DERIVATE

Letizia SCUDERI

Dipartimento di Scienze Matematiche, Politecnico di Torino

letizia.scuderi@polito.it

A.A. 2021/2022

Approssimazioni della derivata prima

Sia $u(x)$ una funzione derivabile un certo numero di volte. La derivazione numerica consiste nel definire approssimazioni delle derivate di u in un fissato punto $x = x_i$.

Sia $h > 0$ un incremento sufficientemente piccolo e si consideri il seguente sviluppo di Taylor:

$$u(x_i + h) = u(x_i) + u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 + O(h^3)$$

Dividendo per h, si ha

$$\frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h} = u'(x_i) + \frac{1}{2}u''(x_i)h + O(h^2)$$

da cui

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h}$$

L'espressione al secondo membro, detta **rapporto incrementale o differenza finita in avanti**, fornisce un'approssimazione della derivata prima di u in x_i.

Se $u \in C^2$ in un intorno di x_i, essa è un'approssimazione del primo ordine in quanto l'errore

$$u'(x_i) - \frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h} \approx -\frac{1}{2} u_i''(x_i) h$$

è proporzionale a h (se $u''(x_i) \neq 0$) per $h \to 0$.

Osservazioni

- Se u è un polinomio di primo grado la formula è esatta, perché la derivata seconda di u e tutte le sue derivate successive sono identicamente nulle.
- Il rapporto incrementale rappresenta la derivata prima del polinomio $p_1(t)$ interpolante u nei punti $x_i, x_i + h$:

$$\begin{aligned} p_1(t) =& \frac{t - (x_i + h)}{\cancel{x_i} - (\cancel{x_i} + h)} u(x_i) + \frac{t - x_i}{\cancel{x_i} + h - \cancel{x_i}} u(x_i + h) \\ &\Rightarrow p_1'(t) = \frac{1}{-h} u(x_i) + \frac{1}{h} u(x_i + h) = \frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h} \end{aligned}$$

Pertanto vale $u(t) \approx p_1(t) \Rightarrow u'(x_i) \approx p_1'(x_i)$

Analogamente, si ha

$$u(x_i - h) = u(x_i) - u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 + O(h^3)$$

Dividendo per h, si ha

$$\frac{u(x_i) - u(x_i - h)}{h} = u'(x_i) + \frac{1}{2}u''(x_i)h + O(h^2)$$

da cui

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_i) - u(x_i - h)}{h}$$

L'espressione al secondo membro, detta **rapporto incrementale o differenza finita all'indietro**, fornisce un'approssimazione della derivata prima di u in x_i.

Un'approssimazione più precisa si può ottenere combinando i due sviluppi:

$$u(x_i + h) = u(x_i) + u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}u'''(x_i)h^3 + O(h^4)$$
$$u(x_i - h) = u(x_i) - u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 - \frac{1}{6}u'''(x_i)h^3 + O(h^4)$$

Sottraendo membro a membro, si ha:

$$u(x_i + h) - u(x_i - h) = 2u'(x_i)h + \frac{1}{3}u'''(x_i)h^3 + O(h^4)$$

da cui si ottiene

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h}$$

L'espressione al secondo membro, detta **rapporto incrementale centrato o differenza finita centrata**, fornisce un'approssimazione della derivata prima di u in x_i.

Se $u \in C^3$ in un intorno di x_i, essa è un'approssimazione del secondo ordine in quanto l'errore

$$u'(x_i) - \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h} \approx \frac{1}{6} u'''(x_i) h^2$$

è proporzionale a h^2 (se $u'''(x_i) \neq 0$) per $h \to 0$.

Osservazioni

- Se u è un polinomio di secondo grado la formula è esatta, perché la derivata terza di u e tutte le sue derivate successive sono identicamente nulle.
- Denotato con $p_2(t)$ il polinomio interpolante u nei punti $x_i - h, x_i, x_i + h$, si dimostra che il valore $p_2'(x_i)$ coincide con il rapporto incrementale centrato.
- Il rapporto incrementale centrato è la media aritmetica dei rapporti in avanti e all'indietro.

Approssimazioni della derivata seconda

A partire dagli sviluppi:

$$u(x_i + h) = u(x_i) + u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}u'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}u''''(x_i)h^4 + O(h^5)$$
$$u(x_i - h) = u(x_i) - u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 - \frac{1}{6}u'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}u''''(x_i)h^4 + O(h^5)$$

sommando si ha:

$$u''(x_i) \approx \frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)}{h^2}$$

L'espressione al secondo membro, detta **rapporto incrementale centrato o differenza finita centrata**, fornisce un'approssimazione della derivata seconda di u in x_i. Se $u \in C^4$ in un intorno di x_i, essa è un'approssimazione del secondo ordine in quanto l'errore

$$u''(x_i) - \frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)}{h^2} \approx \frac{1}{12}u''''(x_i)h^2$$

è proporzionale a h^2 (se $u''''(x_i) \neq 0$) per $h \to 0$.

Osservazione

Le differenze finite permettono di approssimare le derivate di una funzione $u(x)$ qualunque sia la scelta dell'incremento h.

Ci chiediamo allora se possiamo effettivamente scegliere h piccolo a piacere per calcolare un'approssimazione con precisione arbitraria.

La risposta è affermativa se operiamo in aritmetica esatta e negativa se operiamo in aritmetica floating-point. Il motivo è che, oltre all'errore di troncamento descritto precedentemente, anche l'errore di arrotondamento, dovuto all'uso dell'aritmetica floating-point, gioca un ruolo importante.

... continua osservazione

Consideriamo ad esempio, il caso più semplice, ovvero quello della differenza finita in avanti

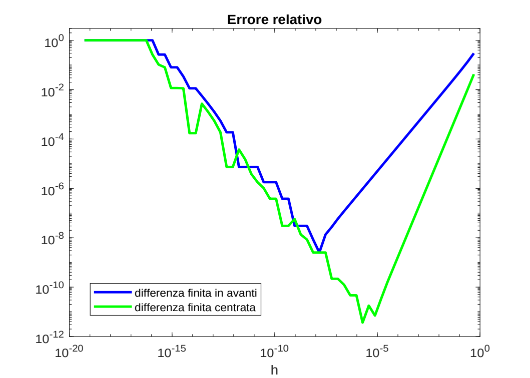
$$u'(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$$

Osserviamo che, per h piccolo, il calcolo del numeratore $u(x+h) - u(x)$ sarà poco accurato a causa del fenomeno della **cancellazione numerica**, poiché i valori $u(x+h)$ e $u(x)$ sono circa uguali. Inoltre, l'errore da cui è affetto il numeratore viene amplificato quando si moltiplica il numeratore per $1/h$, che è un numero grande.

Pertanto, il fenomeno della cancellazione numerica, che avviene nel calcolo della differenza finita in avanti, può portare a risultati numerici che possono essere completamente sbagliati.

... continua osservazione

Ad esempio, supponiamo di voler approssimare la derivata prima della funzione $u(x) = e^x$ nel punto $x = 1$ utilizzando la differenza finita in avanti e quella centrata. Nel grafico riportiamo il comportamento dell'errore relativo associato al calcolo di $u'(x)$, in scala logaritmica, per i valori di $h = 2^{-k}$, $k = 1, 2, \ldots 64$.



... continua osservazione

La cancellazione numerica non sempre è eliminabile. Tuttavia per ovviare a tale inconveniente si possono utilizzare formule di derivazione più rapidamente convergenti in modo tale da avere un'approssimazione sufficientemente accurata prima che il fenomeno della cancellazione numerica si presenti. In ogni caso, nelle applicazioni dei metodi che seguono, le formule di derivazione vengono utilizzate per discretizzare, e non per approssimare, le derivate presenti.