

Tracce di calcolo numerico¹

Prof. Marco Vianello - Dipartimento di Matematica, Università di Padova
aggiornamento: 27 luglio 2016

4 Integrazione numerica e derivazione numerica

4.1 Integrazione numerica (formule di quadratura)

1. l'operazione funzionale di integrazione (nel continuo) è “*stabile*”: si dimostri infatti che, data una funzione continua $\tilde{f}$ che approssima una funzione continua f su $[a, b]$, vale la seguente stima

$$\left| \int_a^b \tilde{f}(x) dx - \int_a^b f(x) dx \right| \leq (b-a) \operatorname{dist}(\tilde{f}, f)$$

2. in particolare, detta $\{f_n\}$ una successione di funzioni continue che converge uniformemente alla funzione continua f su $[a, b]$,

$$\left| \int_a^b f_n(x) dx - \int_a^b f(x) dx \right| \leq (b-a) \operatorname{dist}(f_n, f),$$

quindi la successione degli integrali delle f_n converge all'integrale di f

3. l'idea alla base delle formule di integrazione approssimata (*formule di quadratura*) è di sostituire ad f un'opportuna interpolante f_n ; si verifichi che le formule di quadratura algebriche (spesso dette anche “interpolatorie”, quelle ottenute integrando un unico polinomio interpolatore su tutti i nodi, ovvero con $f_n = \Pi_n$) hanno la forma di somma pesata $\sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$, dove i $\{w_i\}$ sono opportuni pesi
traccia: si utilizzi la formula di interpolazione di Lagrange

$$\int_a^b \Pi_n(x) dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x) dx = \sum_{i=0}^n \dots$$

4. * lo stesso vale anche per le formule composte, quelle ottenute integrando un'interpolante polinomiale a tratti di grado locale fissato s (ovvero con $f_n = \Pi_s^c$), che sono localmente algebriche, cioè ottenute integrando un singolo polinomio interpolatore di grado s in $[x_{ks}, x_{(k+1)s}]$, $k = 0, \dots, (n:s) - 1$ con n multiplo di s
5. nel caso di campionamento a passo costante, facendo prima un disegno esplicativo con interpretazione geometrica, si ricavino la formula di quadratura composta di grado 1, detta dei trapezi,

$$\int_a^b \Pi_1^c(x) dx = \frac{h}{2} (f(a) + f(b)) + \sum_{i=1}^{n-1} hf(x_i)$$

¹argomenti e quesiti contrassegnati da * sono più impegnativi, se non si è in grado di fare la dimostrazione bisogna comunque sapere (e saper usare) gli enunciati e capire di cosa si sta parlando

e * la formula di quadratura composta di grado 2, detta di Cavalieri-Simpson (o delle parabole, n pari)

$$\int_a^b \Pi_2^\varepsilon(x) dx = \frac{h}{3} (f(a) + f(b)) + \sum_{i=2, i \text{ pari}}^{n-2} \frac{2h}{3} f(x_i) + \sum_{i=1, i \text{ dispari}}^{n-1} \frac{4h}{3} f(x_i)$$

6. la convergenza delle formule algebriche dipende dalla distribuzione dei nodi: si mostri che le formule ottenute integrando il polinomio interpolatore sui nodi di Chebyshev sono convergenti (invece le formule algebriche di Newton-Cotes, ottenute integrando il polinomio interpolatore su nodi equispaziati, non sono convergenti; dim. non richiesta)
7. * si dimostri che, per $f \in C^{s+1}[a, b]$, le formule di quadratura “composte” ottenute integrando un’interpolante polinomiale a tratti di grado locale fissato s costruita su un campionamento $\{(x_i, f(x_i))\}$, $i = 0, \dots, n$, sono convergenti con un errore che è almeno $\mathcal{O}(h^{s+1})$, dove $h = \max \Delta x_i$ (c’è qualche vincolo sul numero di nodi?)
8. * abbiamo visto che la “risposta alle perturbazioni” su f dell’interpolazione polinomiale è legata alla quantità $\Lambda_n = \max_{x \in [a, b]} \sum_{i=0}^n |\ell_i(x)|$ (costante di Lebesgue), dove gli $\{\ell_i\}$ sono i polinomi elementari di Lagrange; si mostri che la quantità $S_n = \sum_{i=0}^n |w_i|$ svolge un ruolo analogo nel caso delle formule di quadratura interpolatorie e composte

$$\left| \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) - \sum_{i=0}^n w_i \tilde{f}(x_i) \right| \leq S_n \text{dist}(f, \tilde{f})$$

9. perché in particolare le formule interpolatorie e composte con pesi positivi sono sicuramente stabili?
traccia: tali formule sono esatte (cioè fanno errore nullo) sui polinomi costanti, quindi

$$S_n = \sum_{i=0}^n |w_i| = \sum_{i=0}^n w_i = \sum_{i=0}^n w_i \cdot 1 = \int_a^b 1 dx = b - a$$

10. si può dimostrare (dim. non richiesta) che le formule algebriche di Newton-Cotes (algebriche su nodi equispaziati) hanno pesi non tutti positivi per $n > 7$ e sono instabili perchè S_n diverge esponenzialmente per $n \rightarrow \infty$; invece (dim. non richiesta) le formule algebriche sui nodi di Chebyshev hanno pesi positivi, quindi sono stabili (oltre che convergenti)

4.2 Derivazione numerica

1. l’operazione funzionale di derivazione (nel continuo) *non è stabile*; infatti detta Df la derivata di f

$$\text{dist}(f_n, f) \rightarrow 0 \not\Rightarrow \text{dist}(Df_n, Df) \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty$$

come si vede considerando ad esempio la successione di funzioni $f_n(x) = \frac{1}{n} \sin(nx)$, $x \in [0, 1]$, visto che $\text{dist}(f_n, 0) \leq 1/n$ è infinitesima per $n \rightarrow \infty$ ma $\text{dist}(Df_n, 0) \equiv 1$

2. l’instabilità dell’operazione funzionale di derivazione si può parafrasare con “*funzioni arbitrariamente vicine possono avere derivate arbitrariamente distanti*”, ad esempio si può stare arbitrariamente vicini ad una funzione oscillando con frequenza arbitrariamente elevata (per un esempio grafico si veda la figura in 3.3.3, confrontando la linea continua con la linea frastagliata)

3. tale instabilità viene ereditata dalle formule di approssimazione della derivata: perché nella derivazione numerica con il rapporto incrementale

$$\delta_+(h) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = Df(x) + \mathcal{O}(h), \quad f \in C^2,$$

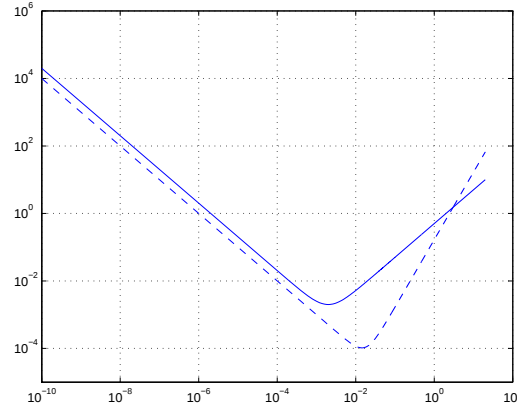
conviene prendere un passo dell'ordine di $\sqrt{\varepsilon}$, dove ε è il massimo errore su f ?
 traccia: si utilizzi la formula di Taylor al primo ordine con resto del secondo ordine per mostrare che $|Df(x) - \delta_+(h)| \leq Ah$ con A costante opportuna; detto poi $\varepsilon = \text{dist}(f, \tilde{f})$ il massimo errore su f e detto $\tilde{\delta}_+(h) = (\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x))/h$ il rapporto incrementale “perturbato”, l'errore effettivo nell'approssimazione della derivata ha una stima del tipo $|Df(x) - \tilde{\delta}_+(h)| \leq |Df(x) - \delta_+(h)| + |\delta_+(h) - \tilde{\delta}_+(h)| \leq E(h) = Ah + 2\varepsilon/h$, minimizzando in h ... si ottiene un passo ottimale h^* proporzionale a $\varepsilon^{1/2}$ e un minimo $E(h^*) = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$

4. l'analisi precedente può essere estesa all'approssimazione della derivata con il rapporto incrementale “simmetrico”

$$\delta(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = Df(x) + \mathcal{O}(h^2), \quad f \in C^3,$$

traccia: in questo caso si ha una stima del tipo $|Df(x) - \tilde{\delta}(h)| \leq E(h) = Bh^2 + \varepsilon/h$ con B costante opportuna (utilizzare la formula di Taylor al secondo ordine con resto del terzo ordine, $f(x+h) = \dots$ e $f(x-h) = \dots$), minimizzando in h ... si ottiene un passo ottimale h^* proporzionale a $\varepsilon^{1/3}$ e un minimo $E(h^*) = \mathcal{O}(\varepsilon^{2/3})$

5. in figura i grafici (scala loglog) delle stime di errore $E(h)$ nel calcolo della derivata di $f(x) = \sin(x)$ in $x = 0$ con $\delta_+(h)$ (linea continua) e $\delta(h)$ (linea tratteggiata), per $\varepsilon = 10^{-4}$



4.3 Estrapolazione

1. data una formula di approssimazione $\phi(h)$ di una quantità α , con la struttura $\phi(h) = \alpha + ch^p + \mathcal{O}(h^q)$, $q > p > 0$, utilizzando opportune combinazioni lineari di $\phi(h)$ e $\phi(h/2)$ si ottengono:

- una stima a posteriori della parte principale dell'errore

$$\frac{\phi(h) - \phi(h/2)}{2^p - 1} = c \left(\frac{h}{2}\right)^p + \mathcal{O}(h^q), \quad |\phi(h/2) - \alpha| \approx |c| \left(\frac{h}{2}\right)^p \approx \frac{|\phi(h) - \phi(h/2)|}{2^p - 1}$$

- una nuova approssimazione con errore di ordine $\mathcal{O}(h^q)$ (estrapolazione)

$$\frac{2^p \phi(h/2) - \phi(h)}{2^p - 1} = \alpha + \mathcal{O}(h^q)$$

2. si verifichi che il rapporto incrementale standard $\delta_+(h)$ e quello “simmetrico” $\delta(h)$ hanno la struttura dell'esercizio precedente per f sufficientemente regolare (traccia: si utilizzi la formula di Taylor; in particolare, chi sono p e q per $\delta(h)$ con $f \in C^5$? si applichi l'esercizio precedente a vari esempi, controllando l'accuratezza delle approssimazioni e delle stime dell'errore; si vedano ad es. le prime due colonne della tabella al punto 6)
3. detta $T(h)$ la formula di quadratura composta dei trapezi a passo costante e sapendo che $T(h) = \int_a^b f(x) dx + ch^2 + \mathcal{O}(h^4)$ per $f \in C^4[a, b]$, si calcolino stima a posteriori dell'errore e formula di estrapolazione (detta formula di Romberg) su vari esempi di funzioni integrabili elementarmente, confrontando con l'errore effettivo
4. * il procedimento di estrapolazione può essere iterato per $\phi(h) = \alpha + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + \dots + c_m h^{p_m} + \mathcal{O}(h^{p_{m+1}})$, $0 < p_1 < p_2 < \dots < p_m < p_{m+1}$
traccia: si utilizzi una sequenza di passi $h = h_0, h_0/2, h_0/4, h_0/8, \dots$, e la formula

$$\phi_0(h) = \phi(h), \quad \phi_i(h) = \frac{2^{p_i} \phi_{i-1}(h/2) - \phi_{i-1}(h)}{2^{p_i} - 1}, \quad i = 1, \dots, m,$$

ottenendo $\phi_i(h) = \alpha + \mathcal{O}(h^{p_{i+1}})$; il procedimento viene implementato con la tabella di estrapolazione

$i = 0$	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$
$\phi_0(h_0)$				
$\phi_0(h_0/2)$	$\phi_1(h_0)$			
$\phi_0(h_0/4)$	$\phi_1(h_0/2)$	$\phi_2(h_0)$		
$\phi_0(h_0/8)$	$\phi_1(h_0/4)$	$\phi_2(h_0/2)$	$\phi_3(h_0)$	
$\phi_0(h_0/16)$	$\phi_1(h_0/8)$	$\phi_2(h_0/4)$	$\phi_3(h_0/2)$	$\phi_4(h_0)$

5. * la tabella di estrapolazione si può utilizzare per $f \in C^{m+1}$ con $\phi(h) = \delta_+(h)$, $p_i = i$, oppure $f \in C^{2m+1}$ con $\phi(h) = \delta(h)$, $p_i = 2i$, $i = 1, \dots, m$ (chi sono i coeff. c_i nei due casi? traccia: utilizzare la formula di Taylor)
6. * gli errori $|\phi_i(h) - Df(0)|$ (con una cifra significativa) nel calcolo della derivata di $f(x) = e^x$ in $x = 0$ con la tabella di estrapolazione a partire da $\phi_0(h) = \delta(h)$, $h_0 = 1/2$

	$i = 0$	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$
$h = 1/2$	$4 \cdot 10^{-2}$				
$h = 1/4$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-4}$			
$h = 1/8$	$3 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-8}$		
$h = 1/16$	$7 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-7}$	$8 \cdot 10^{-10}$	$3 \cdot 10^{-12}$	
$h = 1/32$	$2 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-11}$	$1 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-16}$