Derivazione Numerica

I metodi alle differenze finite sono basati sull'approssimazione numerica di derivate parziali. Per questo consideriamo come problema iniziale quello di approssimare le derivate di una funzione sufficientemente regolare $f(t)$. Supponiamo che l'intervallo di variabilità della t sia stato suddiviso in un insieme di intervalli ognuno di ampiezza h. Abbiamo ottenuto così l'insieme di punti

$$t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{N-1} < t_N.$$

Consideriamo tre punti consecutivi appartenenti a tale reticolazione, rispettivamente t_{i-1}, t_i e t_{i+1}.

Sviluppiamo la funzione $f(t_{i+1})$ in serie di Taylor prendendo come punto iniziale t_i:

$$f(t_{i+1}) = f(t_i) + hf'(t_i) + \frac{h^2}{2} f''(t_i) + \frac{h^3}{6} f'''(t_i) + \frac{h^4}{24} f^{\mathsf{iv}}(\xi_i),\ \ \xi_i \in [t_i, t_{i+1}]$$

e procediamo in modo analogo per $f(t_{i-1})$:

$$f(t_{i-1}) = f(t_i) - hf'(t_i) + \frac{h^2}{2} f''(t_i) - \frac{h^3}{6} f'''(t_i) + \frac{h^4}{24} f^{\mathsf{iv}}(\eta_i),\ \ \eta_i \in [t_{i-1}, t_i].$$

Sommiamo ora le due espressioni

$$f(t_{i+1}) + f(t_{i-1}) = 2f(t_i) + h^2 f''(t_i) + \frac{h^4}{24}\left[f^{\text{iv}}(\xi_i) + f^{\text{iv}}(\eta_i)\right]$$

ricavando

$$f''(t_i) = \frac{f(t_{i+1}) - 2f(t_i) + f(t_{i-1})}{h^2} - \frac{h^2}{24}\left[f^{\text{iv}}(\xi_i) + f^{\text{iv}}(\eta_i)\right]$$

Trascurando l'ultimo termine, l'approssimazione della derivata seconda è:

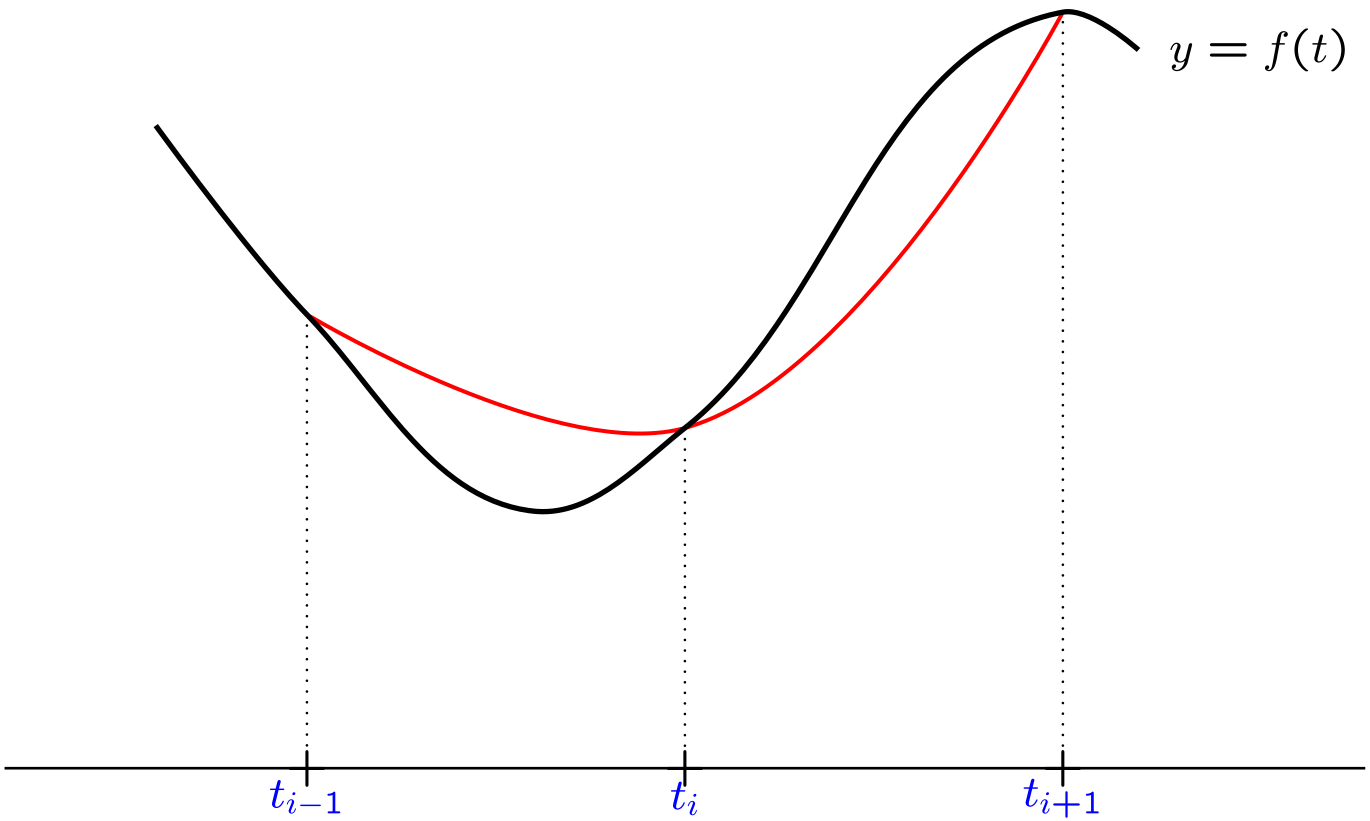
$$f''(t_i) \simeq \frac{f(t_{i+1}) - 2f(t_i) + f(t_{i-1})}{h^2}$$

mentre l'errore vale:

$$E(f''(t_i)) = -\frac{h^2}{12} f^{\mathrm{iv}}(\xi), \qquad \xi \in [t_{i-1}, t_{i+1}].$$

L'approssimazione si dice del secondo ordine perchè l'errore dipende da h^2.

Interpretazione Geometrica



L'approssimazione della derivata seconda coincide con il valore della derivata seconda della parabola passante per i punti $(t_{i-1}, f(t_{i-1}))$, $(t_i, f(t_i))$ e $(t_{i+1}, f(t_{i+1}))$.
Infatti scrivendo tale equazione come:

$$p(t) = a(t - t_i)(t - t_{i-1}) + b(t - t_{i-1}) + c$$

risulta

$$\begin{aligned} c &= f(t_{i-1}) \\ b &= \frac{f(t_i) - f(t_{i-1})}{h} \\ a &= \tfrac{f(t_{i+1}) - 2f(t_i) + f(t_{i-1})}{2h^2} \end{aligned}$$

e la proprietà segue poichè:

$$p''(t) = 2a.$$

Poniamoci lo stesso problema per la derivata prima e procediamo nello stesso modo cioè scrivendo le serie di Taylor per $f(t_{i-1})$ e $f(t_{i+1})$:

$$f(t_{i+1}) = f(t_i) + hf'(t_i) + \frac{h^2}{2}f''(t_i) + \frac{h^3}{6}f'''(\sigma_i), \;\; \sigma_i \in [t_i, t_{i+1}]$$

$$f(t_{i-1}) = f(t_i) - hf'(t_i) + \frac{h^2}{2}f''(t_i) - \frac{h^3}{6}f'''(\mu_i), \;\; \mu_i \in [t_{i-1}, t_i]$$

Sottraiamo la seconda dalla prima:

$$f(t_{i+1}) - f(t_{i-1}) = 2hf'(t_i) + \frac{h^3}{6}\left[f'''(\sigma_i) + f'''(\mu_i)\right]$$

ottenendo

$$f'(t_i) = \frac{f(t_{i+1}) - f(t_{i-1})}{2h} - \frac{h^2}{12}\left[f'''(\sigma_i) + f'''(\mu_i)\right]$$

e, trascurando l'ultimo termine, l'approssimazione della derivata prima è:

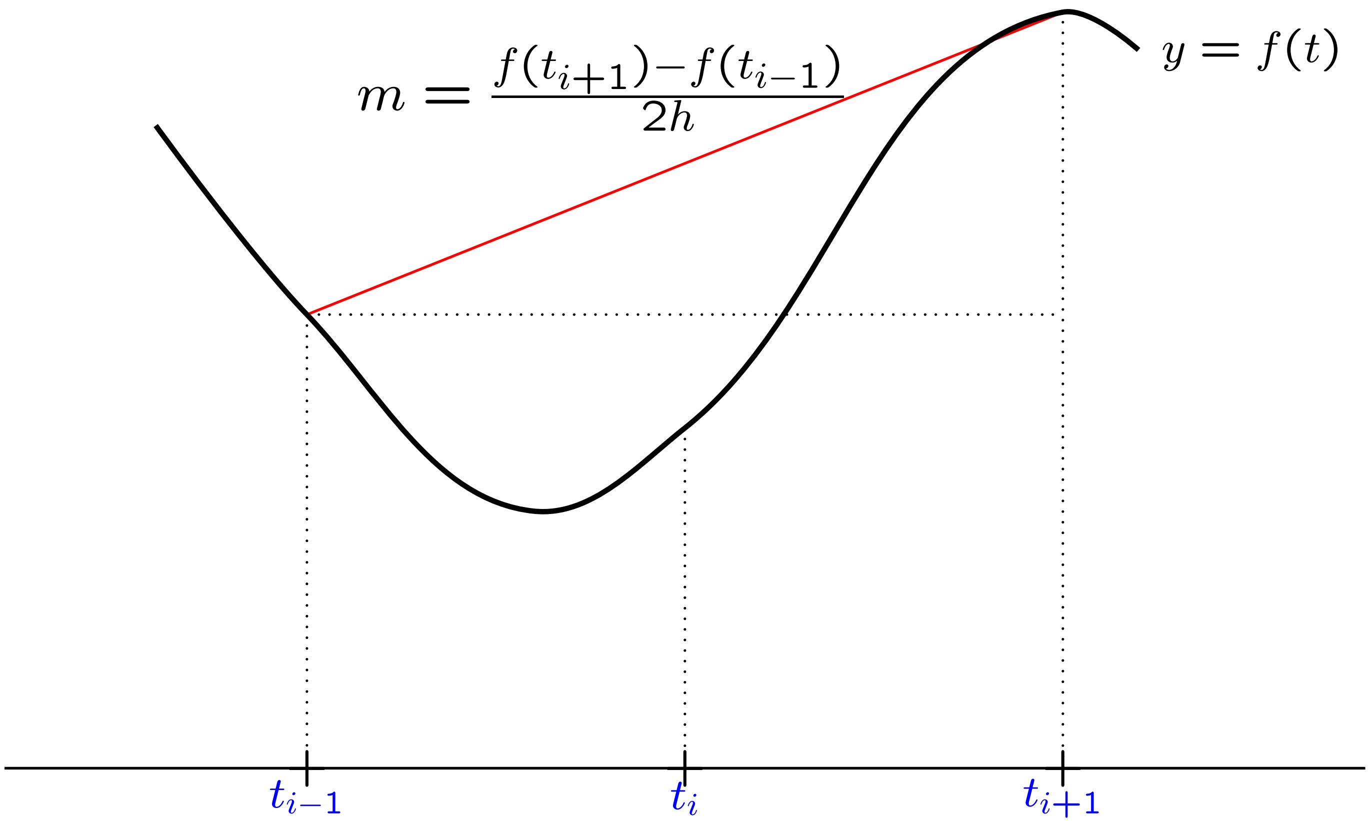
$$f'(t_i) \simeq \frac{f(t_{i+1}) - f(t_{i-1})}{2h}.$$

In questo caso l'errore vale:

$$E(f'(t_i)) = -\frac{h^2}{6} f'''(\delta), \qquad \delta \in [t_{i-1}, t_{i+1}].$$

La formula prende il nome di formula alle differenze centrali.
Osserviamo anche in questo caso l'approssimazione numerica è del secondo ordine perchè l'errore dipende da h^2.

Interpretazione Geometrica



Vediamo ora altre due approssimazioni per la derivata prima. Infatti possiamo anche scrivere:

$$f(t_{i+1}) = f(t_i) + hf'(t_i) + \frac{h^2}{2} f''(\xi_i), \;\; \xi_i \in [t_i, t_{i+1}]$$

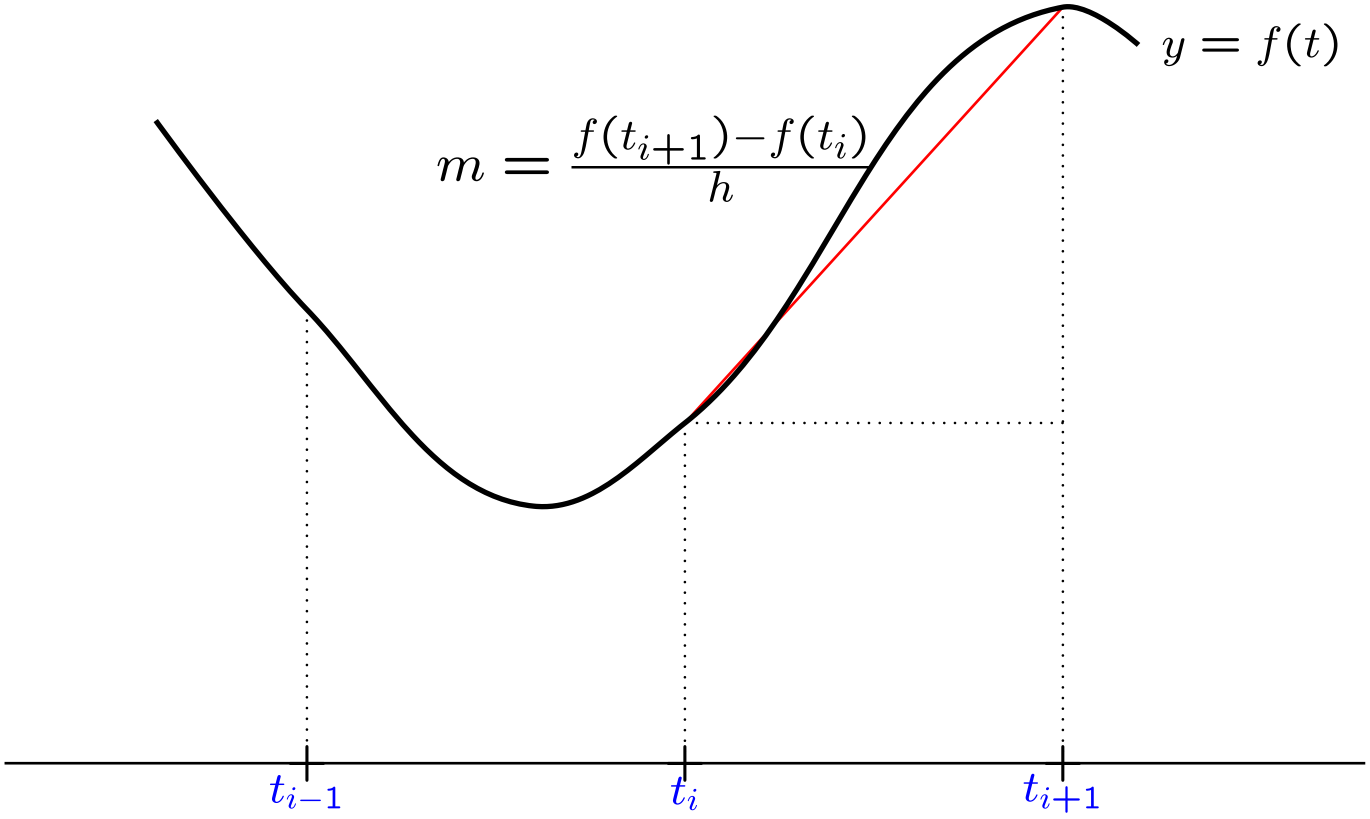
da cui si ricava immediatamente la formula alle differenze in avanti:

$$f'(t_i) \simeq \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{h}$$

con errore

$$E(f'(t_i)) = -\frac{h}{2} f''(\xi_i),$$

Interpretazione Geometrica



Analogamente nell'intervallo a sinistra di t_i,

$$f(t_{i-1}) = f(t_i) - hf'(t_i) + \frac{h^2}{2}f''(\mu_i), \;\; \mu_i \in [t_{i-1}, t_i]$$

da cui si ricava immediatamente la formula alle differenze all'indietro:

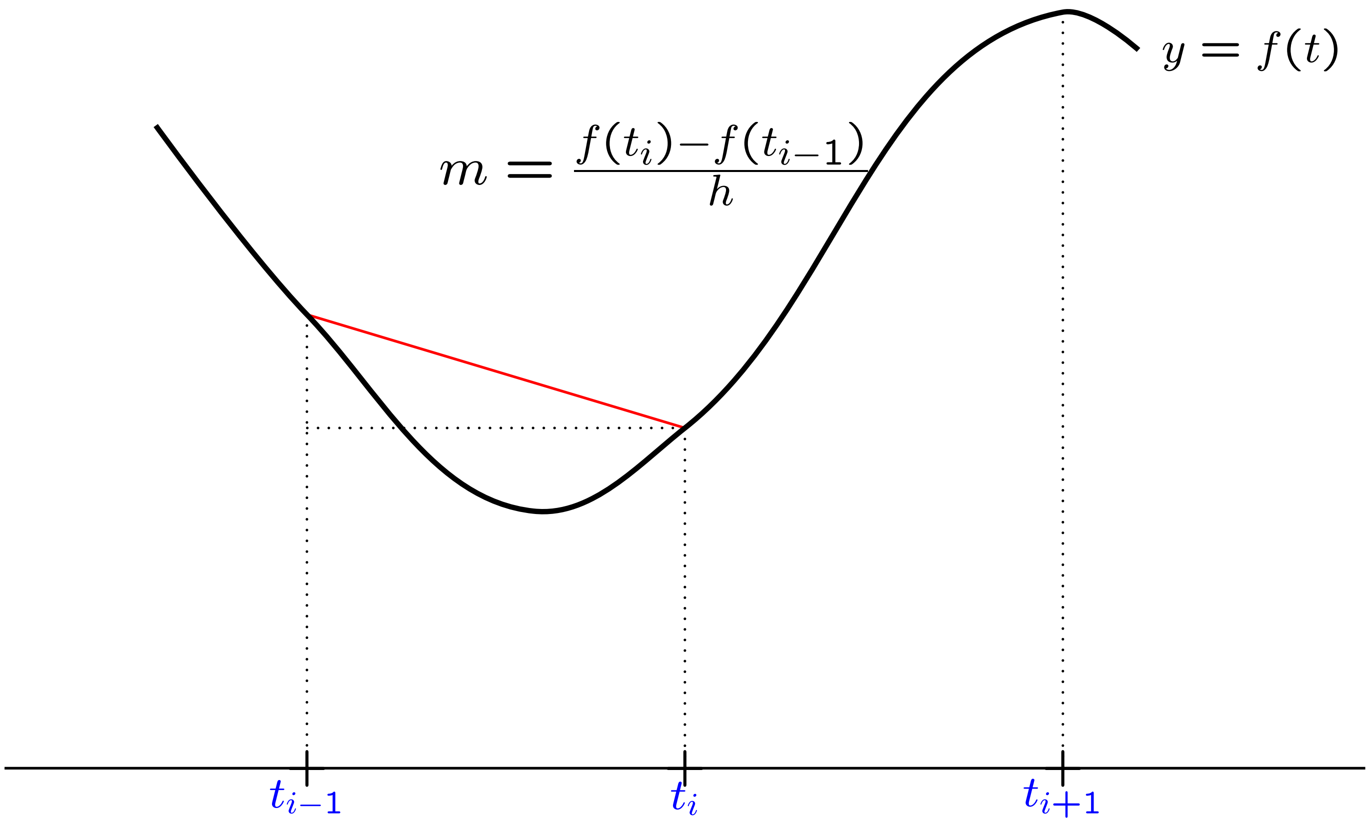
$$f'(t_i) \simeq \frac{f(t_i) - f(t_{i-1})}{h}$$

con errore

$$E(f'(t_i)) = \frac{h}{2}f''(\mu_i).$$

Queste due formule hanno ordine 1, inferiore rispetto alla formula alle differenze centrali, tuttavia hanno il pregio di poter essere applicate quando la derivata prima è discontinua in t_i.

Interpretazione Geometrica



Approssimazioni di ordine superiore

Per determinare approssimazioni di ordine superiore per le derivate prima e seconda di una funzione di variabile reale è necessario aumentare il numero di punti che sono coinvolti. Per esempio volendo calcolare un'approssimazione per la derivata seconda in t_i che coinvolge due a punti a destra e due a sinistra (quindi in tutto 5 punti) è possibile ottenere una formula molto più precisa. Si vogliono determinare i coefficienti della seguente relazione

$$f''(t_i) \simeq \alpha f(t_{i-2}) + \beta f(t_{i-1}) + \gamma f(t_i) + \delta f(t_{i+1}) + \varepsilon f(t_{i+2})$$

in modo tale che l'ordine sia il massimo possibile.

Si scrivono gli sviluppi in serie di Taylor delle quantità che intervengono nell'approssimazione:

$$f(t_{i\pm 2}) = f(t_i) \pm 2hf'(t_i) + 2h^2 f''(t_i) \pm \frac{4h^3}{3} f'''(t_i) + \frac{2h^4}{3} f^{\text{iv}}(t_i) \pm \frac{4h^5}{15} f^{\text{v}}(\sigma_i)$$

$$f(t_{i\pm 1}) = f(t_i) \pm hf'(t_i) + \frac{h^2}{2} f''(t_i) \pm \frac{h^3}{6} f'''(t_i) + \frac{h^4}{24} f^{\text{iv}}(t_i) \pm \frac{h^5}{120} f^{\text{v}}(\mu_i).$$

Raccogliendo i termini con il medesimo ordine di derivata e imponendo che la combinazione lineare abbia nulli i coefficienti dei termini differenziali di ordine 0,1,3 e 4, mentre quello di ordine 2 deve essere uguale a 1 si ottiene un sistema di cinque equazioni nelle cinque incognite:

$$\begin{cases} \alpha & +\beta & +\gamma & +\delta & +\varepsilon & = & 0 \\ -2h\alpha & -h\beta & & +h\delta & +2h\varepsilon & = & 0 \\ 2h^2\alpha & +\frac{h^2}{2}\beta & & +\frac{h^2}{2}\delta & +2h^2\varepsilon & = & 1 \\ -\frac{4}{3}h^3\alpha & -\frac{h^3}{6}\beta & & +\frac{h^3}{6}\delta & +\frac{4}{3}h^3\varepsilon & = & 0 \\ \frac{2}{3}h^4\alpha & +\frac{h^4}{24}\beta & & +\frac{h^4}{24}\delta & +\frac{2}{3}h^4\varepsilon & = & 0 \end{cases}$$

che ammette come soluzione

$$\alpha = \varepsilon = -\frac{1}{12h^2}, \quad \gamma = -\frac{5}{2h^2}, \quad \beta = \delta = \frac{4}{3h^2}$$

$$f''(t_i) \simeq \frac{1}{h^2}\left[-\frac{1}{12}f(t_{i-2}) + \frac{4}{3}f(t_{i-1}) - \frac{5}{2}f(t_i) + \frac{4}{3}f(t_{i+1}) - \frac{1}{12}f(t_{i+2})\right]$$

con errore

$$E(f''(t_i)) = ch^4 f^{(\mathrm{vi})}(\xi_i), \qquad c \in \mathbb{R},$$

quindi di ordine 4.

In modo analogo si possono ottenere approssimazioni per la derivata prima di ordine 2, prendendo solo punti a destra di t_i:

$$f'(t_i) \simeq \frac{4f(t_{i+1}) - 3f(t_i) - f(t_{i+2})}{2h}$$

e di ordine 3:

$$f'(t_i) \simeq \frac{f(t_{i-2}) - 6f(t_{i-1}) + 3f(t_i) + 2f(t_{i+1})}{6h}.$$

Approssimazione della derivata prima di $f(x) = \log x$, in $x = 4$:

h	Diff.C.	Diff.Av.	Diff.In.	Ordine 2	Apx. su 4 punti
1	$5.41E-3$	$2.69E-2$	$3.77E-2$	$6.45E-3$	$3.46E-3$
0.5	$1.31E-3$	$1.44E-2$	$1.71E-2$	$2.01E-3$	$3.09E-4$
0.25	$3.26E-4$	$7.50E-3$	$8.15E-3$	$5.69E-4$	$3.40E-5$
0.1	$5.21E-5$	$3.07E-3$	$3.18E-3$	$9.86E-5$	$2.04E-6$
0.01	$5.21E-7$	$3.18E-3$	$3.13E-4$	$1.04E-6$	$1.96E-9$
0.005	$1.30E-7$	$1.56E-4$	$1.56E-4$	$2.60E-7$	$2.45E-10$

Approssimazione della derivata seconda di $f(x) = \log x$, in $x = 4$:

h	Ordine 2	Ordine 4
1	$2.0385E-3$	$4.2214E-4$
0.5	$4.9343E-4$	$2.1603E-5$
0.25	$1.2239E-4$	$1.2904E-6$
0.1	$1.9539E-5$	$3.2629E-8$
0.01	$1.9531E-7$	$4.9546E-12$
0.005	$4.8825E-8$	$1.4567E-13$