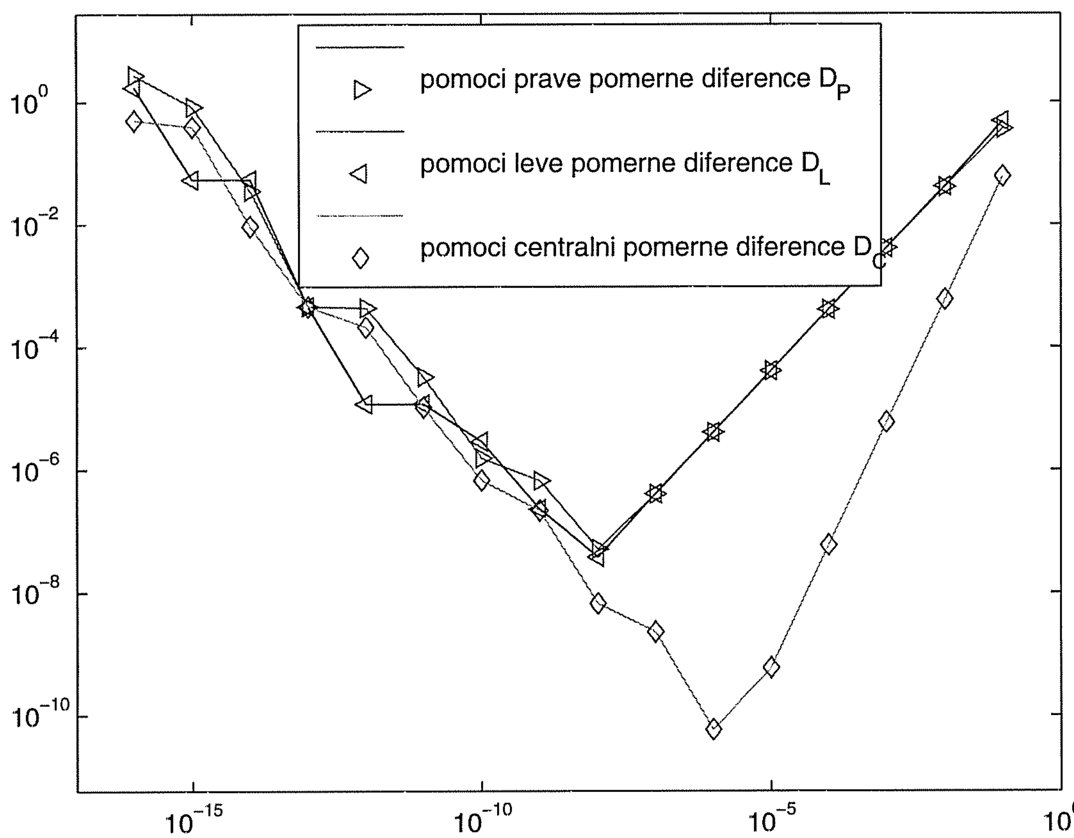
$h = 10^{-16}, 10^{-15}, \ldots 10^{-1}$



$\underline{Pr\ 4}$: $f(x) = e^{\frac{1}{x}}$

$x_0 = 1$

$h = 10^{-16}, 10^{-15}, \ldots 10^{-1}$



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

- uvedeme pro vzorec $D_c f(x_0, h)$.
- vyjdeme z Taylorova rozvoje:

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

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

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

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

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

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

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

podtržené členy chceme eliminovat
- rovnici * vynásobíme 4

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

$$D_c f(x_0, 2h) = f'(x_0) + 4\frac{h^2}{6} f'''(x_0) + O(h^4) \quad ** \text{ odečteme}$$

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

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

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

Poznámka: V názvu metody se objevuje slovo extrapolace. Je to proto, že nová hodnota derivace je lineární kombinací dvou hodnot, ovšem neleží mezi těmito hodnotami (kdyby tomu tak bylo, mluvili bychom o interpolaci).

Poznámka: Algoritmus Richardsonovy extrapolace lze samozřejmě použít opakovaně pro eliminaci chyb vyšších řádů. Tato metoda je potom velmi efektivní.

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: Dá se ukázat (viz. odvození), že pro dostetečně hladkou funkci f platí tento 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.

Pro přehlednost budeme výsledky zapisovat do tabulky:

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

Ve výpočtu jsme použili jednak 1. korekci pro eliminaci chyby řádu h^2, ale dále také 2. korekci, která eliminovala chybu řádu h^4. Vztah (4) pro 2. korekci jsme dostali podobně jako vztah (3), tj.

$$\begin{aligned} f'(x_0, h) &= D_C f(x_0, h) \; + \; c_2 h^4 \quad / \cdot 2^4 \\ f'(x_0, 2h) &= D_C f(x_0, 2h) \; + \; c_2 (2h)^4 \quad / \cdot (-1) \end{aligned}$$

$$f'(x_0) \approx \frac{2^4 f'(x_0, h) - f'(x_0, 2h)}{2^4 - 1} = \frac{16}{15} f'(x_0, h) - \frac{1}{15} f'(x_0, 2h) \tag{4}$$

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). Výraz pro 3. korekci bychom opět odvodili podobně jako vztah (4), pouze místo 4 mocniny by se v něm objevila 6 mocnina.

Hodnota hledané derivace funkce $f(x) = \ln x$ v bodě $x_0 = 3$ je **0,333332**. Pro úplnost dodejme, že přesná hodnota derivace je $f'(x) = \dfrac{1}{x}$, tj. $f'(3) = \dfrac{1}{3}$.

□

Tímto postupem jsme eliminovali chybu řádu h^2.
Tento postup můžeme aplikovat i dále.

$$D_c f(x_0, h) = f'(x_0) + K \cdot h^4$$
$$D_c f(x_0, 2h) = f'(x_0) + K \cdot 2^4 h^4$$

$/2^4$ –

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

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

Pro eliminaci chyb vyšších řádů bude v ○ tento řád.

ALGORITMUS:

Pro $s = 0, 1, 2, \dots \bar{s}$

$T_{s0} = D_c f(x_0, 2^{-s} h)$

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

$$T_{sk} = T_{s,k-1} + \frac{T_{s,k-1} - T_{s-1,k-1}}{4^k - 1}$$

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}

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

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

$$f(x_0+h) = f(x_0) + h f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + \frac{h^3}{6} f'''(x_0) + \frac{h^4}{24} f^{IV}(x_0) + \frac{h^5}{120} f^{V}(x_0) + \frac{h^6}{720} f^{VI}(x_0) + \frac{h^7}{7!} f^{(7)}(\xi_1)$$

$$\xi_1 \in (x_0, x_0+h)$$

$$f(x_0-h) = f(x_0) - h f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) - \frac{h^3}{6} f'''(x_0) + \frac{h^4}{24} f^{IV}(x_0) - \frac{h^5}{120} f^{V}(x_0) + \frac{h^6}{720} f^{VI}(x_0) - \frac{h^7}{7!} f^{(7)}(\xi_2)$$

$$\xi_2 \in (x_0-h, x_0)$$

Po odečtení:

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

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}}_{D_c f(x_0, h)} \underbrace{- \frac{1}{6} h^2 f'''(x_0)}_{c_1 h^2} \underbrace{- \frac{1}{120} h^4 f^{V}(x_0)}_{c_2 h^4} \underbrace{- \frac{h^6}{7!} f^{(7)}(\xi)}_{c_3 h^6}$$

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

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

$\xi_1 \in (x_0, x_0+h)$

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

$\xi_2 \in (x_0-h, x_0)$

$$(1) \Rightarrow f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}}_{D_P f(x_0, h)} \underbrace{- \frac{h}{2} f''(x_0)}_{c_1 h} \underbrace{- \frac{h^2}{6} f'''(x_0)}_{c_2 h^2} \underbrace{- \frac{h^3}{24} f^{IV}(x_0)}_{c_3 h^3} \underbrace{- \frac{h^4}{120} f^{(5)}(\xi_1)}_{c_4 h^4}$$

$$(2) \Rightarrow f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h}}_{D_L f(x_0, h)} + \underbrace{\frac{h}{2} f''(x_0)}_{c_1 h} \underbrace{- \frac{h^2}{6} f'''(x_0)}_{c_2 h^2} + \underbrace{\frac{h^3}{24} f^{IV}(x_0)}_{c_3 h^3} \underbrace{- \frac{h^4}{120} f^{(5)}(\xi_2)}_{c_4 h^4}$$

Vypocte hodnotu prvni derivace zadane funkce
f=sqrt(x) v bode x0=1.000000 s kroky
h=[0.8, 0.4, 0.2, 0.1]

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
0.8	0.559016994			
0.4	0.510774109	0.494693148		
0.2	0.502544810	0.499801710	0.500142281	
0.1	0.500627751	0.499988731	0.500001199	0.499998959

Presna hodnota derivace funkce f v bode x0 je 0.500000000000

Vypocte hodnotu prvni derivace zadane funkce
f=sqrt(x) v bode x0=1.000000 s kroky
h=[0.8, 0.4, 0.2, 0.1]

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
0.8	0.427050983			
0.4	0.458039892	0.489028800		
0.2	0.477225575	0.496411259	0.498872078	
0.1	0.488088482	0.498951388	0.499798098	0.499930387

Presna hodnota derivace funkce f v bode x0 je 0.500000000000

Vypocte hodnotu prvni derivace zadane funkce
f=sqrt(x) v bode x0=1.000000 s kroky
h=[0.8, 0.4, 0.2, 0.1]

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
0.8	0.690983006			
0.4	0.563508327	0.436033648		
0.2	0.527864045	0.492219763	0.510948468	
0.1	0.513167019	0.498469994	0.500553404	0.499068395

Presna hodnota derivace funkce f v bode x0 je 0.500000000000

Použití numerického derivování – příklady

- odvození metody sečen z Newtonovy metody

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

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

- 1 ze způsobů řešení okrajových úloh, tzv.

<u>Metoda konečných diferencí</u>

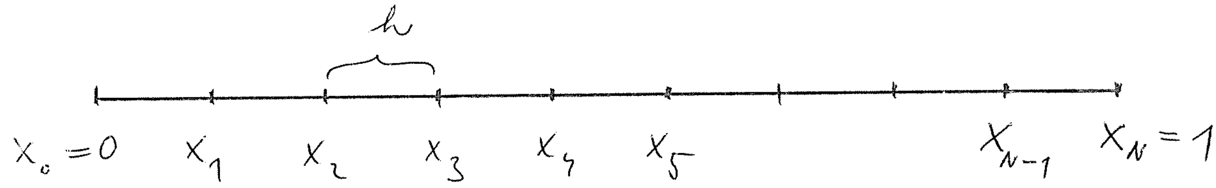
Řešme okrajovou úlohu (ODR 2. řádu)

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

q, f ... dané fce definované a spojité na $\langle 0,1\rangle$, $q(x) \geq 0$

g_0, g_1 ... daná čísla $\left(\Rightarrow \text{úloha má právě 1 klasické řešení.} \right)$

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



$S = \{ x_i = i h ; i = 0, 1, \dots N \}$ ... síť

h ... krok sítě

Přibližné řešení konstruujeme jako funkci diskrétního argumentu x_i. Přibližné řešení je značíme vektorem $U = (U_0, U_1, U_2, \dots U_{N-1}, U_N)$, kde složky U_i aproximují hodnoty $u(x_i)$ přesného řešení v uzlech sítě

Klasické řešení splňuje rovnici (*) 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 každém vnitřním bodě této sítě musí platit:

$$(**) \qquad -u''(x_i) + q(x_i)\, u(x_i) = f(x_i) \qquad i = 1, 2, \dots, N-1$$

druhou derivaci aproximujeme druhou poměrnou diferencí

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

soustavu (**) nahradíme soustavou přibližných rovností.

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

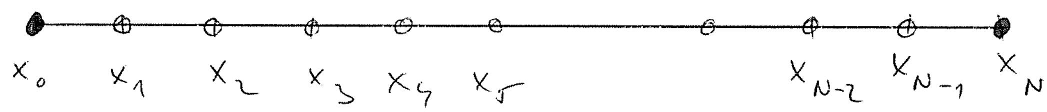
tj.

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

$$U_0 = g_0$$
$$U_N = g_N$$

soustava diferenčních rovnic

v ● Dirichlet. podmínky



neznáme hodnoty uvnitř intervalu, tj. v $x_1, x_2, \dots x_{N-1}$

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:

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

Soustava lineárních alg. rovnic $\boxed{\mathbb{A}U = \mathbb{F}}$

$\mathbb{A}$ ... symetrická, třídiagonální, pozitivně definitní (⇒ regulární)

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

$\exists!$ řešení

? 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

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

Tab. 3. Aproximace derivací v uzlech rovnoměrné sítě.

Použijeme-li např. vzorec 7, bude výsledná matice soustavy opět pásová, šíře pásu bude nyní 5