Corso di Laurea in Ingegneria Gestionale

Sede di Fermo

Corso di Calcolo Numerico

3 - CALCOLO NUMERICO DELLE DERIVATE

Lucio Demeio
DIISM

Introduction

Lucio Demeio
DIISM

Idea di base

- L'idea di base per generare un'approssimazione alla derivata di una funzione è di far uso del rapporto incrementale:

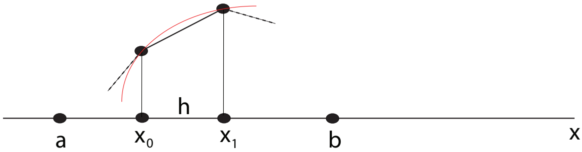
  $$f'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

  che suggerisce di approssimare la derivata con il rapporto incrementale calcolato per h molto piccolo;
- che errore commettiamo? va a zero per $h \to 0$ e come?

Calcolo dell'errore

Polinomio interpolatore

- Sia $f \in C^2[a,b]$, sia $|f''(x)| \leq M$ in $[a,b]$ e siano x_0 e $x_1 = x_0 + h$ due punti di $[a,b]$ (pensiamo pure h piccolo, con x_1 molto vicino ad x_0);



- costruiamo il polinomio di Lagrange $P_1(x)$ per x_0 ed x_1 e ricordiamo la formula per l'errore:

$$f(x) = P_1(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2!} f''(\xi(x))$$

Calcolo dell'errore

Polinomio interpolatore

$$\begin{aligned} P_1(x) &= f(x_0)\,\frac{x-x_1}{x_0-x_1} + f(x_1)\,\frac{x-x_0}{x_1-x_0} \\ &= f(x_0)\,\frac{x-(x_0+h)}{-h} + f(x_0+h)\,\frac{x-x_0}{h} \end{aligned}$$

e quindi

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0)\,\frac{x-(x_0+h)}{-h} + f(x_0+h)\,\frac{x-x_0}{h} \\ &\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2!}\,f''(\xi(x)) \quad \text{e, derivando ...} \\ f'(x) &= \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2!}\,(f''(\xi(x)))' \\ &\quad + \frac{2(x-x_0)-h}{2!}\,f''(\xi(x)) \end{aligned}$$

Calcolo dell'errore

Polinomio interpolatore

Per $x = x_0$ il termine contenente $(f''(\xi(x)))'$ si annulla e possiamo scrivere

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2!}\, f''(\xi)$$

dove $\xi \in [x_0, x_1]$. Possiamo dunque approssimare $f'(x_0)$ con il rapporto incrementale, commettendo un errore limitato da $M|h|/2$. Per $h > 0$ la formula prende il nome di **formula alle differenze finite in avanti**, mentre se $h < 0$ di **formula alle differenze finite all'indietro**. È importante notare che l'errore dipende linearmente da h, cioè possiamo scrivere

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + O(h)$$

Calcolo dell'errore

Esempio

j	x	y	FFD	BFD
0	1.0	0.92734	-0.2111	$=$
1	1.1	0.90623	0.2821	-0.2111
2	1.2	0.93444	0.2271	0.2821
3	1.3	0.95715	0.3014	0.2271
4	1.4	0.98729	0.2505	0.3014
5	1.5	1.01234	$=$	0.2505

Calcolo dell'errore

Sviluppo di Taylor

Il metodo illustrato sopra non è l'unico per arrivare all'errore, anche se è il più generale.

- Sviluppiamo $f(x_0 + h)$ in serie di Taylor al second'ordine in h:
$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h\, f'(x_0) + \frac{h^2}{2}\, f''(\xi)$$
dove $\xi \in (x_0, x_0 + h)$.
- Da qui ricaviamo semplicemente:
$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2!}\, f''(\xi)$$

Useremo entrambi i metodi a seconda del caso.

Approssimazioni generali alle derivate

Formula per $n+1$ punti

- Siano $x_0, x_1, ..., x_n$ $n+1$ punti distinti ed equispaziati, con passo di discretizzazione h, in un intervallo I. Siano $f(x_0), f(x_1), ..., f(x_n)$ i valori della funzione ai nodi.
- Utilizzando il polinomio interpolatore di Lagrange possiamo allora scrivere

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, L_{nk}(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)}{(n+1)!}\, f^{(n+1)}(\xi(x))$$

dove gli $L_{nk}(x)$ sono i polinomi già introdotti in precedenza e tali che $L_{nk}(x_k) = 1$ e $L_{nk}(x_j) = 0$ per $j \neq k$.

Approssimazioni generali alle derivate

Formula per $n+1$ punti equispaziati

- Derivando otteniamo

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, L'_{nk}(x) + \left[\frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(n+1)!}\right]' f^{(n+1)}(\xi(x)) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(n+1)!} \left(f^{(n+1)}(\xi(x))\right)'$$

- Calcolando in x_k, l'ultimo termine si annulla e si vede facilmante che

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, L'_{nk}(x_j) + \frac{h^n}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x_j))$$

detta **formula per $n+1$ punti** (equispaziati).

Approssimazioni generali alle derivate

Formule ridotte

- Le formule ad $n+1$ punti non vengono usate, perchè richiedono il calcolo della funzione in molti punti, che è dispendioso e soggetto ad errori di arrotondamento. Si preferiscono allora formula ridotte a tre o cinque punti.

Formule ridotte a tre punti

- Sia x_i uno dei nodi interni, con $1 \leq i \leq n-1$. Scriviamo esplicitamente il polinomio di Lagrange che passa per i tre nodi x_{i-1}, x_i, x_{i+1}

$$
\begin{aligned}
f(x) = {} & f(x_{i-1}) \, \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} \\
& + f(x_i) \, \frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} \\
& + f(x_{i+1}) \, \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} + \frac{h^2}{3!} \, f^{(3)}(\xi(x))
\end{aligned}
$$

Approssimazioni generali alle derivate

Formule ridotte a tre punti

- Ricordando che $x_{i-1} = x_i - h$ e $x_{i+1} = x_i + h$, abbiamo

$$
\begin{aligned}
f(x) = f(x_{i-1})\,\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{2\,h^2} \\
-f(x_i)\,\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{h^2} \\
+f(x_{i+1})\,\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{2\,h^2} + \\
\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})}{3!}\,f^{(3)}(\xi(x))
\end{aligned}
$$

Approssimazioni generali alle derivate

Formule ridotte a tre punti

Derivando:

$$
\begin{aligned}
f'(x) = f(x_{i-1})\,&\frac{2x - x_{i+1} - x_i}{2\,h^2} \\
&- f(x_i)\,\frac{2x - x_{i-1} - x_{i+1}}{h^2} \\
&+ f(x_{i+1})\,\frac{2x - x_{i-1} - x_i}{2\,h^2} \\
&+ \left[\frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+1})}{3!}\right]' f^{(3)}(\xi(x)) \\
&+ \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+1})}{3!}\,(f^{(3)}(\xi(x)))'
\end{aligned}
$$

Approssimazioni generali alle derivate

Formule ridotte a tre punti

Calcolando le derivate in x_{i-1}, x_i ed x_{i+1}, ricordando nuovamente che l'ultimo termine si annulla in tal caso, e dopo qualche semplificazione algebrica, abbiamo:

$$f'(x_{i-1}) = \frac{-3\,f(x_{i-1}) + 4\,f(x_i) - f(x_{i+1})}{2\,h} + \frac{h^2}{3}\,f^{(3)}(\xi_1)$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\,h} + \frac{h^2}{6}\,f^{(3)}(\xi_2)$$

$$f'(x_{i+1}) = \frac{f(x_{i-1}) - 4\,f(x_i) + 3\,f(x_{i+1})}{2\,h} + \frac{h^2}{3}\,f^{(3)}(\xi_3)$$

Da qui vediamo che l'errore è del second'ordine nel passo di discretizzazione h e che l'errore nella seconda formula è metà di quello della prima e della terza; ciò è dovuto al fatto di aver coinvolto punti da entrambe le parti di x_i. La formula centrale è applicabile solo ai nodi interni, $x_1, ..., x_{n-1}$, mentre per x_0 ed x_n vanno usate le altre due.

Approssimazioni generali alle derivate

Formule ridotte a tre punti

Nelle applicazioni pratiche dunque, volendo costruire un'approssimazione alla derivata di una funzione sui nodi $a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$ di un intervallo $[a, b]$ mediante le formula a tre punti, avremo:

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &\approx \frac{-3\,f(x_0) + 4\,f(x_1) - f(x_2)}{2\,h} \\
f'(x_i) &\approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\,h}, \qquad i = 1, ..., n-1 \\
f'(x_n) &\approx \frac{f(x_{n-2}) - 4\,f(x_{n-1}) + 3\,f(x_n)}{2\,h}
\end{aligned}
$$

con errore quadratico nel passo h.

Approssimazioni generali alle derivate

Formule ridotte a tre punti - derivazione con Taylor

L'approssimazione alla derivata data dalla formula centrale può essere ricavata con un semplice sviluppo in serie di Taylor al modo seguente, sotto l'ipotesi che f sia di classe C^3 nell'intervallo considerato.

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + h\, f'(x_i) + \frac{h^2}{2}\, f''(x_i) + \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(\xi')$$
$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - h\, f'(x_i) + \frac{h^2}{2}\, f''(x_i) - \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(\xi'')$$

Sottraendo la seconda equazione dalla prima otteniamo

$$\begin{aligned} f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\,h} + \frac{h^2}{3!}\,\frac{f^{(3)}(\xi') + f^{(3)}(\xi'')}{2} \\ &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\,h} + \frac{h^2}{6}\, f^{(3)}(\xi'''), \end{aligned}$$

dove l'ultima uguaglianza segue dal teorema dei valori intermedi.

Approssimazioni generali alle derivate

Formule ridotte a cinque punti

Un'altra approssimazione usata per il calcolo numerico delle derivate è quella della formula a cinque punti. La derivazione può essere fatta sia con il polinomio di Lagrange sia con lo sviluppo di Taylor. Ci limitiamo a fornire la formula centrale, lasciando allo studente il compito della sua derivazione.

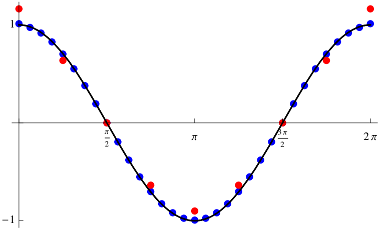
$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 8\,f(x_{i-1}) + 8\,f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{12\,h} + \frac{h^4}{30}\,f^{(5)}(\xi)$$

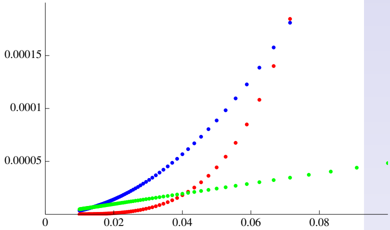
con $\xi \in (x_{i-2}, x_{i+2})$. Da notare che l'errore è del quart'ordine nel passo di discretizzazione. Questa formula fornisce pertanto un risultato più accurato di quella a tre punti, al costo però di una quantità molto maggiore di valutazioni della funzione.

Approssimazioni generali alle derivate

Confronto fra tre e cinque punti

- $f(x) = \sin x$, $f'(x) = \cos x$, $x \in [0, 2\pi]$,
- confronto nella formula a tre punti $n = 8$ ed $n = 32$;
- errore (in funzione di h) nel punto $x = 5\pi/4$ a tre punti (blu), cinque punti (rosso $\times 1000$) e differenze finite in avanti (verde $/1000$):





Approssimazioni generali alle derivate

Relazione con le differenze divise ed il simbolo Δ

1. Le formule per le approssimazioni numeriche delle derivate si possono esprimere tramite il simbolo $\Delta f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_i)$ precedentemente introdotto.
2. Differenze finite in avanti:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_j)}{h} = \frac{1}{h}\,\Delta f(x_i)$$

3. Formule a tre punti:

$$\begin{aligned} f'(x_{i-1}) &= \frac{-3\,f(x_{i-1}) + 4\,f(x_i) - f(x_{i+1})}{2\,h} \\ &= \frac{3\Delta f(x_{i-1}) - \Delta f(x_i)}{2\,h} \\ f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\,h} = \frac{\Delta f(x_i) + \Delta f(x_{i-1})}{2\,h} \end{aligned}$$

Approssimazioni generali alle derivate

Relazione con le differenze divise ed il simbolo Δ

$$
\begin{aligned}
f'(x_{i+1}) &= \frac{f(x_{i-1}) - 4\,f(x_i) + 3\,f(x_{i+1})}{2\,h} \\
&= \frac{3\Delta f(x_i) - \Delta f(x_{i-1})}{2\,h}
\end{aligned}
$$

Estrapolazione di Richardson

In generale

- L' estrapolazione di Richardson è un metodo per ricavare schemi di ordine più elevato a partire da schemi di ordine più basso.
- Come esempio introduttivo, consideriamo la formula alle differenze centrate per l'approssimazione della derivata:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2\,h} + \frac{h^2}{6}\,f'''(\xi)$$

dove $\xi \in (x_i + h, x_i - h)$.

- Utilizzando lo sviluppo di Taylor, possiamo però anche scrivere

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2\,h} + \frac{h^2}{3!}\,f'''(x_i) + \frac{h^4}{5!}\,f^{(5)}(x_i) + \ldots$$

Estrapolazione di Richardson

In generale

- Questa può essere considerata come un caso particolare di un'espressione più generale del tipo

$$M = N_1(h) + K_1\, h^2 + K_2\, h^4 + \ldots \qquad (*),$$

che deve valere per qualsiasi h e dove M è il valore vero della grandezza che si vuol approssimare (nel nostro caso $f'(x_i)$), $N_1(h)$ è l'approssimazione utilizzata, nel nostro caso

$$N_1(h) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2\, h}$$

e gli altri termini rappresentano l'errore, di cui si conosce la struttura ma, in generale, non le costanti K_1, K_2, etc.

Estrapolazione di Richardson

In generale

- Scriviamo ora la (*) per h e per $2h$:

$$M = N_1(h) + K_1\, h^2 + K_2\, h^4 + ...$$
$$M = N_1(2\, h) + K_1\, 4\, h^2 + K_2\, 16\, h^4 + ...$$

da cui, moltiplicando la prima equazione per 4 e sottraendo, otteniamo

$$3\, M = 4\, N_1(h) - N_1(2\, h) - 12\, K_2\, h^4 + ...$$

- da cui

$$M = N_2(h) - 4\, K_2\, h^4 + ...$$

con

$$N_2(h) = \frac{4\, N_1(h) - N_1(2\, h)}{3}$$

Estrapolazione di Richardson

Esempio

- Come esempio, consideriamo nuovamente la formula per la derivata

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2\,h} + K_1\,h^2 + K_2\,h^4 + \ldots$$

  e ritroviamo la formula a cinque punti

$$f'(x_i) \approx N_2(h) = \frac{f(x_{i-2}) - 8\,f(x_{i-1}) + 8\,f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{12\,h}$$

- Il vantaggio sta nella semplicità di ricavare la formula a cinque punti, che è molto lunga e tediosa da ricavare con il polinomio interpolatore di Lagrange, un po' meno con gli sviluppi di Taylor ed ancor più semplice con il metodo qui esposto

Derivate di ordine superiore

Lucio Demeio
DIISM

Derivata seconda

- Le approssimazioni numeriche per le derivate di ordine superiore al primo sono lunghe da ottenere con il polinomio interpolatore. Ci limitiamo alla derivazione della formula centrata per la derivata seconda tramite lo sviluppo di Taylor.
- Siano $x_0, x_1, ..., x_n$ i nodi equispaziati, con h il passo di discretizzazione, e sia $1 \leq i \leq n-1$, così che x_i sia un nodo interno.
- Sviluppiamo $f(x_i + h)$ ed $f(x_i - h)$ attorno ad $f(x_i)$:

Derivate di ordine superiore

Derivata seconda

- Scriviamo gli sviluppi

$$
\begin{aligned}
f(x_i+h) &= f(x_i) + h\, f'(x_i) + \frac{h^2}{2}\, f''(x_i) + \frac{h^3}{6}\, f'''(x_i) \\
&\quad + \frac{h^4}{24}\, f^{(4)}(\xi_1) \\
f(x_i-h) &= f(x_i) - h\, f'(x_i) + \frac{h^2}{2}\, f''(x_i) - \frac{h^3}{6}\, f'''(x_i) \\
&\quad + \frac{h^4}{24}\, f^{(4)}(\xi_2),
\end{aligned}
$$

dove $x_i - h < \xi_2 < x_i < \xi_1 < x_i + h$, e sommiamo membro a membro.

Derivate di ordine superiore

Derivata seconda

- Ricaviamo per la derivata seconda:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i - h) - 2\, f(x_i) + f(x_i + h)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\, f^{(4)}(\xi)$$

- Cioè

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i-1}) - 2\, f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2}$$

  con l'errore del second'ordine in h.
- Ovviamente, quest'ultima espressione vale solo per i nodi interni.