Derivazione numerica

Alvise Sommariva

Università degli Studi di Padova

28 aprile 2022

Problema. (Derivazione numerica)

Il problema della derivazione numerica consiste nell'approssimare la derivata di una funzione f in un certo punto x_0, ovvero (qualora esista)

$$f'(x_0) = Df(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}.$$

Il quoziente argomento del limite é noto come rapporto incrementale.

Nota. (Idea che non funziona)

Si potrebbe approssimare f con una successione di funzioni f_n facili da derivare e poi differenziare una certa $f_n \approx f$, valutandola nel punto x_0.

Purtroppo,

$$dist(f_n, f) \to 0 \not\Rightarrow dist(Df_n, Df) \to 0, \quad n \to +\infty.$$

che si può pure leggere come esistono f e f_n arbitrariamente "vicine", ma con derivate f' e f_n' arbitrariamente distanti, fenomeno noto come instabilità dell'operatore di derivazione (nel continuo).

Quindi non c'e' certezza che pur essendo $f' \approx f_n'$ in $[a, b]$ sia pure $f'(x_0) \approx f_n'(x_0)$ con $x_0 \in (a, b)$.

Esempio ($f_n \to f$ unif. ma non $f_n' \to f'$ unif.)

Consideriamo la successione

$$f_n(x) = \frac{1}{n}\sin(nx), \quad x \in [0,1].$$

Osserviamo che essendo $\sin(x) \in [-1,1]$ *qualora* $x \in [0,1]$ *abbiamo*

$$\frac{-1}{n} \leq f_n(x) = \frac{1}{n}\sin(nx) \leq \frac{1}{n}$$

e sicuramente, detta $f \equiv 0$ la funzione costantemente nulla abbiamo $f_n \to f$ non solo puntualmente ma anche uniformemente visto che

$$\max_{x\in[0,1]} \left|\frac{1}{n}\sin(nx) - 0\right| \leq \frac{1}{n} \to 0.$$

Osserviamo che

- *la derivata di f è la funzione costantemente nulla,*
- *la derivata di f_n è* $f_n'(x) = \cos(nx)$

Questo implica che

$$f_n \to f, \qquad \textit{uniformemente}$$

ma non è vero che

$$f_n' \to f', \qquad \textit{uniformemente}$$

in quanto

$$\max_{x\in[0,1]} |\cos(nx) - 0| = \max_{x\in[0,1]} |\cos(nx)| = 1$$

non è infinitesima.

Commento

Questo non vuol dire che se f e f_n arbitrariamente "vicine" allora le derivate f' e f_n' sono arbitrariamente distanti, e quindi possiamo sperare che sotto certe ipotesi su f, se f_n sono scelte bene e sono vicine a f, allora pure f_n' e f' sono vicine.

Ad esempio, se $[a, b]$ è un intervallo limitato e $s_{3,n}$ è un interpolante spline cubica di $f \in C^4([a, b])$, relativamente alla suddivisione generata da $x_k = a + k(b - a)/n$, $k = 0, \ldots, n$, ovvero punti equispaziati con passo $h_n = (b - a)/n$,

- *la successione di splines cubiche $\{s_{3,n}\}_n$ converge a f uniformemente,*
- *$\{s'_{3,n}\}_n$ converge a f' uniformemente.*

In effetti, esiste una costante c_1 indipendente da n tale che

$$0 \leq \max_{x \in [a,b]} |f'(x) - s'_{3,n}(x)| \leq c_1 h_n^3 \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)| = c_1 \frac{(b-a)^3}{n^3} \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

e quindi per quanto visto precedentemente e per il teorema del confronto, deduciamo la convergenza uniforme.

Definizione (Differenza in avanti)

Sia f una funzione derivabile nell'intervallo $[a, b]$. Supposto che per un fissato $h > 0$ siano $x, x + h \in [a, b]$, si definisce differenza in avanti *in x di passo h (cf. [2]).*

$$\delta_+(f, x, h) := \frac{f(x + h) - f(x)}{h}, \;\; x, x + h \in [a, b].$$

Teorema

Sia $f \in C^2([a, b])$ e che per un fissato $h > 0$ siano $x, x + h \in [a, b]$. Allora

$$\delta_+(f, x, h) := \frac{f(x + h) - f(x)}{h} = f'(x) + hf''(\xi_x)/2, \;\; \xi_x \in (x, x + h).$$

Dimostrazione.

Dalla formula di Taylor,

$$f(x + h) = f(x) + hf'(x) + h^2 f''(\xi_x)/2, \;\; \xi_x \in (x, x + h)$$

per cui riarrangiando i termini

$$f(x + h) - f(x) = hf'(x) + h^2 f''(\xi_x)/2,$$

e quindi

$$\delta_+(f, x, h) := \frac{f(x + h) - f(x)}{h} = f'(x) + hf''(\xi_x)/2, \;\; \xi_x \in (x, x + h).$$

Alcune formule di derivazione numerica: differenza in avanti

Corollario (Errore assoluto)

Essendo $h > 0$ *e*

$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} = f'(x) + hf''(\xi_x)/2, \;\; \xi_x \in (x, x+h),$$

l'errore assoluto compiuto risulta

$$\left|\frac{f(x+h)-f(x)}{h} - f'(x)\right| = h\,|f''(\xi_x)/2|, \;\; \xi_x \in (x, x+h).$$

Nota. (Convergenza)

Essendo $f \in C^2([a,b])$ *si ha* $f'' \in C([a,b])$ *e visto che* $|\cdot| \in C([a,b])$, *per il teorema di Weierstrass esiste finito*

$$M_2 = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \geq 0$$

e quindi, essendo

$$\delta_+(f,x,h) - f'(x) = hf''(\xi_x)/2$$

ricaviamo che se $x + h \in [a,b]$ *allora, visto che* $|f''(\xi_x)| \leq \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$

$$0 \leq |\delta_+(f,x,h) - f'(x)| = \frac{|hf''(\xi_x)|}{2} = \frac{h}{2}|f''(\xi_x)| \leq \frac{h}{2} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| = \frac{hM_2}{2}, \tag{1}$$

per cui, per il teorema del confronto, se $h \to 0$ *allora*

$$|\delta_+(f,x,h) - f'(x)| \to 0.$$

Nota. (Aritmetica esatta)

Il teorema dice che in aritmetica esatta, utilizzando passi h sempre più piccoli abbiamo approssimazioni sempre migliori della derivata prima, in un punto arbitrario dell'intervallo $x \in [a, b-h]$.

Nota. (Aritmetica non esatta)

Numericamente, le cose vanno in modo diverso.

La funzione f non viene sempre valutata esattamente, ed ogni volta calcoliamo invece di

$$\delta_+(f,x,h) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h},$$

un rapporto incrementale perturbato

$$\tilde{\delta}_+(f,x,h) = \frac{\tilde{f}(x+h)-\tilde{f}(x)}{h}$$

e abbiamo, sottraendo e aggiungendo $\tilde{\delta}_+(f,x,h)$,

$$\begin{aligned} |f'(x)-\tilde{\delta}_+(f,x,h)| &= |(f'(x)-\delta_+(f,x,h)) + (\delta_+(f,x,h)-\tilde{\delta}_+(f,x,h))| \\ &\leq |f'(x)-\delta_+(f,x,h)| + |\delta_+(f,x,h)-\tilde{\delta}_+(f,x,h)|. \end{aligned}$$

- *Abbiamo visto che*

$$|f'(x) - \tilde{\delta}_+(f,x,h)| \leq |f'(x) - \delta_+(f,x,h)| + |\delta_+(f,x,h) - \tilde{\delta}_+(f,x,h)|.$$

- *Se* $M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$, $x + h \in [a,b]$, *allora* $|f'(x) - \delta_+(f,x,h)| \leq \frac{M_2 h}{2}$.
- *Osserviamo che se* $\epsilon = \max\{|f(x) - \tilde{f}(x)|, |f(x+h) - \tilde{f}(x+h)|\}$, *ovvero il massimo errore compiuto nel valutare la funzione* f

$$\begin{aligned}
|\delta_+(f,x,h) - \tilde{\delta}_+(f,x,h)| &= \left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} \right| \\
&= \frac{1}{h} \left| (f(x+h) - \tilde{f}(x+h)) - (f(x) - \tilde{f}(x)) \right| \\
&\leq \frac{1}{h} \left(\left| f(x+h) - \tilde{f}(x+h) \right| + \left| f(x) - \tilde{f}(x) \right| \right) \leq \frac{2\epsilon}{h}
\end{aligned}$$

Di conseguenza

$$\begin{aligned}
|f'(x) - \tilde{\delta}_+(f,x,h)| &\leq |f'(x) - \delta_+(f,x,h)| + |\delta_+(f,x,h) - \tilde{\delta}_+(f,x,h)| \\
&\leq \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\epsilon}{h}. \qquad (2)
\end{aligned}$$

Commento (Scelta del passo h)

Il fatto che

$$|f'(x) - \tilde{\delta}_+(f, x, h)| \leq \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\epsilon}{h}.$$

dice che numericamente, se $h \to 0$ può accadere che fino ad un certo h_0 otteniamo approssimazioni della derivata in x sempre migliori, ma poi diventando per h piccolo rilevante la quantità $\frac{2\epsilon}{h}$, i risultati cominciano a peggiorare.

Siccome l'analisi viene fatta per $h \to 0$, e l'unica richiesta è che sia $x + h, x \in [a, b]$, generalmente $[a, b]$ è un intervallo con una piccola ampiezza, contenente x e possiamo pensare quindi che se la derivata seconda non varia troppo vicino a x, ovvero sia $M_2 \approx f''(x)$.

Inoltre, visto che la funzione $g(h) := \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\epsilon}{h}$ ha minimo in $h^* = \sqrt{\frac{4\epsilon}{M_2}}$, si suggerisce di non scegliere numericamente valori di h più piccoli di h^* con

$$\boxed{h^* = \sqrt{\frac{4\epsilon}{M_2}}.}$$

Esempio (1)

Derivare in $x_0 = 0$ *la funzione* $f(x) = \exp(x)$*, calcolando*

$$\delta_+(f, 0, h) = \frac{\exp(h) - \exp(0)}{h}.$$

Il valore desiderato è $f'(0) = \exp(0) = 1$*.*

Otteniamo i risultati della tabella e della figura, dove valutiamo

$$E_h(f, 0) := |\delta_+(f, 0, h) - f'(0)| = |\delta_+(f, 0, h) - 1|$$

per $h = 10^{-1}, \ldots, 10^{-26}$. Ricordiamo che $f'(x) = \exp(x)$.

Nel nostro caso, dalla definizione di numero macchina, e dal fatto che $\exp(h) \approx 1$, ci possiamo aspettare che l'errore compiuto nel valutare $\exp(h)$ sia pari alla precisione di macchina, ovvero $\epsilon = 10^{-16}$. Da $[a, b] = [0, h]$,

$$M_2 = \max_{x \in [0,h]} f^{(2)}(x) = \max_{x \in [0,h]} \exp(x) \approx \exp(0) = 1,$$

ci aspettiamo che il passo critico sia

$$h^* = \sqrt{\frac{4\epsilon}{M_2}} \approx 2 \cdot 10^{-8}$$

come confermato dagli esperimenti numerici.

h	$E_h(f,0)$	h	$E_h(f,0)$
$1.0e-01$	$5.171e-02$	$1.0e-14$	$7.993e-04$
$1.0e-02$	$5.017e-03$	$1.0e-15$	$1.102e-01$
$1.0e-03$	$5.002e-04$	$1.0e-16$	$1.000e+00$
$1.0e-04$	$5.000e-05$	$1.0e-17$	$1.000e+00$
$1.0e-05$	$5.000e-06$	$1.0e-18$	$1.000e+00$
$1.0e-06$	$5.000e-07$	$1.0e-19$	$1.000e+00$
$1.0e-07$	$4.943e-08$	$1.0e-20$	$1.000e+00$
$1.0e-08$	$6.077e-09$	$1.0e-21$	$1.000e+00$
$1.0e-09$	$8.274e-08$	$1.0e-22$	$1.000e+00$
$1.0e-10$	$8.274e-08$	$1.0e-23$	$1.000e+00$
$1.0e-11$	$8.274e-08$	$1.0e-24$	$1.000e+00$
$1.0e-12$	$8.890e-05$	$1.0e-25$	$1.000e+00$
$1.0e-13$	$7.993e-04$	$1.0e-26$	$1.000e+00$

Tabella: Valutazione dell'errore $E_h(f,0) = |\delta_+(f,0,h) - 1|$, $f(x) = \exp(x)$, per alcuni passi h. L'errore degrada a partire da circa $h = 1.0e-08$.

Alcune formule di derivazione numerica: differenza in avanti

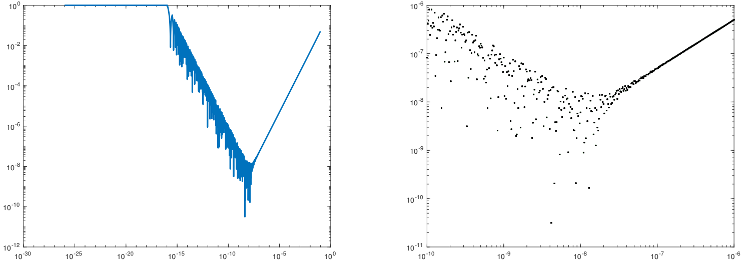

Figura: A sinistra, grafico in scala semilogaritmica dell'errore $E_h(f, 0)$, $f(x) = \exp(x)$, per alcuni passi h. A destra lo studio in scala loglog, attorno al valore $h = 10^{-8}$, in cui si vede come già vicino a $h = 10^{-7}$ incomincino a esserci problemi di convergenza.

Esempio (2)

Derivare in $x_0 = 5$ *la funzione funzione di Runge* $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$, $x \in \mathbb{R}$, *calcolando*

$$\delta_+(f, 5, h) = \frac{f(5+h) - f(5)}{h}.$$

Il valore desiderato è $f'(5) = \frac{-10}{26^2} = -0.014792899408284$*02.*

Si vede che

$$f''(x) = (8x^2)/(x^2+1)^3 - 2/(x^2+1)^2$$

e che essendo decrescente e positiva in un intorno destro di 5 ha massimo in 5, e quindi $M_2 = |f''(5)| = f''(5) \approx 0.0084$. Quindi, per $\epsilon = 10^{-16}$,

$$h^* = \sqrt{\frac{4\epsilon}{M_2}} \approx 2.2 \cdot 10^{-7}.$$

Otteniamo i risultati della tabella, dove valutiamo

$$E_h(f, 5) = |\delta_+(f, 5, h) - f'(5)|$$

per $h = 1, 10^{-1}, \ldots, 10^{-15}$. Come nel caso precedente, per $h \approx 10^{-7}$ i valori della derivata cominciano a degradare. Osserviamo, qualora utile, che $f'(x) = \frac{-2x}{(1+x^2)^2}$.

h	$E_h(f,0)$	h	$E_h(f,0)$
$1.0e+00$	$3.358e-03$	$1.0e-08$	$2.258e-10$
$1.0e-01$	$4.108e-04$	$1.0e-09$	$2.381e-09$
$1.0e-02$	$4.200e-05$	$1.0e-10$	$1.150e-08$
$1.0e-03$	$4.209e-06$	$1.0e-11$	$8.212e-07$
$1.0e-04$	$4.210e-07$	$1.0e-12$	$4.927e-07$
$1.0e-05$	$4.210e-08$	$1.0e-13$	$7.159e-05$
$1.0e-06$	$4.210e-09$	$1.0e-14$	$8.321e-04$
$1.0e-07$	$3.913e-10$	$1.0e-15$	$8.645e-03$

Tabella: A sinistra, grafico in scala semilogaritmica dell'errore $E_h(f,0)$, $f(x) = 1/(1+x^2)$, per alcuni passi h. A destra lo studio in scala loglog, si vede come già vicino a $h = 10^{-7}$ incomincino a esserci problemi di convergenza.

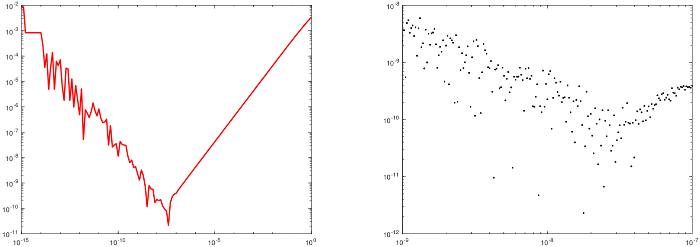

Figura: Errore $E_h(f, 0)$ per alcuni passi h. Zoom attorno al valore $h = 10^{-8}$ in cui si vede come tra $h = 10^{-7}$ e $h = 10^{-8}$ incomincino a esserci problemi di convergenza.

Definizione (Rapporto incrementale simmetrico)

Sia f una funzione derivabile nell'intervallo $[a, b]$. Supposto che per un fissato $h > 0$ siano $x - h, x + h \in [a, b]$, si definisce rapporto incrementale simmetrico in x di passo h (cf. [2]).

$$\delta_2(f, x, h) := \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \ \ x - h, x + h \in [a, b].$$

Teorema

Sia $f \in C^3([a, b])$ e che per un fissato $h > 0$ siano $x - h, x + h \in [a, b]$. Allora per un certo $\xi \in (x - h, x + h)$

$$\delta_2(f, x, h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f^{(1)}(x) + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi),$$

Corollario (Errore assoluto del rapporto incrementale simmetrico)

Sia $f \in C^3([a, b])$ e che per un fissato $h > 0$ siano $x - h, x + h \in [a, b]$. Allora per un certo $\xi \in (x - h, x + h)$

$$\left| \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f^{(1)}(x) \right| = \frac{h^2}{6} \cdot |f^{(3)}(\xi)|.$$

Dimostrazione.

Supponiamo $f \in C^3([a,b])$ *e che* $x-h, x+h \in [a,b]$. *Allora,*

- *per* $\xi_+ \in (x, x+h)$ *abbiamo*

$$f(x+h) = f(x) + hf^{(1)}(x) + h^2 \frac{f^{(2)}(x)}{2} + \frac{h^3 f^{(3)}(\xi_+)}{6},$$

- *per* $\xi_- \in (x-h, x)$ *abbiamo*

$$f(x-h) = f(x) - hf^{(1)}(x) + h^2 \frac{f^{(2)}(x)}{2} - \frac{h^3 f^{(3)}(\xi_-)}{6}.$$

Sottraendo membro a membro,

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf^{(1)}(x) + h^3 \frac{f^{(3)}(\xi_+) + f^{(3)}(\xi_-)}{6}.$$

Intendiamo di seguito scrivere piú semplicemente la quantitá

$$\frac{f^{(3)}(\xi_+) + f^{(3)}(\xi_-)}{6}.$$

Dal teorema dei valori intermedi, la funzione $f^{(3)} \in C([a, b])$ *assume in* $[x-h, x+h]$ *tutti i valori nell'intervallo*

$$\left[\min_{t \in [x-h, x+h]} (f^{(3)}(t), \max_{t \in [x-h, x+h]} (f^{(3)}(t)\right]$$

e in particolare $f^{(3)}(\xi_-)$, $f^{(3)}(\xi_+)$ *essendo* $\xi_-, \xi_+ \in [x-h, x+h]$. *Quindi pure* $\frac{f^{(3)}(\xi_+)+f^{(3)}(\xi_-)}{2}$. *Conseguentemente possiamo asserire che esiste* $\xi \in (x-h, x+h)$ *tale che*

$$f^{(3)}(\xi) = \frac{f^{(3)}(\xi_+) + f^{(3)}(\xi_-)}{2}$$

e di conseguenza

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf^{(1)}(x) + h^3 \frac{f^{(3)}(\xi_+) + f^{(3)}(\xi_-)}{6} = 2hf^{(1)}(x) + h^3 \frac{f^{(3)}(\xi)}{3}.$$

da cui dividendo ambo i membri per $2h$ *si ottiene*

$$\delta_2(f, x, h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f^{(1)}(x) + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi).$$

$\triangle$

Nota. (Convergenza)

Da

$$\delta_2(f,x,h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f^{(1)}(x) + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi)$$

abbiamo

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

Se $M_3 = \max_{x \in [a,b]} |f^{(3)}(x)|$, *essendo*

$$|f^{(3)}(\xi)| \leq \max_{x \in [a,b]} |f^{(3)}(x)| = M_3$$

$$0 \leq \left| \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f^{(1)}(x) \right| = \frac{h^2}{6} |f^{(3)}(\xi)| \leq \frac{h^2}{6} M_3 \tag{3}$$

da cui, per il teorema del confronto

$$\lim_{h \to 0} \left| \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f^{(1)}(x) \right| = 0$$

e quindi

$$\lim_{h \to 0} \delta_2(f,x,h) = f^{(1)}(x).$$

Nota. (Aritmetica esatta)

Il teorema dice che in aritmetica esatta, utilizzando passi h sempre più piccoli abbiamo approssimazioni sempre migliori della derivata prima mediante il rapporto incrementale simmetrico, in un punto arbitrario $x \in [a+h, b-h]$.

Nota. (Aritmetica non esatta)

Come nel caso precedente, le cose vanno numericamente in modo diverso.

La funzione f non viene sempre valutata esattamente, ed ogni volta calcoliamo

$$\tilde{\delta}_2(f,x,h) = \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x-h)}{2h}$$

invece di $\delta_2(f,x,h) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ e abbiamo

$$\begin{aligned} |f'(x) - \tilde{\delta}_2(f,x,h)| &= |f'(x) - \delta_2(f,x,h) + \delta_2(f,x,h) - \tilde{\delta}_2(f,x,h)| \\ &\leq |f'(x) - \delta_2(f,x,h)| + |\delta_2(f,x,h) - \tilde{\delta}_2(f,x,h)| \end{aligned} \tag{4}$$

- *Essendo*

$$|f'(x) - \tilde{\delta}_2(f,x,h)| \leq |f'(x) - \delta_2(f,x,h)| + |\delta_2(f,x,h) - \tilde{\delta}_2(f,x,h)|.$$

- *Se* $M_3 = \max_{s \in [a,b]} |f^{(3)}(s)|$ *abbiamo*

$$\left| \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f^{(1)}(x) \right| \leq \frac{h^2}{6} M_3.$$

- *Se* $\epsilon = \max\{|f(x-h) - \tilde{f}(x-h)|, |f(x+h) - \tilde{f}(x+h)|\}$ *ovvero è il massimo errore compiuto nel valutare la funzione* f*, dalla disuguaglianza triangolare,*

$$\begin{aligned}
|\delta_2(f,x,h) - \tilde{\delta}_2(f,x,h)| &= \left| \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x-h)}{2h} \right| \\
&\leq \frac{1}{2h} \left| (f(x+h) - \tilde{f}(x+h)) - (f(x-h) - \tilde{f}(x-h)) \right| \\
&\leq \frac{1}{2h} \left(\left| f(x+h) - \tilde{f}(x+h) \right| + \left| f(x-h) - \tilde{f}(x-h) \right| \right) \\
&\leq \frac{\epsilon}{2h} + \frac{\epsilon}{2h} = \frac{\epsilon}{h} \qquad (5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|f'(x) - \tilde{\delta}_2(f,x,h)| &\leq |f'(x) - \delta_2(f,x,h)| + |\delta_2(f,x,h) - \tilde{\delta}_2(f,x,h)| \\
&\leq \frac{h^2}{6} M_3 + \frac{\epsilon}{h}. \qquad (6)
\end{aligned}$$

Nota. (Scelta del passo h)

Siccome l'analisi viene fatta per $h \to 0$, e l'unica richiesta è che sia $x+h, x-h \in [a,b]$, generalmente possiamo pensare ad $[a,b]$ come ad un intervallo di piccola ampiezza e contenente x al suo interno.

Di conseguenza che se la derivata terza non varia troppo vicino a x, sia $M_2 \approx |f^{(3)}(x)|$.

In particolare, visto che la funzione

$$g_2(h) := \frac{h^2}{6} M_3 + \frac{\epsilon}{h}$$

ha minimo in

$$\boxed{h^* = \sqrt[3]{\frac{3\epsilon}{M_3}},}$$

si suggerisce di non scegliere numericamente valori di h più piccoli di h^*.

Esempio (1)

Derivare numericamente in $x_0 = 0$ *la funzione* $f(x) = \exp(x)$*, calcolando*

$$\delta_2(f, 0, h) = \frac{f(0+h) - f(0-h)}{2h} = \frac{\exp(h) - \exp(-h)}{2h}.$$

Il valore desiderato è $f'(0) = \exp(0) = 1$*.*

Otteniamo i risultati della tabella e della figura, dove valutiamo

$$E_h(f, 0) = |\delta_2(f, 0, h) - 1|$$

per $h = 10^0, \ldots, 10^{-25}$, che evidenziano un degradamento attorno a 10^{-6}.

In effetti, posto $\epsilon = 10^{-16}$, visto che $M_3 \approx 1$, abbiamo che

$$h^* = \sqrt[3]{\frac{3\epsilon}{M_3}} \approx 6.7 \cdot 10^{-6}.$$

Verifichiamo la stima per valori di h sotto la soglia critica h^*.
Per $h = 10^{-4}$, abbiamo

$$|\delta_2(f, x, h) - f'(x)| = |h^2 f^{(3)}(\xi)|/6 \approx (10^{(-4)})^2 \cdot 1/6 \approx 1.667 \cdot 10^{-9}.$$

coerente coi risultati trovati.

h	$E_h(f,0)$	h	$E_h(f,0)$
$1.0e+00$	$1.752e-01$	$1.0e-13$	$2.442e-04$
$1.0e-01$	$1.668e-03$	$1.0e-14$	$7.993e-04$
$1.0e-02$	$1.667e-05$	$1.0e-15$	$5.471e-02$
$1.0e-03$	$1.667e-07$	$1.0e-16$	$4.449e-01$
$1.0e-04$	$1.667e-09$	$1.0e-17$	$1.000e+00$
$1.0e-05$	$1.210e-11$	$1.0e-18$	$1.000e+00$
$1.0e-06$	$2.676e-11$	$1.0e-19$	$1.000e+00$
$1.0e-07$	$5.264e-10$	$1.0e-20$	$1.000e+00$
$1.0e-08$	$6.077e-09$	$1.0e-21$	$1.000e+00$
$1.0e-09$	$2.723e-08$	$1.0e-22$	$1.000e+00$
$1.0e-10$	$8.274e-08$	$1.0e-23$	$1.000e+00$
$1.0e-11$	$8.274e-08$	$1.0e-24$	$1.000e+00$
$1.0e-12$	$3.339e-05$	$1.0e-25$	$1.000e+00$

Tabella: Valutazione dell'errore $E_h(f,0)$, $f(x) = \exp(x)$, per alcuni passi h. L'errore sembra degradare a partire da circa $h = 1.0e-06$.

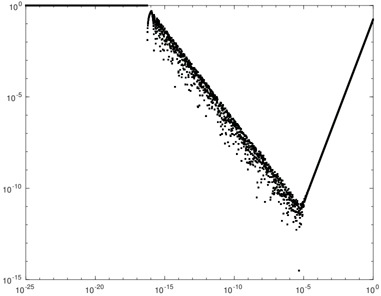

Figura: Errore $E_h(f, 0)$, con $f(x) = \exp(x)$, per alcuni passi h. Si vede, partendo da destra, come l'errore compiuto sia una funzione decrescente al diminuire di h fino a 10^{-5} (e non 10^{-6} come dice la tabella), dopo di che l'andamento, pur meno prevedibile, è essenzialmente crescente, fornendo errori tendenzialmente maggiori al diminuire di h.

Esempio (2)

Derivare numericamente in $x_0 = 5$ *la funzione funzione di Runge* $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$, $x \in \mathbb{R}$, *calcolando*

$$\delta_2(f, 5, h) = \frac{f(5+h) - f(5-h)}{2h}.$$

Il valore desiderato è $f'(5) = -0.01479289940828402$.

Dopo qualche conto, $f^{(3)}(5) \approx -6.302300339623963e-03$ e quindi $M_3 \approx 6.31 \cdot 10^{-3}$. Ne consegue che posto $\epsilon = 10^{-16}$, $h^* = \sqrt[3]{\frac{3\epsilon}{M_3}} \approx 3.7 \cdot 10^{-5}$.

- Nella tabella, valutiamo $E_h(f, 5) = |\delta_2(f, 5, h) - f'(5)|$ per $h = 1, 10^{-1}, \ldots, 10^{-15}$.
- da $|\delta_2(f, x, h) - f'(x)| = |h^2 f^{(3)}(\xi)|/6$, ci aspettiamo un errore

$$E_h(f, 5) \approx \frac{6 \cdot 10^{-3} h^2}{6} = 10^{-3} h^2.$$

- Ad esempio, per $h = 10^{-4}$ la stima offre $1 \cdot 10^{-11}$ molto prossima al valore numerico effettivo di $1.050e-11$.
- Posto $\epsilon = 10^{-16}$, visto che $h^* \approx 3.7 \cdot 10^{-5}$, e in effetti per $h \leq h^*$ i valori della derivata degradano.

Rapporto incrementale simmetrico: esempio 2

h	$E_h(f,0)$	h	$E_h(f,0)$
$1.0e+00$	$1.105e-03$	$1.0e-08$	$1.211e-10$
$1.0e-01$	$1.051e-05$	$1.0e-09$	$1.088e-09$
$1.0e-02$	$1.050e-07$	$1.0e-10$	$1.150e-08$
$1.0e-03$	$1.050e-09$	$1.0e-11$	$1.273e-07$
$1.0e-04$	$1.050e-11$	$1.0e-12$	$4.927e-07$
$1.0e-05$	$1.293e-13$	$1.0e-13$	$2.455e-06$
$1.0e-06$	$1.458e-12$	$1.0e-14$	$1.219e-04$
$1.0e-07$	$2.505e-11$	$1.0e-15$	$8.321e-04$

Tabella: Valutazione dell'errore $E_h(f,5)$, con $f(x) = 1/(1+x^2)$, per alcuni passi h. L'errore degrada a partire da circa $h = 1.0e-05$.

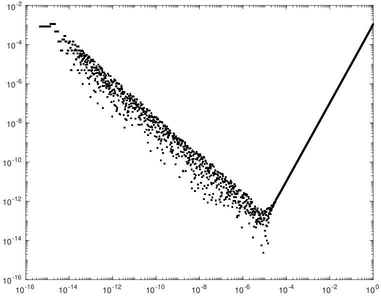

Figura: Errore $E_h(f, 5)$, con $f(x) = 1/(1 + x^2)$, per alcuni passi h. Si vede, partendo da destra, come l'errore compiuto sia una funzione decrescente al diminuire di h fino a 10^{-5}, dopo di che l'andamento, pur meno prevedibile, è essenzialmente crescente, fornendo errori tendenzialmente maggiori al diminuire di h.

Bibliografia I

- K. Atkinson, *Introduction to Numerical Analysis*, Wiley, 1989.
- Wikipedia, Finite Difference
- Wikipedia, Numerical Differentiation