D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Numerický výpočet derivace

Taylorův rozvoj spojité funkce $y(x)$ v okolí bodu $x = a$ můžeme zapsat jako

$$y(x) = y(a) + y'(a)(x-a) + \frac{1}{2!}y''(a)(x-a)^2 + \ldots \frac{y^{[k+1]}(\xi)}{(k+1)!}(x-a)^{k+1}, \tag{1}$$

zde se zbytkem v Lagrangeově tvaru, kde ξ leží mezi x a a. Význam zbytku spočívá v tom, že s jeho využitím je rozvoj funkce neaproximativní. Není sice jasné, jak konkrétně zvolit hodnotu ξ, ale i tak můžeme zbytek prostřednictvím jeho majorizace dobře použít k odhadu přesnosti rozvoje.

Diskretizace

Diskretizované hodnoty nezávislé proměnné x označíme $x[n]$. V těchto uzlových bodech evaluujeme závislou proměnnou y, označíme přirozeně $y(x[n]) \equiv y[n]$. V rámci (ekvidistantní) diskretizace zvolme $x[n{+}1] - x[n] = \varepsilon > 0$.

Předpokládejme v dalším speciálně rozvoje jen v uzlových bodech, například

$$y(x[n] + \varepsilon) = y(x[n]) + y'(x[n])\varepsilon + \frac{1}{2}y''(x[n])\varepsilon^2 + \ldots,$$

neboli, s využitím zavedeného značení,

$$y[n{+}1] = y[n] + y'[n]\varepsilon + \frac{1}{2}y''[n]\varepsilon^2 + \ldots \tag{2}$$

Po shrnutí členů s druhou a vyšší derivacemi y do $O(\varepsilon^2) \propto \varepsilon^2$ můžeme napsat

$$y'[n] = \frac{y[n{+}1] - y[n]}{\varepsilon} + O(\varepsilon). \tag{3}$$

Tomuto vzorci se říká *jednobodová dopředná* první derivace, podle počtu a typu bodů, které jsou ve vzorci zahrnuty kromě bodu výchozího; chyba této formule je řádu ε.

Stejně tak jsme ovšem mohli napsat

$$y(x[n] - \varepsilon) = y[n] - y'[n]\varepsilon + \frac{1}{2}y''[n]\varepsilon^2 + \ldots \tag{4}$$

a byli bychom dostali

$$y'[n] = \frac{y[n] - y[n{-}1]}{\varepsilon} + O(\varepsilon), \tag{5}$$

jednobodovou zpětnou první derivaci. Podotkněme, že numerické hodnoty dopředné a zpětné derivace se obecně liší (a to v řádu chyby $O(\varepsilon)$) i pro spojitou výchozí funkci.

Chybu můžeme zmenšit, když použijeme oba rozvoje současně: přidáním druhé rovnice jsme získali jeden stupeň volnosti navíc a ze soustavy (**2**), (**4**) tak můžeme eliminovat člen s druhou derivací,

$$y'[n] = \frac{y[n{+}1] - y[n{-}1]}{2\varepsilon} + O(\varepsilon^2); \tag{6}$$

tomuto vzorci se říká *dvoubodová centrální* první derivace. Jak je vidět z tvaru zbytku, pokud bude ε malé, skutečně došlo oproti jednobodovým formulím ke zlepšení přesnosti.

Obdobným způsobem se hledají n-bodové k-té derivace. Například *dvoubodová centrální* druhá derivace se hledá opět ze soustavy (**2**), (**4**), tentokrát vyloučíme člen s první derivací a dostáváme

$$y''[n] = \frac{y[n+1] - 2y[n] + y[n-1]}{\varepsilon^2} + O(\varepsilon). \qquad (\mathbf{7})$$

Centrální vzorec nemusí být možné použít u hraničních bodů intervalu, na kterém máme funkci vyjádřenu. Jedna varianta je vrátit se zpět k příslušně orientované derivaci jednobodové, ale (z hlediska chyby) je lepší v takovém případě - například u levé hranice - vypomoci si rozvojem

$$y[n+2] = y[n] + y'[n]2\varepsilon + \frac{1}{2}y''[n]4\varepsilon^2 + O(\varepsilon^3) \qquad (\mathbf{8})$$

a ze soustavy (**2**), (**8**) opět vyloučit druhou derivaci; obdržíme

$$y'[n] = \frac{-3y[n] + 4y[n+1] - y[n+2]}{2\varepsilon} + O(\varepsilon^2). \qquad (\mathbf{9})$$

Tento vzorec se nazývá *dvoubodová dopředná první derivace.*