Derivazione numerica

Alvise Sommariva

Università degli Studi di Padova

23 maggio 2023

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)

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

Il quoziente argomento del limite é noto come rapporto incrementale.

Nota. (Idea che non funziona)

Si potrebbe approssimare $f \in C^1([a,b])$ con una funzione $p \in C^1([a,b])$ facile da derivare e poi approssimare $f^{(1)}(x_0)$ con $p^{(1)}(x_0)$, per $x_0 \in (a,b)$.

In generale questa non é una buona idea, perché se $p \approx f$ non é detto che $p^{(1)} \approx f^{(1)}$.

Esempio

Consideriamo la funzione

$$f(x_0) = x + \frac{1}{10^{16}} \sin(10^{16}\, x), \quad x \in [0,1].$$

Si vede subito che $p(x) = x$ approssima bene $f(x_0)$, in quanto

$$\|f - g\|_\infty = \max_{x \in [0,1]} |x + \frac{1}{10^{16}} \sin(10^{16}\, x) - x| = \max_{x \in [0,1]} |\frac{1}{10^{16}} \sin(10^{16}\, x)| \leq \frac{1}{10^{16}} = 10^{-16}.$$

D'altro canto

$$\|f^{(1)} - g^{(1)}\|_\infty = \max_{x \in [0,1]} |1 + \cos(10^{16} x) - 1| = \max_{x \in [0,1]} |\cos(10^{16} x)| = |\cos(10^{16} \cdot 0)| = 1.$$

Alcune formule di derivazione numerica: differenza in avanti

Definizione (Differenza in avanti)

Sia f una funzione derivabile nell'intervallo $[a, b]$. Supposto che per un fissato $h > 0$ siano $x_0, x_0 + h \in [a, b]$, si definisce differenza in avanti in x di passo h (cf. [2]).

$$\boxed{\delta_+(f, x_0, h) := \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}, \ x_0, x_0 + h \in [a, b].}$$

Teorema

Sia $f \in C^2([a, b])$ e che per un fissato $h > 0$ siano $x_0, x_0 + h \in [a, b]$. Allora

$$\boxed{\delta_+(f, x_0, h) := \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f'(x_0) + hf''(\xi_{x_0})/2, \quad \xi_{x_0} \in (x_0, x_0 + h).}$$

Dimostrazione.

Dalla formula di Taylor,

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + h^2 f''(\xi_{x_0})/2, \quad \xi_{x_0} \in (x_0, x_0 + h)$$

per cui riarrangiando i termini

$$f(x_0 + h) - f(x_0) = hf'(x_0) + h^2 f''(\xi_{x_0})/2,$$

e quindi

$$\delta_+(f, x_0, h) := \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f'(x_0) + hf''(\xi_{x_0})/2, \quad \xi_{x_0} \in (x_0, x_0 + h).$$

Essendo $h > 0$ e

$$\delta_+(f, x_0, h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f'(x_0) + \frac{f''(\xi_{x_0})}{2}, \;\; \xi_{x_0} \in (x, x+h),$$

l'errore assoluto compiuto risulta

$$|\delta_+(f, x_0, h) - f'(x_0)| = \left| \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \right| = h\, \frac{|f''(\xi_{x_0})|}{2}, \;\; \xi_{x_0} \in (x, x+h). \quad (1)$$

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, visto che la composizione di funzioni continue é continua, esiste finito

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

necessariamente da (1)

$$0 \leq |\delta_+(f, x_0, h) - f'(x_0)| = \frac{h}{2}|f''(\xi_{x_0})| \leq \frac{h}{2} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)| = \frac{hM_2}{2}, \quad (2)$$

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

$$|\delta_+(f, x_0, h) - f'(x_0)| \to 0.$$

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 $x_0 \in (a, b)$, ammesso che pure $x_0 + h \in (a, b)$.

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

$$\delta_+(f, x_0, h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h},$$

un rapporto incrementale perturbato

$$\tilde{\delta}_+(f, x_0, h) = \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0)}{h}$$

e questo come crea problemi numerici, di fatto non suggerendo l'utilizzo in aritmetica non esatta di passi h troppo piccoli, contrariamente a quanto detto dalla convergenza teorica.

Teorema (Stima errore differenze in avanti perturbate)

Sia $f \in C^2([a,b])$ e supponiamo $x, x+h \in (a,b)$. Allora posto

$$\tilde{\delta}_+(f, x_0, h) = \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0)}{h}$$

$$\epsilon = \max(|f(x_0) - \tilde{f}(x_0)|, |f(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0 + h)|)$$

risulta

$$|f'(x_0) - \tilde{\delta}_+(f, x_0, h)| \quad \leq \quad \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\epsilon}{h}. \tag{3}$$

dove

$$M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f^{(2)}(x)|$$

Nota.

Si osservi che nel precedente teorema,

- *per h non sufficientemente piccolo, la parte rilevante dell'errore é dovuta a $\frac{M_2 h}{2}$ (si pensi al caso in cui $M_2 \approx 1$, $\epsilon = 10^{-16}$, $h = 10^{-4}$);*
- *per h sufficientemente piccolo, la parte rilevante dell'errore é dovuta al termine $\frac{2\epsilon}{h}$ (si pensi al caso in cui $M_2 \approx 1$, $\epsilon = 10^{-16}$ ma $h = 10^{-20}$).*

Commento (Scelta del passo h)

- *Il fatto che*
$$|f'(x_0) - \tilde{\delta}_+(f, x_0, h)| \leq \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\epsilon}{h}.$$
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 $x_0, x_0 + h \in [a, b]$, 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 $M_2 \approx f''(x_0)$.*
- *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*

$$\boxed{h^* = \sqrt{\frac{4\epsilon}{M_2}} \approx \sqrt{\frac{4\epsilon}{f''(x_0)}} \qquad (4)}$$

dove x_0 é il punto in cui si intende approssimare la derivata.

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 $f'(0) = \exp(0) = 1$*.*

- Nel nostro caso, dalla definizione di numero macchina, e dal fatto che $\exp(h) \approx \exp(0) = 1$, ci possiamo aspettare, in virtú delle stime sull'errore di arrotondamento, che l'errore relativo compiuto nel valutare $\exp(h)$ sia pari alla precisione di macchina, ovvero $\epsilon = 10^{-16}$.
- Da (4) per $x_0 = 0$, si ha

$$h^* \approx \sqrt{\frac{4\epsilon}{f''(0)}} \approx 2 \cdot 10^{-8}$$

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 $h = 1.0e-08$.

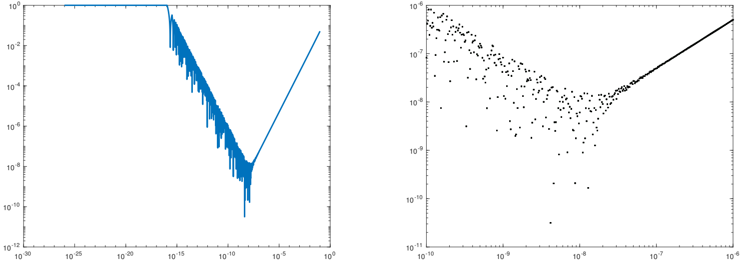

Figura: A sinistra, grafico in scala semilogaritmica dell'errore $E_h(f,0)$, $f(x) = \exp(x)$, per alcuni passi h. A destra lo studio in scala loglog, attorno al valore $h = 10^{-8}$, in cui si vede come già vicino a $h = 10^{-7}$ incomincino a esserci problemi di convergenza.

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 $f'(5) = \frac{-10}{26^2} = -0.01479289940828402$.

- Si vede che
$$f''(x) = (8x^2)/(x^2+1)^3 - 2/(x^2+1)^2$$
e quindi $f''(5) \approx 0.0084$. Stimando $\epsilon \approx 10^{-16}$ (pensare alla stima degli errori di arrotondamento!), abbiamo da (4)
$$h^* \approx \sqrt{\frac{4\epsilon}{f''(5)}} \approx 2.2 \cdot 10^{-7}.$$
- 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.

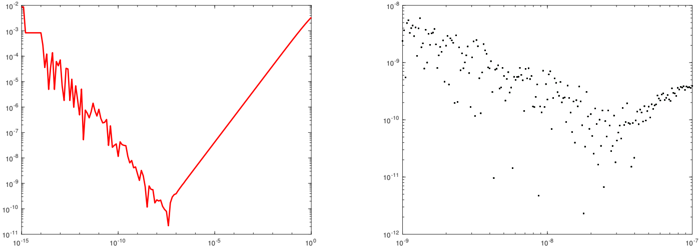

Figura: Errore $E_h(f,0)$ per alcuni passi h. Zoom attorno al valore $h = 10^{-8}$ in cui si vede come tra $h = 10^{-7}$ e $h = 10^{-8}$ incomincino a esserci problemi di convergenza.

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]).

$$\boxed{\delta_2(f, x_0, h) := \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}, \; x - h, x + h \in [a, b].}$$

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 $\xi \in (x - h, x + h)$

$$\boxed{\delta_2(f, x_0, h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = f^{(1)}(x) + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi),}$$

Corollario (Convergenza del rapporto incrementale simmetrico)

Sia $f \in C^3([a, b])$. Allora

$$\boxed{\lim_{h \to 0} \delta_2(f, x_0, h) = f'(x_0).}$$

Alcune formule di derivazione numerica: rapporto incrementale simmetrico

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 $x_0 \in [a+h, b-h]$.

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*

$$\tilde{\delta}_2(f, x_0, h) = \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0 - h)}{2h}$$

invece di $\delta_2(f, x_0, h) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$.
Questo, similmente a quanto visto per la differenza in avanti, di fatto crea numericamente problemi rispetto a quanto ci si puó aspettare dalla teoria.

Teorema (Stima errore differenze in avanti perturbate)

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

$$\tilde{\delta}_2(f, x_0, h) = \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0-h)}{2h}$$

$$\epsilon = \max(|f(x_0) - \tilde{f}(x_0)|, |f(x_0+h) - \tilde{f}(x_0+h)|)$$

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

$$|f'(x_0) - \tilde{\delta}_2(f, x_0, h)| \quad \leq \quad \frac{h^2}{6} M_3 + \frac{\epsilon}{h}. \tag{5}$$

Nota.

Con qualche conto si vede che, similmente al caso delle differenze in avanti, non é bene scegliere passi "h" troppo piccoli, ovvero inferiori a

$$h^* = \sqrt[3]{\frac{3\epsilon}{M_3}} \approx \sqrt[3]{\frac{3\epsilon}{|f^{(3)}(x_0)|}}.$$

Esempio (1)

Derivare numericamente in $x_0 = 0$ la funzione $f(x_0) = \exp(x)$, 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 $M_3 \approx f(3)(0) = \exp(0) = 1$, 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

$$|\delta_2(f, x_0, h) - f'(x_0)| = |h^2 f^{(3)}(\xi)|/6 \approx (10^{(-4)})^2 \cdot 1/6 \approx 1.667 \cdot 10^{-9}.$$

coerente coi risultati trovati.

Rapporto incrementale simmetrico: esempio 1

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 $h = 1.0e-06$.

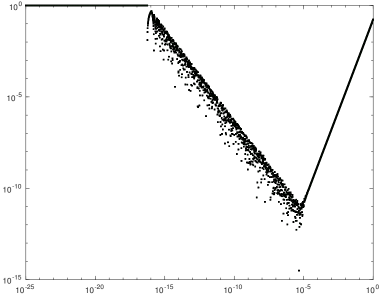

Figura: Errore $E_h(f, 0)$, con $f(x) = \exp(x)$, per alcuni passi h. Si vede, partendo da destra, come l'errore compiuto sia una funzione decrescente al diminuire di h fino a 10^{-5} (e non 10^{-6} come dice la tabella), dopo di che l'andamento, pur meno prevedibile, è essenzialmente crescente, fornendo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

Esempio (2)

Derivare numericamente in $x_0 = 5$ la funzione funzione di Runge $f(x_0) = \frac{1}{1+x^2}$, $x \in \mathbb{R}$, 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 $|\delta_2(f, x_0, h) - f'(x_0)| = |h^2 f^{(3)}(\xi)|/6$, 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 $h^* \approx 3.7 \cdot 10^{-5}$, si vede che in effetti per $h \leq h^*$ i valori della derivata degradano.

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 $h = 1.0e-05$.

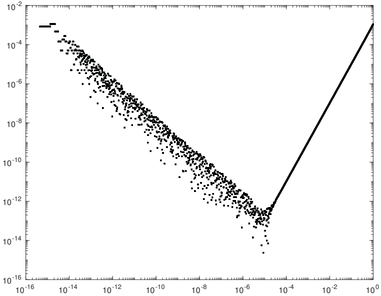

Figura: Errore $E_h(f, 5)$, con $f(x) = 1/(1 + x^2)$, per alcuni passi h. Si vede, partendo da destra, come l'errore compiuto sia una funzione decrescente al diminuire di h fino a 10^{-5}, dopo di che l'andamento, pur meno prevedibile, è essenzialmente crescente, fornendo errori tendenzialmente maggiori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

Bibliografia I

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