

Corso di Laurea in Ingegneria Informatica  
Corso di Analisi Numerica  
4 - DERIVAZIONE NUMERICA

Lucio Demeio  
Dipartimento di Scienze Matematiche

- 1 Calcolo numerico delle derivate
- 2 Estrapolazione di Richardson
- 3 Derivate di ordine superiore

# Introduzione

## Idea di base

- L'idea di base per generare un'approssimazione alla derivata di una funzione è di far uso del rapporto incrementale:

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

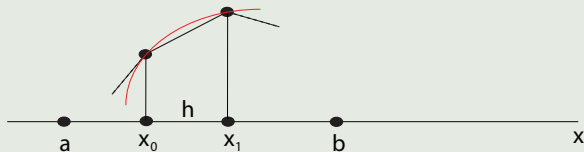
che suggerisce di approssimare la derivata con il rapporto incrementale calcolato per  $h$  molto piccolo;

- che errore commettiamo? va a zero per  $h \rightarrow 0$  e come?

# Calcolo dell'errore

## Polinomio interpolatore

- Sia  $f \in C^2[a, b]$ , sia  $|f''(x)| \leq M$  in  $[a, b]$  e siano  $x_0$  e  $x_1 = x_0 + h$  due punti di  $[a, b]$  (pensiamo pure  $h$  piccolo, con  $x_1$  molto vicino ad  $x_0$ );



- costruiamo il polinomio di Lagrange  $P_1(x)$  per  $x_0$  ed  $x_1$  e ricordiamo la formula per l'errore:

$$f(x) = P_1(x) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(\xi(x))$$

# Calcolo dell'errore

## Polinomio interpolatore

$$\begin{aligned} P_1(x) &= f(x_0) \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1) \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \\ &= f(x_0) \frac{x - (x_0 + h)}{-h} + f(x_0 + h) \frac{x - x_0}{h} \end{aligned}$$

e quindi

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) \frac{x - (x_0 + h)}{-h} + f(x_0 + h) \frac{x - x_0}{h} \\ &\quad + \frac{(x - x_0)(x - x_0 - h)}{2!} f''(\xi(x)) \quad \text{e, derivando ...} \\ f'(x) &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + \frac{(x - x_0)(x - x_0 - h)}{2!} (f''(\xi(x)))' \\ &\quad + \frac{2(x - x_0) - h}{2!} f''(\xi(x)) \end{aligned}$$

# Calcolo dell'errore

## Polinomio interpolatore

Per  $x = x_0$  il termine contenente  $(f''(\xi(x)))'$  si annulla e possiamo scrivere

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2!} f''(\xi)$$

dove  $\xi \in [x_0, x_1]$ . Possiamo dunque approssimare  $f'(x_0)$  con il rapporto incrementale, commettendo un errore limitato da  $M|h|/2$ . Per  $h > 0$  la formula prende il nome di **formula alle differenze finite in avanti**, mentre se  $h < 0$  di **formula alle differenze finite all'indietro**. È importante notare che l'errore dipende linearmente da  $h$ , cioè possiamo scrivere

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + O(h)$$

# Calcolo dell'errore

## Esempio

$j$	$x$	$y$	$FFD$	$BFD$
0	1.0	0.92734	-0.2111	=
1	1.1	0.90623	0.2821	-0.2111
2	1.2	0.93444	0.2271	0.2821
3	1.3	0.95715	0.3014	0.2271
4	1.4	0.98729	0.2505	0.3014
5	1.5	1.01234	=	0.2505

# Calcolo dell'errore

## Sviluppo di Taylor

Il metodo illustrato sopra non è l'unico per arrivare all'errore, anche se è il più generale.

- Sviluppiamo  $f(x_0 + h)$  in serie di Taylor al second'ordine in  $h$ :

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(\xi)$$

dove  $\xi \in (x_0, x_0 + h)$ .

- Da qui ricaviamo semplicemente:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2!} f''(\xi)$$

Useremo entrambi i metodi a seconda del caso.



# Approssimazioni generali alle derivate

## Formula per $n + 1$ punti

- Siano  $x_0, x_1, \dots, x_n$   $n + 1$  punti distinti ed equispaziati, con passo di discretizzazione  $h$ , in un intervallo  $I$ . Siano  $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$  i valori della funzione ai nodi.
- Utilizzando il polinomio interpolatore di Lagrange possiamo allora scrivere

$$f(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L_{nk}(x) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)}{(n + 1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))$$

dove gli  $L_{nk}(x)$  sono i polinomi già introdotti in precedenza e tali che  $L_{nk}(x_k) = 1$  e  $L_{nk}(x_j) = 0$  per  $j \neq k$ .

# Approssimazioni generali alle derivate

## Formula per $n + 1$ punti equispaziati

- Derivando otteniamo

$$\begin{aligned} f'(x) &= \sum_{k=0}^n f(x_k) L'_{nk}(x) \\ &+ \left[ \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(n+1)!} \right]' f^{(n+1)}(\xi(x)) \\ &+ \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(n+1)!} (f^{(n+1)}(\xi(x)))' \end{aligned}$$

- Calcolando in  $x_k$ , l'ultimo termine si annulla e si vede facilmente che

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L'_{nk}(x_j) + \frac{h^n}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x_j))$$

detta **formula per  $n + 1$  punti** (equispaziati).

# Approssimazioni generali alle derivate

## Formule ridotte

- Le formule ad  $n + 1$  punti non vengono usate, perchè richiedono il calcolo della funzione in molti punti, che è dispendioso e soggetto ad errori di arrotondamento. Si preferiscono allora formula ridotte a tre o cinque punti.

## Formule ridotte a tre punti

- Sia  $x_i$  uno dei nodi interni, con  $1 \leq i \leq n - 1$ . Scriviamo esplicitamente il polinomio di Lagrange che passa per i tre nodi  $x_{i-1}, x_i, x_{i+1}$

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_{i-1}) \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} \\ &+ f(x_i) \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})} \\ &+ f(x_{i+1}) \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} + \frac{h^2}{3!} f^{(3)}(\xi(x)) \end{aligned}$$

# Approssimazioni generali alle derivate

## Formule ridotte a tre punti

- Ricordando che  $x_{i-1} = x_i - h$  e  $x_{i+1} = x_i + h$ , abbiamo

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_{i-1}) \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{2h^2} \\ &\quad - f(x_i) \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{h^2} \\ &\quad + f(x_{i+1}) \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{2h^2} + \\ &\quad \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+1})}{3!} f^{(3)}(\xi(x)) \end{aligned}$$

# Approssimazioni generali alle derivate

## Formule ridotte a tre punti

Derivando:

$$\begin{aligned} f'(x) &= f(x_{i-1}) \frac{2x - x_{i+1} - x_i}{2h^2} \\ &\quad - f(x_i) \frac{2x - x_{i-1} - x_{i+1}}{h^2} \\ &\quad + f(x_{i+1}) \frac{2x - x_{i-1} - x_i}{2h^2} \\ &\quad + \left[ \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+1})}{3!} \right]' f^{(3)}(\xi(x)) \\ &\quad + \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+1})}{3!} (f^{(3)}(\xi(x)))' \end{aligned}$$

# Approssimazioni generali alle derivate

## Formule ridotte a tre punti

Calcolando le derivate in  $x_{i-1}$ ,  $x_i$  ed  $x_{i+1}$ , ricordando nuovamente che l'ultimo termine si annulla in tal caso, e dopo qualche semplificazione algebrica, abbiamo:

$$f'(x_{i-1}) = \frac{-3f(x_{i-1}) + 4f(x_i) - f(x_{i+1}))}{2h} + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_1)$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_2)$$

$$f'(x_{i+1}) = \frac{f(x_{i-1}) - 4f(x_i) + 3f(x_{i+1}))}{2h} + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_3)$$

Da qui vediamo che l'errore è del second'ordine nel passo di discretizzazione  $h$  e che l'errore nella seconda formula è metà di quello della prima e della terza; ciò è dovuto al fatto di aver coinvolto punti da entrambe le parti di  $x_i$ . La formula centrale è applicabile solo ai nodi interni,  $x_1, \dots, x_{n-1}$ , mentre per  $x_0$  ed  $x_n$  vanno usate le altre due.

# Approssimazioni generali alle derivate

## Formule ridotte a tre punti

Nelle applicazioni pratiche dunque, volendo costruire un'approssimazione alla derivata di una funzione sui nodi  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$  di un intervallo  $[a, b]$  mediante le formula a tre punti, avremo:

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)}{2h}$$

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}, \quad i = 1, \dots, n-1$$

$$f'(x_n) \approx \frac{f(x_{n-2}) - 4f(x_{n-1}) + 3f(x_n)}{2h}$$

con errore quadratico nel passo  $h$ .

# Approssimazioni generali alle derivate

## Formule ridotte a tre punti - derivazione con Taylor

L'approssimazione alla derivata data dalla formula centrale può essere ricavata con un semplice sviluppo in serie di Taylor al modo seguente, sotto l'ipotesi che  $f$  sia di classe  $C^3$  nell'intervallo considerato.

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + h f'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) + \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(\xi')$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - h f'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) - \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(\xi'')$$

Sottraendo la seconda equazione dalla prima otteniamo

$$\begin{aligned} f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + \frac{h^2}{3!} \frac{f^{(3)}(\xi') + f^{(3)}(\xi'')}{2} \\ &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi'''), \end{aligned}$$

dove l'ultima uguaglianza segue dal teorema dei valori intermedi.



# Approssimazioni generali alle derivate

## Formule ridotte a cinque punti

Un'altra approssimazione usata per il calcolo numerico delle derivate è quella della formula a cinque punti. La derivazione può essere fatta sia con il polinomio di Lagrange sia con lo sviluppo di Taylor. Ci limitiamo a fornire la formula centrale, lasciando allo studente il compito della sua derivazione.

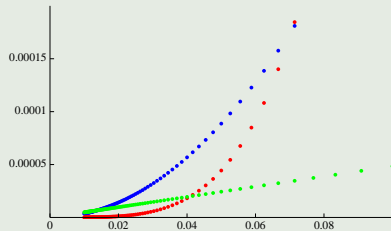
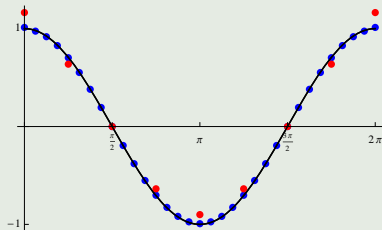
$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{12h} + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi)$$

con  $\xi \in (x_{i-2}, x_{i+2})$ . Da notare che l'errore è del quart'ordine nel passo di discretizzazione. Questa formula fornisce pertanto un risultato più accurato di quella a tre punti, al costo però di una quantità molto maggiore di valutazioni della funzione.

# Approssimazioni generali alle derivate

## Confronto fra tre e cinque punti

- $f(x) = \sin x$ ,  $f'(x) = \cos x$ ,  $x \in [0, 2\pi]$ ,
- confronto nella formula a tre punti  $n = 8$  ed  $n = 32$ ;
- errore (in funzione di  $h$ ) nel punto  $x = 5\pi/4$  a tre punti (blu), cinque punti (rosso  $\times 1000$ ) e differenze finite in avanti (verde  $/1000$ ):



# Approssimazioni generali alle derivate

## Relazione con le differenze divise ed il simbolo $\Delta$

- 1 Le formule per le approssimazioni numeriche delle derivate si possono esprimere tramite il simbolo  $\Delta f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_i)$  precedentemente introdotto.
- 2 Differenze finite in avanti:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} = \frac{1}{h} \Delta f(x_i)$$

- 3 Formule a tre punti:

$$\begin{aligned} f'(x_{i-1}) &= \frac{-3f(x_{i-1}) + 4f(x_i) - f(x_{i+1}))}{2h} \\ &= \frac{3\Delta f(x_{i-1}) - \Delta f(x_i)}{2h} \\ f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} = \frac{\Delta f(x_i) + \Delta f(x_{i-1}))}{2h} \end{aligned}$$

# Approssimazioni generali alle derivate

Relazione con le differenze divise ed il simbolo  $\Delta$

$$\begin{aligned} f'(x_{i+1}) &= \frac{f(x_{i-1}) - 4f(x_i) + 3f(x_{i+1}))}{2h} \\ &= \frac{3\Delta f(x_i) - \Delta f(x_{i-1}))}{2h} \end{aligned}$$

# Estrapolazione di Richardson

## In generale

- L' estrapolazione di Richardson è un metodo per ricavare schemi di ordine più elevato a partire da schemi di ordine più basso.
- Come esempio introduttivo, consideriamo la formula alle differenze centrate per l'approssimazione della derivata:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} + \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$

dove  $\xi \in (x_i + h, x_i - h)$ .

- Utilizzando lo sviluppo di Taylor, possiamo però anche scrivere

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} + \frac{h^2}{3!} f'''(x_i) + \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(x_i) + \dots$$

# Estrapolazione di Richardson

## In generale

- Questa può essere considerata come un caso particolare di un'espressione più generale del tipo

$$M = N_1(h) + K_1 h^2 + K_2 h^4 + \dots \quad (*)$$

che deve valere per qualsiasi  $h$  e dove  $M$  è il valore vero della grandezza che si vuol approssimare (nel nostro caso  $f'(x_i)$ ),  $N_1(h)$  è l'approssimazione utilizzata, nel nostro caso

$$N_1(h) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h}$$

e gli altri termini rappresentano l'errore, di cui si conosce la struttura ma, in generale, non le costanti  $K_1$ ,  $K_2$ , etc.

# Estrapolazione di Richardson

In generale

- Scriviamo ora la (\*) per  $h$  e per  $2h$ :

$$M = N_1(h) + K_1 h^2 + K_2 h^4 + \dots$$

$$M = N_1(2h) + K_1 4h^2 + K_2 16h^4 + \dots$$

da cui, moltiplicando la prima equazione per 4 e sottraendo, otteniamo

$$3M = 4N_1(h) - N_1(2h) - 12K_2 h^4 + \dots$$

- da cui

$$M = N_2(h) - 4K_2 h^4 + \dots$$

con

$$N_2(h) = \frac{4N_1(h) - N_1(2h)}{3}$$

# Estrapolazione di Richardson

## Esempio

- Come esempio, consideriamo nuovamente la formula per la derivata

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} + K_1 h^2 + K_2 h^4 + \dots$$

e ritroviamo la formula a cinque punti

$$f'(x_i) \approx N_2(h) = \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{12h}$$

- Il vantaggio sta nella semplicità di ricavare la formula a cinque punti, che è molto lunga e tediosa da ricavare con il polinomio interpolatore di Lagrange, un po' meno con gli sviluppi di Taylor ed ancor più semplice con il metodo qui esposto



# Derivate di ordine superiore

## Derivata seconda

- Le approssimazioni numeriche per le derivate di ordine superiore al primo sono lunghe da ottenere con il polinomio interpolatore. Ci limitiamo alla derivazione della formula centrata per la derivata seconda tramite lo sviluppo di Taylor.
- Siano  $x_0, x_1, \dots, x_n$  i nodi equispaziati, con  $h$  il passo di discretizzazione, e sia  $1 \leq i \leq n - 1$ , così che  $x_i$  sia un nodo interno.
- Sviluppiamo  $f(x_i + h)$  ed  $f(x_i - h)$  attorno ad  $f(x_i)$ :

# Derivate di ordine superiore

## Derivata seconda

- Scriviamo gli sviluppi

$$f(x_i + h) = f(x_i) + h f'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) + \frac{h^3}{6} f'''(x_i) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(\xi_1)$$

$$f(x_i - h) = f(x_i) - h f'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) - \frac{h^3}{6} f'''(x_i) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(\xi_2),$$

dove  $x_i - h < \xi_2 < x_i < \xi_1 < x_i + h$ , e sommiamo membro a membro.

# Derivate di ordine superiore

## Derivata seconda

- Ricaviamo per la derivata seconda:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i - h) - 2f(x_i) + f(x_i + h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

- Cioè

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1}))}{h^2}$$

con l'errore del second'ordine in  $h$ .

- Ovviamente, quest'ultima espressione vale solo per i nodi interni.