APPUNTI DI CALCOLO NUMERICO

Derivazione numerica

Introduzione

La derivazione numerica consiste nell'approssimare la derivata di una funzione in un punto. Questo può essere necessario perché non si conosce la forma analitica della funzione stessa oppure perché si richiede di determinare la derivata di un numero troppo grande di funzioni. Ad esempio la derivata prima di un sistema di mille equazioni in mille incognite, che significherebbe calcolare un milione di derivate!

Approssimazione della derivata prima

Si vuole approssimare la derivata prima di una funzione $f(x)$ in un determinato punto: $f'(x_0)$.
Scriviamo il polinomio di Taylor arrestato al primo ordine con resto di Lagrange:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(\xi)(x - x_0)^2$$

dove con ξ si indica un punto che si trova compreso fra x e x_0, ma incognito.

Sia $x = x_0 + h$ con $h > 0$, allora:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{1}{2} f''(\xi_+)h^2 .$$

Quindi la derivata prima si può approssimare come segue:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{1}{2} f''(\xi_+)h$$

dove $\frac{1}{2} f''(\xi_+)h$ rappresenta l'errore commesso con l'approssimazione.

Se trascurassimo l'errore, attenuando l'uguaglianza, potremmo porre:

$$f'(x_0) \cong \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} .$$

Questo metodo viene detto approssimazione con differenze in avanti.

Sia ora $x = x_0 - h$ con $h > 0$, allora:

$$f(x_0-h)=f(x_0)-f'(x_0)h+\frac{1}{2}f''(\xi_-)h^2$$

e quindi

$$f'(x_0)=\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}+\frac{1}{2}f''(\xi_-)h$$

dove $\frac{1}{2}f''(\xi_-)h$ rappresenta l'errore di approssimazione commesso.

Questo metodo viene detto approssimazione con differenze all'indietro.

Entrambi i metodi illustrati portano ad un errore che si comporta come h. Il metodo che segue, detto stima con differenze centrate, porta invece ad un errore che si comporta meglio. In particolare come h^2.

Scriviamo il polinomio di Taylor arrestato al secondo ordine con resto di Lagrange:

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2+\frac{1}{6}f'''(\xi)(x-x_0)^3.$$

Riscriviamolo per $x=x_0+h$ e per $x=x_0-h$:

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{1}{2}f''(x_0)h^2+\frac{1}{6}f'''(\xi_+)h^3$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-f'(x_0)h+\frac{1}{2}f''(x_0)h^2-\frac{1}{6}f'''(\xi_-)h^3$$

e sottraiamo i due polinomi:

$$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}-\frac{1}{6}\left(f'''(\xi_+)+f'''(\xi_-)\right)h^2$$

dove $\frac{1}{6}\left(f'''(\xi_+)+f'''(\xi_-)\right)h^2$ è l'errore di approssimazione che si commette.

Rimane da affrontare la scelta del parametro h.

Se si sceglie un h troppo piccolo si potrebbe incorrere nella cancellazione numerica. Se si sceglie un h troppo grande si evita la cancellazione numerica, ma le stime diventano poco accurate. si dimostra analiticamente che il miglior compromesso fra questi due estremi consiste nel porre $h \cong \sqrt{\varepsilon_m}$, dove ε_m indica la precisione di macchina.

Approssimazione della derivata seconda

Si procede in modo del tutto analogo.

Scriviamo il polinomio di Taylor arrestato al terzo ordine con resto di Lagrange:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{6} f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \frac{1}{24} f^{(4)}(\xi)(x - x_0)^4 .$$

Riscriviamolo ponendo dapprima $x = x_0 + h$ e successivamente $x = x_0 - h$:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{1}{2} f''(x_0)h^2 + \frac{1}{6} f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{24} f^{(4)}(\xi_+)h^4$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)h^2 - \frac{1}{6} f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{24} f^{(4)}(\xi_-)h^4$$

e sommiamo i due polinomi:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} + \frac{1}{24}\left(f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)\right)h^2$$

dove $\frac{1}{24}\left(f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)\right)h^2$ rappresenta l'errore commesso nell'approssimazione.

Un modo alternativo per approssimare le derivate prima e seconda di una funzione $f(x)$ in un punto è approssimarla per mezzo di una spline cubica e derivare quest'ultima. Infatti, se la spline cubica converge alla funzione, convergono anche le sue derivate prima e seconda, rispettivamente alla derivata prima e alla derivata seconda della funzione di partenza:

$$s_3^{(p)} \text{ converge a } f^{(p)} .$$