Aproximace derivací konečnými diferencemi

- Jednoduchý vzorec pro aproximaci derivace z funkčních hodnot ve dvou blízkých bodech již jistě znáte. Zde odvodíme o něco přesnější aproximaci.

- Pomocí Taylorova rozvoje

$$f\left(x+h\right)=\sum_{n}\frac{h^{n}\,f^{(n)}\left(x\right)}{n!}$$

  lze odvodit konečné diference aproximující libovolnou derivaci.

- Sestrojme například aproximaci první derivace funkce $f(x)$ v bodu x_0 z jejích hodnot na pěti ekvidistantních bodech $x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2$. (Aproximace tedy bude nejvýše 4. řádu.) Taylorův rozvoj v těchto bodech je

$$\begin{aligned}
f(x_{-2}) = &\quad f(x_0-2h) = f(x_0) - 2h\,f'(x_0) + \frac{4}{2!}h^2 f''(x_0) - \frac{8}{3!}h^3 f'''(x_0) + \frac{16}{4!}h^4 f^{(4)}(x_0) + \mathcal{O}\left(h^5\right),\\
f(x_{-1}) = &\quad f(x_0-h) = f(x_0) - h\,f'(x_0) + \frac{1}{2!}h^2 f''(x_0) - \frac{1}{3!}h^3 f'''(x_0) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x_0) + \mathcal{O}\left(h^5\right),\\
f(x_0) = &\quad f(x_0),\\
f(x_1) = &\quad f(x_0+h) = f(x_0) + h\,f'(x_0) + \frac{1}{2!}h^2 f''(x_0) + \frac{1}{3!}h^3 f'''(x_0) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x_0) + \mathcal{O}\left(h^5\right),\\
f(x_2) = &\quad f(x_0+2h) = f(x_0) + 2h\,f'(x_0) + \frac{4}{2!}h^2 f''(x_0) + \frac{8}{3!}h^3 f'''(x_0) + \frac{16}{4!}h^4 f^{(4)}(x_0) + \mathcal{O}\left(h^5\right).
\end{aligned}$$

  Pro jednoduchost dále označíme $f_0 = f(x_0),\ f_0' = f'(x_0),$ atd.

- První derivaci budeme hledat jako kombinaci funkčních hodnot s koeficienty A, B, C, D, E. Položíme

$$\begin{aligned}
f_0' &= A\,f(x_{-2}) + B\,f(x_{-1}) + C\,f(x_0) + D\,f(x_1) + E\,f(x_2)\\
&= A\left[f_0 - hf_0' + \frac{4}{2!}h^2 f_0'' - \frac{8}{3!}h^3 f_0''' + \frac{16}{4!}h^4 f_0^{(4)} + \mathcal{O}\left(h^5\right)\right]\\
&\quad + B\left[f_0 - fy_0' + \frac{1}{2!}h^2 f_0'' - \frac{1}{3!}h^3 f_0''' + \frac{1}{4!}h^4 f_0^{(4)} + \mathcal{O}\left(h^5\right)\right]\\
&\quad + C\,f_0\\
&\quad + D\left[f_0 + hf_0' + \frac{1}{2!}h^2 f_0'' + \frac{1}{3!}h^3 f_0''' + \frac{1}{4!}h^4 f_0^{(4)} + \mathcal{O}\left(h^5\right)\right]\\
&\quad + E\left[f_0 + 2hf_0' + \frac{4}{2!}h^2 f_0'' + \frac{8}{3!}h^3 f_0''' + \frac{16}{4!}h^4 f_0^{(4)} + \mathcal{O}\left(h^5\right)\right]
\end{aligned}$$

  a po srovnání koeficientů podle příslušných derivací máme

$$\begin{aligned}
f_0' = &\quad (A+B+C+D+E)\,f_0 \;+\; h\,(-2A-B+D+2E)\,f_0'\\
&+ \frac{h^2}{2!}\,(4A+B+D+4E)\,f_0'' \;+\; \frac{h^3}{3!}\,(-8A-B+D+8E)\,f_0''' \\
&+ \frac{h^4}{4!}\,(16A+B+D+16E)\,f_0^{(4)} \;+\; \mathcal{O}\left(h^5\right).
\end{aligned}\tag{1}$$

Dále zanedbáme členy 5. a vyššího řádu. Porovnáním koeficientů na levé a pravé straně (1) dostáváme soustavu pěti rovnic pro pět neznámých

$$
\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ -8 & -1 & 0 & 1 & 8 \\ 16 & 1 & 0 & 1 & 16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{h} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2}
$$

s řešením $\frac{1}{h}\left(\frac{1}{12}, \frac{-2}{3}, 0, \frac{2}{3}, \frac{-1}{12}\right)^T$, takže hledaná konečná diference bude

$$
f_i' \approx \frac{f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2}{12h}.
$$

Protože jsme v (1) zanedbali členy od 5. řádu dále a dělíme h, jedná se o aproximaci 4. řádu přesnosti.

- Pro aproximaci druhé derivace symetrickou pětibodovou diferencí použijeme v (1) na levé straně f_0'' a tedy máme zjevně soustavu se stejnou maticí jako v (2) a lišit se bude jen pravá strana, tedy řešíme

$$
\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ -8 & -1 & 0 & 1 & 8 \\ 16 & 1 & 0 & 1 & 16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{h^2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
$$

s výsledkem $\frac{1}{h^2}\left(\frac{-1}{12}, \frac{4}{3}, \frac{-5}{2}, \frac{4}{3}, \frac{-1}{12}\right)^T$, takže hledaná konečná diference bude

$$
f_0'' \approx \frac{-f_{-2} + 16f_{-1} - 30f_0 + 16f_1 - f_2}{12h^2}
$$

s přesností 3. řádu.