DERIVACE FUNKCE

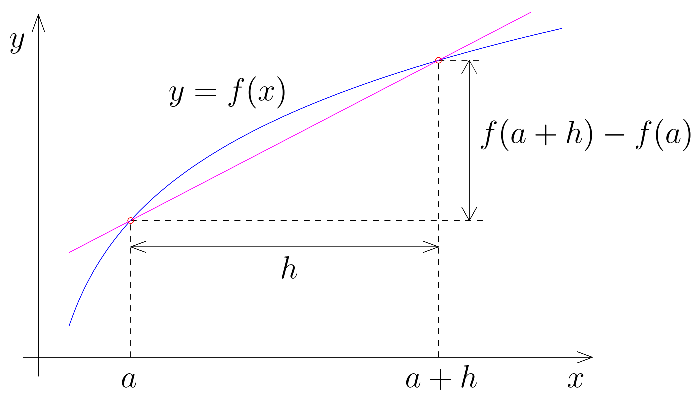
Na úvod si připomeňme definici derivace reálné funkce jedné reálné proměnné.

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

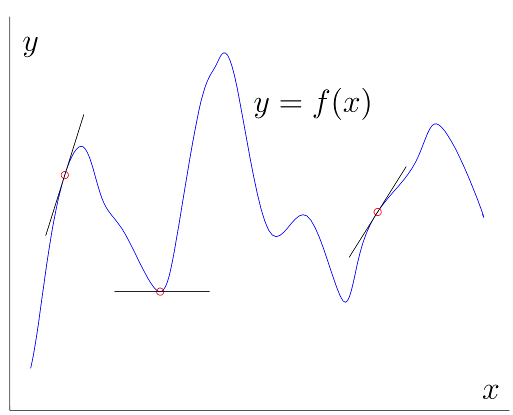
$$\lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

říkáme, že funkce $f(x)$ má v bodě a derivaci. Příslušnou limitu značíme $f'(a)$.

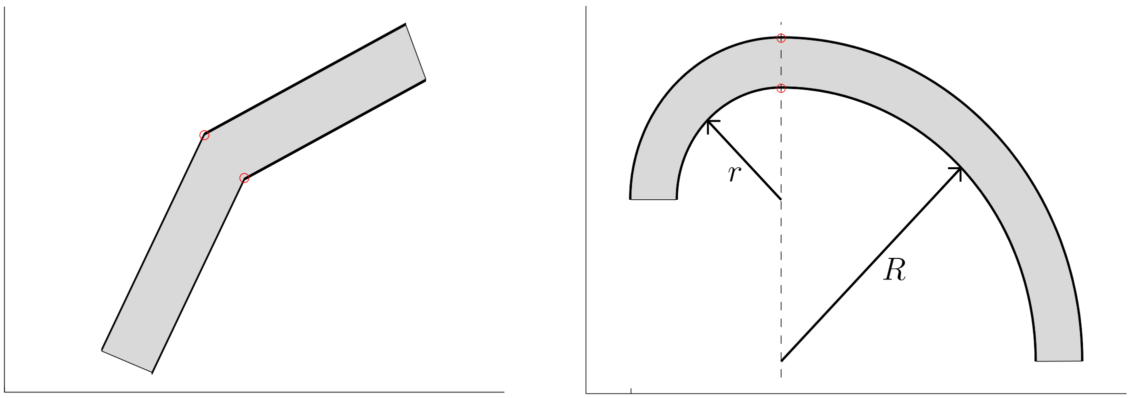
Poznámka: Geometrický význam derivace $f'(a)$ (viz obrázek) je směrnice tečny křivky dané rovnicí $y = f(x)$ v bodě a (neboť tečna v bodě a je limitní polohou sečny pro $h \to 0$). Fyzikálně značí derivace funkce $y = f(x)$, kde x je čas a y dráha pohybu, limitu z průměrné rychlosti, tedy okamžitou rychlost v čase a.



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



Poznámka: Geometrický význam druhé derivace $f''(x_0)$ souvisí s mírou „zakřivení“ grafu funce f v bodě x_0. Pro ilustraci si uveďme dva příklady špatné výstavby pomyslné silnice. V prvním případě ve vyznačených bodech vůbec neexistuje první derivace (derivace se v těchto bodech mění *skokově*).



Ve druhém případě je tvořena komunikace částmi dvou kružnic o různých poloměrech r a R. První derivace je v tomto případě spojitá i ve vyznačených bodech (říkáme, že funkce je „hladká“), nevhodnost tohoto případu je způsobena skokem v hodnotách tzv. **křivosti**, která je v případě kružnice konstantní a je rovna převrácené hodnotě poloměru (tj. $1/r$ a $1/R$). Pro úplnost dodejme, že vztah pro křivost je dán vzorcem

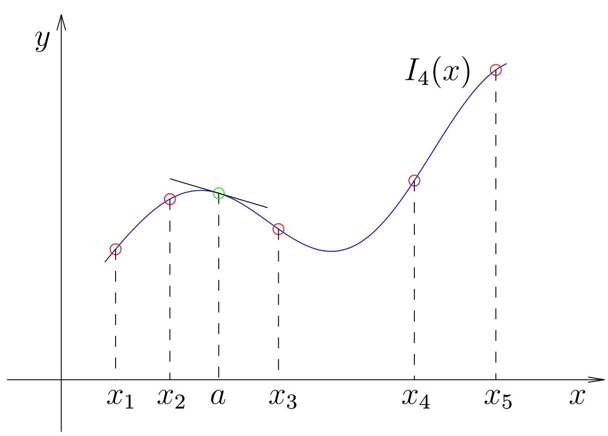
$$k = \frac{f''^2}{(1 + f'^2)^3},$$

kde f'' je druhá derivace funkce f.

Způsoby odvození vzorců pro výpočet derivace

1. <u>Odvození pomocí **interpolačního polynomu**</u>

   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

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

Uvedené vzorce jsou pro výpočet první derivace $f'(x_0)$, pro výpočet druhé derivace $f''(x_0)$ můžeme použít například vzorec, který dostaneme po sečtení vztahů:

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

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

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

Odtud vyjádříme druhou derivaci a získáme **tříbodový** vzorec pro druhou derivaci

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

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:

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

Nyní použijeme pravou, levou a centrální poměrnou diferenci:

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

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

3. $$D_C f(x_0,h) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} = \frac{e^{1,1}(1-1,1) - e^{0,9}(1-0,9)}{0,2} = \\ = \frac{-0,1e^{1,1} - 0,1e^{0,9}}{0,2} = -\frac{e^{1,1} + e^{0,9}}{2} \approx \mathbf{-2,7318} \\ \text{tj. chyba je přibližně } 0,0136$$

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 $|r_1| \le \frac{M}{2} h$.
Dále je třeba uvážit chyby měření, resp. zaokrouhlovací chyby, které označíme r_2.
Označíme-li

$$f(x_0), f(x_0+h) \quad \ldots\ldots \text{ přesné hodnoty}$$

$$f^\star(x_0), f^\star(x_0+h) \quad \ldots\ldots \text{ vstupní hodnoty}$$

Potom pro r_2 platí

$$r_2 = \underbrace{\frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}}_{\text{přesná hodnota vzorce}} - \underbrace{\frac{f^\star(x_0+h) - f^\star(x_0)}{h}}_{\text{vypočtená hodnota vzorce}}$$

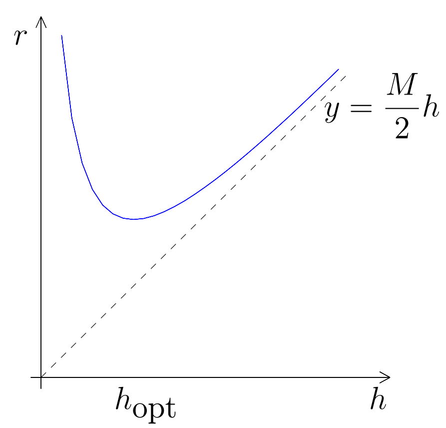
A dále

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

Využili jsme zde odhady $|f^\star(x_0+h) - f(x_0+h)| \le \varepsilon$ a $|f^\star(x_0) - f(x_0)| \le \varepsilon$, kde 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}

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

Věnujme nyní pozornost **Richardsonově extrapolaci**. Je třeba zdůraznit, že se jedná o **obecný princip**, který se nepoužívá jen u numerického výpočtu derivace. Myšlenka vychází z toho, že na základě znalosti výrazu pro rozvoj chyby využijeme dvou přibližných výsledků k získání třetího, který bude přesnější. Tento proces eliminace chyb budeme demonstrovat např. na poměrné centrální diferenci

$$f'(x_0, h) = \underbrace{\frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}}_{D_C f(x_0,h)} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi_1), \qquad \xi_1 \in (x_0 - h, x_0 + h). \tag{1}$$

Podobný vztah musí platit i v případě, že použijeme místo kroku h krok $2h$, tj.

$$f'(x_0, 2h) = \underbrace{\frac{f(x_0+2h) - f(x_0-2h)}{2 \cdot 2h}}_{D_C f(x_0,2h)} - \frac{(2h)^2}{6} f'''(\xi_2), \qquad \xi_2 \in (x_0 - 2h, x_0 + 2h). \tag{2}$$

Pro jednoduchost předpokládáme, že hodnoty $f'''(\xi_1)$ a $f'''(\xi_2)$ jsou si rovny. Vhodnou kombinací (1) a (2) dosáhneme eliminace chyby řádu h^2, tj. od čtyřnásobku rovnice (1) odečteme rovnici (2) a výsledek dělíme třemi (4-1). Dostaneme přesnější aproximaci derivace funkce f v bodě x_0:

$$f'(x_0) \approx \frac{4f'(x_0, h) - f'(x_0, 2h)}{3} = \frac{4}{3} f'(x_0, h) - \frac{1}{3} f'(x_0, 2h) \tag{3}$$

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 $f'(x) = \frac{1}{x}$, tj. $f'(3) = \frac{1}{3}$.

□