Derivazione ed integrazione numerica

30 giugno 2007

1 Derivazione numerica

Il teorema di Taylor [4, p.106] stabilisce che se $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ è una funzione tale che

1. $f^{(1)}$ sia continua in $[a,b]$;
2. $f^{(2)}$ esista per ogni $t \in (a,b)$

allora qualsiasi siano due punti distinti $x \in [a,b]$, $x_0 \in [a,b]$ esiste ξ tra x e x_0 tale che

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

Essendo per ipotesi $x \neq x_0$, si ha

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

Definito il *rapporto incrementale*

$$\tilde{f}^{(1)}(x,x_0) := \frac{f(x)-f(x_0)}{(x-x_0)}$$

si ha quindi

$$f^{(1)}(x_0) = \tilde{f}^{(1)}(x,x_0) - \frac{f^{(2)}(\xi(x,x_0))\cdot(x-x_0)}{2} \tag{3}$$

Se in particolare la quantità

$$\frac{f^{(2)}(\xi)(x-x_0)}{2}$$

è trascurabile allora

$$f^{(1)}(x_0) \approx \tilde{f}^{(1)}(x,x_0). \tag{4}$$

D'altro canto questo non è l'unico metodo per calcolare la derivata. Posto $x_+ = x_0+h$ (con h non necessariamente positivo), da (3)

$$\begin{aligned} f^{(1)}(x_0) &= \tilde{f}^{(1)}(x_+,x_0) - \frac{f^{(2)}(\xi(x_+,x_0))\cdot(x_+-x_0)}{2} && (5)\\ &= \tilde{f}^{(1)}(x_+,x_0) - \frac{f^{(2)}(\xi(x_+,x_0))h}{2}. && (6) \end{aligned}$$

Similmente per $x_- = x_0 - h$ abbiamo

$$
\begin{aligned}
f^{(1)}(x_0) &= \tilde{f}^{(1)}(x_-, x_0) - \frac{f^{(2)}(\xi(x_-, x_0)) \cdot (x_- - x_0)}{2} && (7)\\
&= \tilde{f}^{(1)}(x_-, x_0) + \frac{f^{(2)}(\xi(x_-, x_0)) \cdot h}{2}. && (8)
\end{aligned}
$$

Da (5) e (9), sommando ambo i membri

$$
\begin{aligned}
2\, f^{(1)}(x_0) &= \tilde{f}^{(1)}(x_+, x_0) + \tilde{f}^{(1)}(x_-, x_0) && (9)\\
&- \frac{f^{(2)}(\xi(x_+, x_0)) \cdot h}{2} + \frac{f^{(2)}(\xi(x_-, x_0)) \cdot h}{2} && (10)
\end{aligned}
$$

e quindi se è trascurabile

$$
\frac{f^{(2)}(\xi(x_+, x_0)) \cdot h}{2} + \frac{f^{(2)}(\xi(x_-, x_0)) \cdot h}{2}
$$

abbiamo

$$
\begin{aligned}
2\, f^{(1)}(x_0) &\approx \tilde{f}^{(1)}(x_+, x_0) + \tilde{f}^{(1)}(x_-, x_0) && (11)\\
&= \frac{f(x_+) - f(x_0)}{(x_1 - x_0)} + \frac{f(x_-) - f(x_0)}{(x_- - x_0)} && (12)\\
&= \frac{f(x_+) - f(x_0)}{h} + \frac{f(x_-) - f(x_0)}{(-h)} && (13)
\end{aligned}
$$

Quindi, dopo facili operazioni otteniamo la formula alle *differenze centrate*

$$
f^{(1)}(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}. \qquad (14)
$$

Vediamo come si comportano i due metodi illustrati in (4) e (14) mediante alcuni esempi in Matlab. Consideriamo il problema di calcolare la derivata della funzione $f(x) = \exp(x)$ nel punto $x = 1$. Ricordiamo che $f^{(1)}(x) = \exp(x)$ e quindi il valore da approssimare è $\exp(1)$. In particolare confrontiamo i due metodi sopracitati per valori di $h = 2^{-k}$ con $k = 1, \ldots, 50$ e calcoliamo l'errore relativo compiuto.
Salviamo in un file `mydiff.m` il seguente codice

```
% DERIVATA DELL'ESPONENZIALE.
x0=1;               % PTO IN CUI VALUTARE LA DERIVATA.
f1xesatta=exp(x0);  % VALORE ESATTO DERIVATA.

% METODO 1: RAPPORTO INCREMENTALE.
for index=1:50
    h=2^(-index);  % PASSO.
    x=x0+h;        % PUNTO "x"
    f1x(index)=(exp(x)-exp(x0))/h; % RAPP. INCREMENTALE.
    relerr1(index)=abs(f1xesatta-f1x(index))/abs(f1xesatta);
    fprintf('\n \t [x]: %5.5f [h]: %2.2e',x,h);
    fprintf('[rel.err.]: %2.2e',relerr1(index));
```

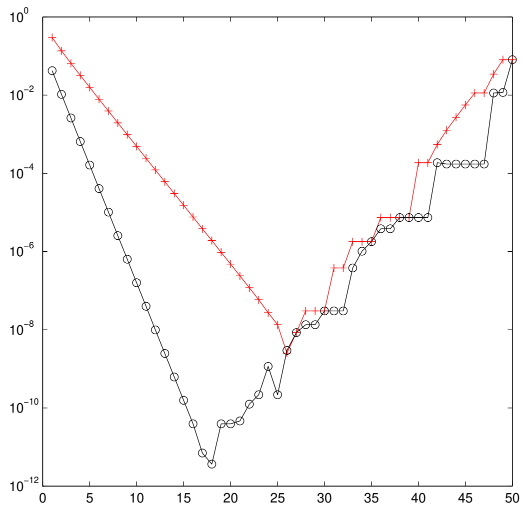

Figure 1: Grafico che illustra l'errore relativo compiuto dai metodi 1 (in rosso, col +) e dal metodo 2 (in nero, a tondini) nell'approssimare $f^{(1)}(1)$ per $f(x) = \exp(x)$.

```
end


% METODO 2.
for index=1:50
    h=2^(-index); % PASSO.
    xplus=x+h; xminus=x-h; % PUNTI VALUTAZIONE.
    f1x(index)=(exp(xplus)-exp(xminus))/(2*h); % APPROX. DER.
    relerr2(index)=abs(f1xesatta-f1x(index))/abs(f1xesatta);
    fprintf('\n \t [x]: %5.5f [h]: %2.2e',x,h);
    fprintf('[rel.err.]: %2.2e',relerr2(index));
end

% PLOT ERRORI
semilogy(1:50,relerr1,'r-+'); hold on
semilogy(1:50,relerr2,'k-o');
```

I grafici mostrano come entrambi i metodi siano instabili. Quando il *passo* h è troppo piccolo, l'approssimazione di entrambe peggiora invece di migliorare. Nel grafico in scala semi-logaritmica, la curva in rosso coi + rappresenta il primo metodo, quella in nero con i − il secondo. Osserviamo che tra i due metodi il secondo sembra avere comunque performance migliori. Vediamo di giustificare questo fatto.
Si può dimostrare che il primo metodo ha un errore assoluto del tipo

$$E_1 = \frac{|h| \cdot |f^{(2)}(\xi)|}{2}, \xi \in I(x, x_0)$$

mentre per il secondo si ha

$$E_2 = \frac{|h|^2 \cdot \left| f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2) \right|}{12}, \; \xi_1, \xi_2 \in I(x_0 + h, x_0 - h)$$

dove $I(s,t)$ è il più piccolo intervallo aperto contenente s e t.
Nel nostro caso essendo $f^{(n)}(x) = \exp(x)$ per ogni $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$, e poichè per $x \approx 1$ si ha $\exp(x) \approx \exp(1)$ deduciamo

$$E_1 \approx \frac{|h| \exp(1)}{2} \tag{15}$$

$$E_2 \approx \frac{|h|^2 \exp(1)}{6} \tag{16}$$

Esercizio. Verificare se sono buone le stime dell'errore (15) e (16).

References

[1] V. Comincioli, *Analisi Numerica, metodi modelli applicazioni*, Mc Graw-Hill, 1990.

[2] J.H. Mathews e K.D. Fink, *Numerical Methods using Matlab*, Prentice Hall, 1999.

[3] A. Quarteroni e F. Saleri, *Introduzione al calcolo scientifico*, Springer Verlag, 2006.

[4] W. Rudin, *Principi di analisi matematica*, Mc Graw Hill, 1997.

[5] The MathWorks Inc., *Numerical Computing with Matlab*.