1. Numerický výpočet derivace

Jsou dány hodnoty funkce f ve vzájemně různých uzlech $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Hledáme k-tou derivaci funkce f, a to především v bodech $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Principiálně se tato úloha řeší strašně snadno: stačí k-krát zderivovat vztah $f(x) = L_n(x) + R_n(x)$ a dostaneme

$$f^{(k)}(x) = L_n^{(k)}(x) + R_n^{(k)}(x).$$

Zřejmě musí $k \leq n$, jinak je to nanic (zůstane $f^{(k)}(x) = R_n^{(k)}(x)$). Našim cílem je elegantně vyjádřit $L_n^{(k)}$ a $R_n^{(k)}$. K tomu je potřeba zobecnit poměrné diference i pro opakující se argumenty.

Definice 1.1. Nechť $\forall i \in \hat{n}_0$ v okolí bodu x_i existuje $f^{(k_i)}$. Potom definujeme

$$f(\underbrace{x_0, \ldots, x_0}_{k_0\text{-krát}}, \underbrace{x_1, \ldots, x_1}_{k_1\text{-krát}}, \ldots, \underbrace{x_n, \ldots, x_n}_{k_n\text{-krát}}) =$$

$$= \lim_{x_i^{(j)} \to x_i} f(x_0, x_0^{(1)}, \ldots, x_0^{(k_0-1)}, x_1, x_1^{(1)}, \ldots, x_1^{(k_1-1)}, \ldots, x_n, x_n^{(1)}, \ldots, x_n^{(k_n-1)})$$

za předpokladu, že $x_i^{(j_1)} \neq x_i^{(j_2)}$ pro $j_1 \neq j_2$.

Poznámka. S použitím (**??**) dostáváme

$$f(x_0, x_0) = \lim_{x_0^{(1)} \to x_0} f(x_0, x_0^{(1)}) = \lim_{x_0^{(1)} \to x_0} \frac{f(x_0^{(1)}) - f(x_0)}{x_0^{(1)} - x_0} = f'(x_0),$$

$$f(\underbrace{x_0, \ldots, x_0}_{k_0\text{-krát}}) = \lim_{x_0^{(j)} \to x_0} f(x_0, x_0^{(1)}, \ldots, x_0^{(k_0-1)}) = \lim_{x_0^{(j)} \to x_0} \frac{f^{(k_0-1)}(\xi)}{(k_0-1)!} = \frac{f^{(k_0-1)}(x_0)}{(k_0-1)!}.$$

Dále budeme předpokládat ekvidistantní rozmístění uzlů a omezíme se na

- 1. a 2. derivaci,
- nejnižší počty uzlů (tj. 2, resp. 3 u 1. derivace a 3 u 2. derivace),
- derivace pouze v uzlech.

Vyjděme ze vztahu

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, \frac{(x-x_0)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)} +$$

$$+(x-x_0)\ldots(x-x_n) f(x, x_0, \ldots, x_n)$$

a zaveďme do něj substituci $t = \frac{x-x_0}{h}$:

$$\left.\begin{aligned} x &= x_0 + th \\ x_i &= x_0 + ih \end{aligned}\right\} x - x_i = h(t-i) \Rightarrow x_i - x_j = h(i-j).$$

Označíme-li opět $f_i = f(x_i)$, potom

$$f(x_0+th) = \sum_{i=0}^{n} \frac{f_i}{h^n i!(i-(i+1))\ldots(i-n)} \frac{h^n t(t-1)\ldots(t-n)}{t-i} +$$

$$+h^{n+1} t(t-1)\ldots(t-n) f(x, x_0, \ldots, x_n) =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \frac{f_i}{i!(n-i)!} \frac{t(t-1)\ldots(t-n)}{t-i} + h^{n+1} t(t-1)\ldots(t-n) f(x, x_0, \ldots, x_n),$$

$$f'(x_0+th) = \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \frac{f_i}{i!(n-i)!} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{t(t-1)\ldots(t-n)}{t-i}\right] \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} +$$

$$+h^{n+1} f(x, x_0, \ldots, x_n) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[t(t-1)\ldots(t-n)] \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} +$$

$$+h^{n+1} t(t-1)\ldots(t-n) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x, x_0, \ldots, x_n).$$

Protože

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n) = \lim_{x'\to x}\frac{f(x',\,x_0,\,\ldots,\,x_n)-f(x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n)}{x'-x} = \\ = \lim_{x'\to x} f(x,\,x',\,x_0,\,\ldots,\,x_n) = f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n)$$

a $\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x}=\frac{1}{h}$, má f' po dosazení podle (**??**) tvar

$$f'(x_0+th) = \frac{1}{h}\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\frac{f_i}{i!(n-i)!}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{t(t-1)\ldots(t-n)}{t-i}\right]+ \\ +h^n\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[t(t-1)\ldots(t-n)]\cdot\frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!}+h^{n+1}\cdot t(t-1)\ldots(t-n)\cdot\frac{f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!}.$$

Pro druhou derivaci dostáváme

$$f''(x_0+th) = \frac{1}{h^2}\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\frac{f_i}{i!(n-i)!}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\left[\frac{t(t-1)\ldots(t-n)}{t-i}\right]+ \\ +h^{n-1}f(x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}[t(t-1)\ldots(t-n)]+ \\ +2h^n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[t(t-1)\ldots(t-n)]f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n)+h^{n+1}t(t-1)\ldots(t-n)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n).$$

Pro derivaci $f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n)$ podle definice platí

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n) = \lim_{x'\to x}\frac{f(x',\,x',\,x_0,\,\ldots,\,x_n)-f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n)}{x'-x}.$$

V čitateli přičteme a odečteme výraz $f(x,\,x',\,x_0,\,\ldots,\,x_n)$ a limitu roztrhneme na dvě:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n) = \lim_{x'\to x}\frac{f(x',\,x_0,\,\ldots,\,x_n,\,x')-f(x,\,x',\,x_0,\,\ldots,\,x_n)}{x'-x}+ \\ +\lim_{x'\to x}\frac{f(x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n,\,x')-f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n)}{x'-x} = \\ = \lim_{x'\to x}f(x,\,x',\,x_0,\,\ldots,\,x_n,\,x')+\lim_{x'\to x}f(x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n,\,x') = 2f(x,\,x,\,x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n).$$

Nyní už můžeme psát vzorec pro chybu f'':

$$R''_n(x_0+th) = h^{n-1}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}[t(t-1)\ldots(t-n)]\frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!}+ \\ +2h^n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[t(t-1)\ldots(t-n)]\frac{f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!}+2h^{n+1}t(t-1)\ldots(t-n)\frac{f^{(n+3)}(\xi_3)}{(n+3)!}.$$

Poznámka. Bez důkazu uveďme, že platí

$$\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}f(x,\,x_0,\,\ldots,\,x_n) = m!f(\underbrace{x,\,\ldots,\,x}_{(m+1)\text{-krát}},\,x_0,\,\ldots,\,x_n). \tag{1}$$

Dosadíme-li $n=1$ do vzorečku pro f', dostaneme

$$f'(x_0+th) = \frac{1}{h}(f_1-f_0)+h(2t-1)\frac{f''(\xi_1)}{2!}+h^2t(t-1)\frac{f'''(\xi_2)}{3!}.$$

Značme dále $(\forall i\in\hat{n}_0)(f'_i=f'(x_i))$. Po dosazení $t=0$, resp. $t=1$ do předchozího vztahu máme

$$f'_0 = \frac{f_1-f_0}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi),\ f'_1 = \frac{f_1-f_0}{h}+\frac{h}{2}f''(\xi). \tag{2}$$

Stejný postup nyní uplatníme pro $n=2$ a dostaneme

$$f'(x_0+th) = \frac{1}{2h}[f_0(2t-3)-2f_1(2t-2)+f_2(2t-1)]+ \\ +h^2(3t^2-6t+2)\frac{f'''(\xi_1)}{3!}+h^3t(t-1)(t-2)\frac{f'''(\xi_2)}{4!}, \\ f'_0 = \frac{1}{2h}(-3f_0+4f_1-f_2)+\frac{h^2}{3}f'''(\xi),$$

$$f_1' = \frac{1}{2h}(f_2 - f_0) + \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \tag{3}$$

$$f_2' = \frac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) + \frac{h^2}{3} f'''(\xi).$$

Poznámka. Porovnáním vzorců (2) a (3) zjistíme, že v případě $n = 2$ je chyba o řád menší.

Nyní do vzorce pro f'' dosadíme $n = 2$ a vyjádříme $f''(x_0)$, $f''(x_1)$, $f''(x_2)$:

$$f''(x_0 + th) = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + h(6t - 6)\frac{f'''(\xi_1)}{3!} +$$

$$+2h^2(3t^2 - 6t + 2)\frac{f^{(4)}(\xi_2)}{4!} + 2h^3 t(t-1)(t-2)\frac{f^{(5)}(\xi_3)}{5!},$$

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) - hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6} f^{(4)}(\xi_2),$$

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi),$$

$$f''(x_2) = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6} f^{(4)}(\xi_2).$$