Introduzione al calcolo numerico

- Derivazione
- Integrazione
- Soluzione di equazioni

Derivazione

Derivazione numerica

Il calcolo della derivata di una funzione in un punto implica un processo al limite che può solo essere approssimato da un calcolatore. Supponiamo nota la forma funzionale di f(x). Una prima approssimazione della sua derivata è:

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

Per *h* sufficientemente piccolo. Con *h* molto piccolo però può diventare delicato dal punto di vista numerico calcolare la differenza fra i due numeri a numeratore (molto vicini tra loro).

Per capire come fare meglio analizziamo lo sviluppo in serie di Taylor di *f* in un intorno di *x*…

Derivazione numerica (II)

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + \frac{1}{6}h^3 f'''$$

da cui

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{1}{2}hf''(x) + \mathcal{O}(h^2)$$

L'errore fatto sostituendo il rapporto incrementale scritto sopra al posto della derivata di f è dunque di ordine h.

Possiamo migliorare le cose notando che:

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) - \frac{1}{6}h^3 f'''$$

da cui

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{1}{6}h^2 f'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

Derivazione numerica (III)

Dunque a parità di h l'errore su

$$g(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{6} f'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

sarà di ordine h^2 e g è quindi una approssimazione migliore di f'.

Per fare ancora meglio notiamo che:

$$g(2h) = f'(x) + \frac{2h^2}{3} f'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$\frac{4g(h) - g(2h)}{3} = f'(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

Derivazione numerica (IV)

Risolvendo per *f'(x)* otteniamo:

$$f'(x) = \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h} + \mathcal{O}(h^4)$$

Questa formula è sensibilmente più accurata e anche più stabile numericamente. Le formule con le differenze "asimmetriche" andrebbero utilizzate solo nel caso in cui sono definite solo la derivata destra e/o quella sinistra, o si ha una funzione per punti e occorre calcolare la derivata ad un estremo. Verificare che

$$f'(x) = \frac{f(x+4h) - 12f(x+2h) + 32f(x+h) - 21f(x)}{12h} + \mathcal{O}(h^3)$$

Differenze finite

Sia x_i una sequenza di punti equispaziati a distanza h uno dall'altro e f_i i valori assunti dalla funzione f in ciascuno di essi. Utilizzando, come visto, lo sviluppo in serie di Taylor di f si possono ottenere le seguenti tabelle, con un errore $O(h^2)$ e $O(h^4)$ rispettivamente:

$\mathcal{O}(h^2)$	f_{i-2}	f_{i-1}	f_i	f_{i+1}	f_{i+2}
$2hf_i'$		-1	0	1	
h^2f_i''		1	-2	1	
$2h^3f_i'''$	-1	2	0	-2	1

$\mathcal{O}(h^4)$	f_{i-2}	f_{i-1}	f_i	f_{i+1}	f_{i+2}
$12hf_i'$	1	-8	0	8	-1
$12h^2f_i''$	-1	16	-30	16	-1

Differenze finite (II)

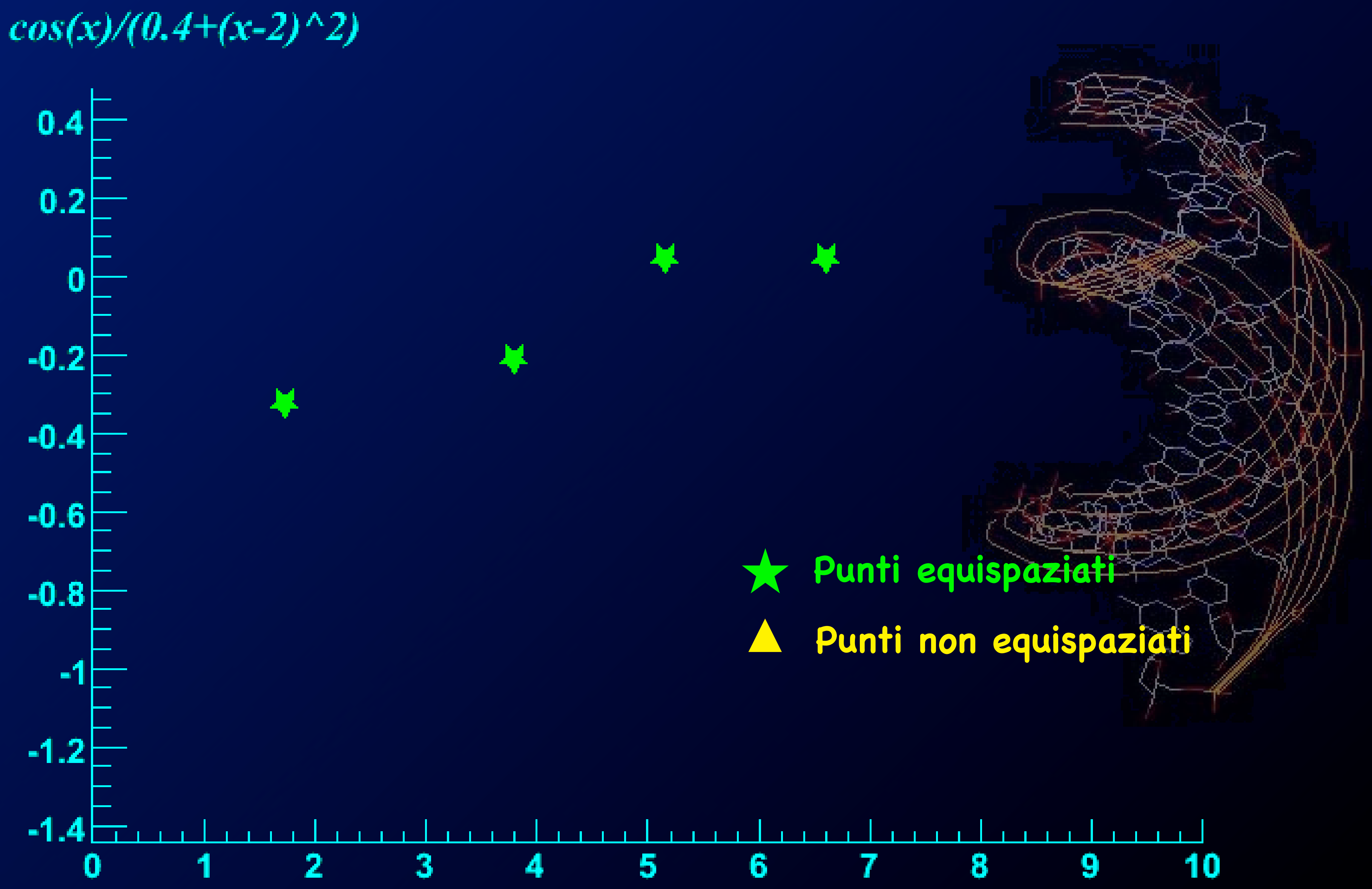
Similmente, per la derivata destra e sinistra:

$\mathcal{O}(h^4)$	f_i	f_{i+1}	f_{i+2}	f_{i+3}
$h f_i'$	-1	1		
$h^2 f_i''$	1	-2	2	
$h^3 f_i'''$	-1	3	-3	-1

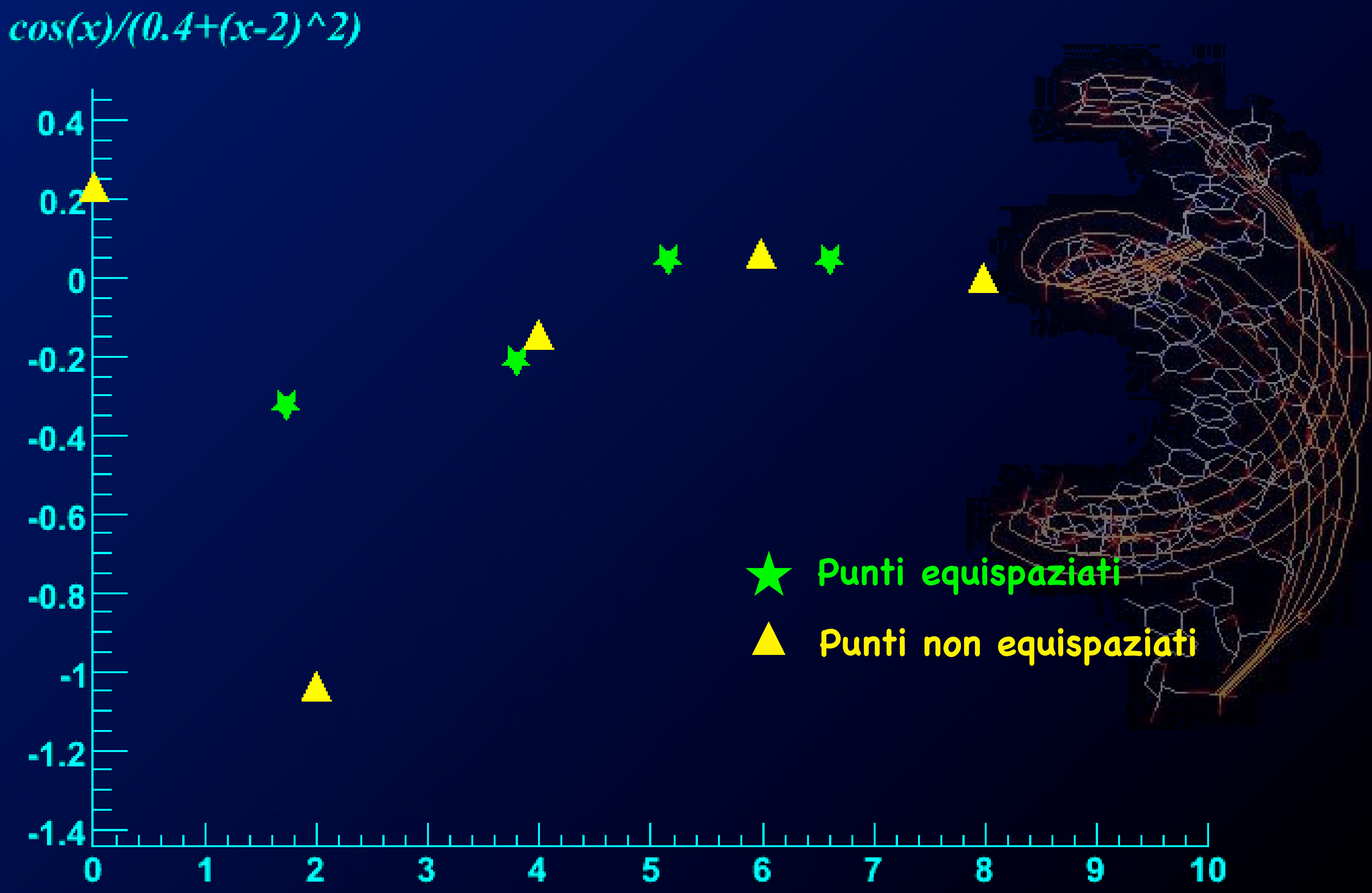
$\mathcal{O}(h^2)$	f_i	f_{i+1}	f_{i+2}	f_{i+3}
$2h f_i'$	-3	4	-1	
$h^2 f_i''$	2	-5	4	-1

$\mathcal{O}(h^4)$	f_i	f_{i-1}	f_{i-2}	f_{i-3}
$h f_i'$	1	-1		
$h^2 f_i''$	1	-2	1	
$h^3 f_i'''$	1	-3	3	-1

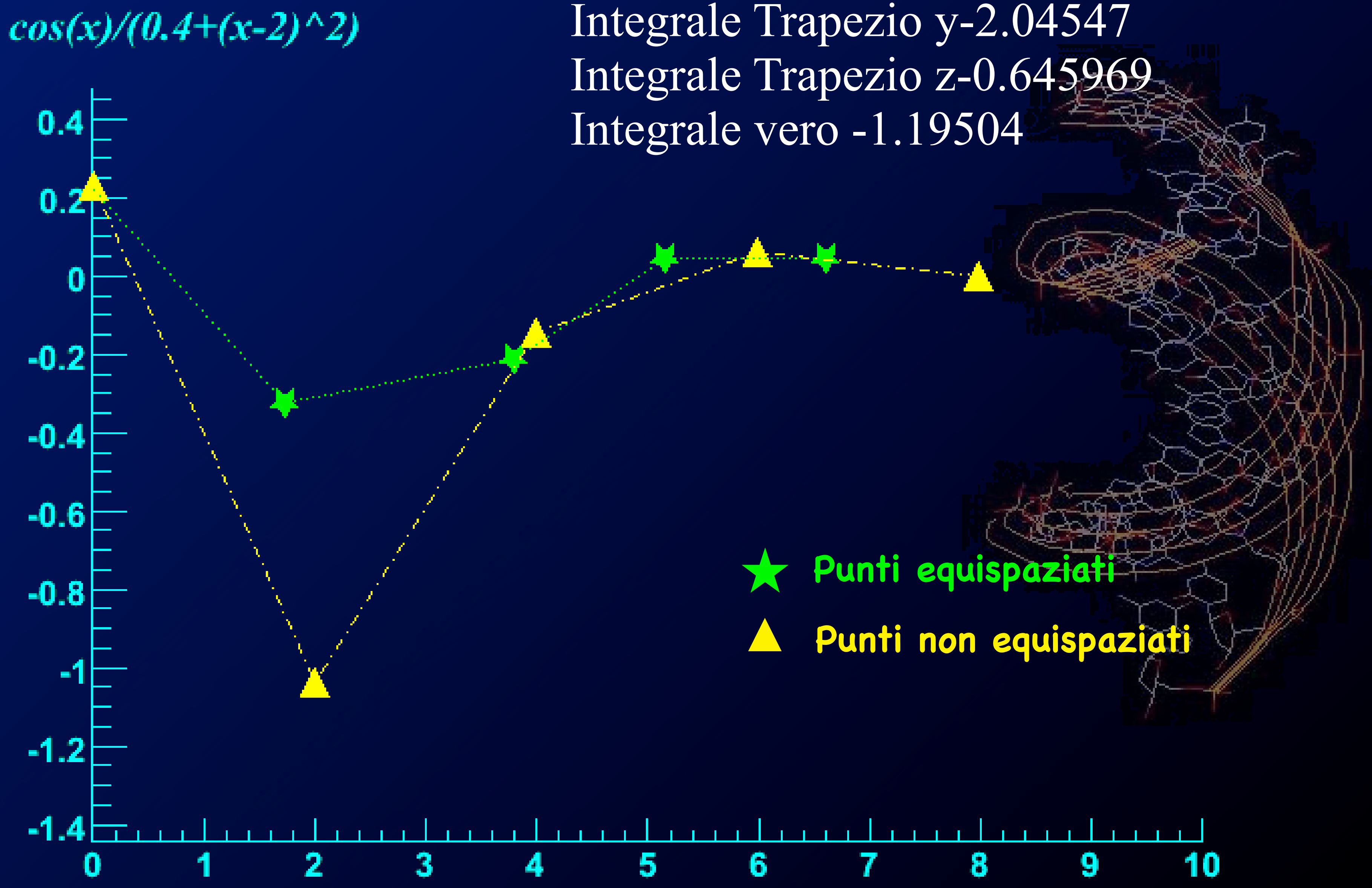
$\mathcal{O}(h^2)$	f_i	f_{i-1}	f_{i-2}	f_{i-3}
$2h f_i'$	3	-4	1	
$h^2 f_i''$	2	-5	4	-1

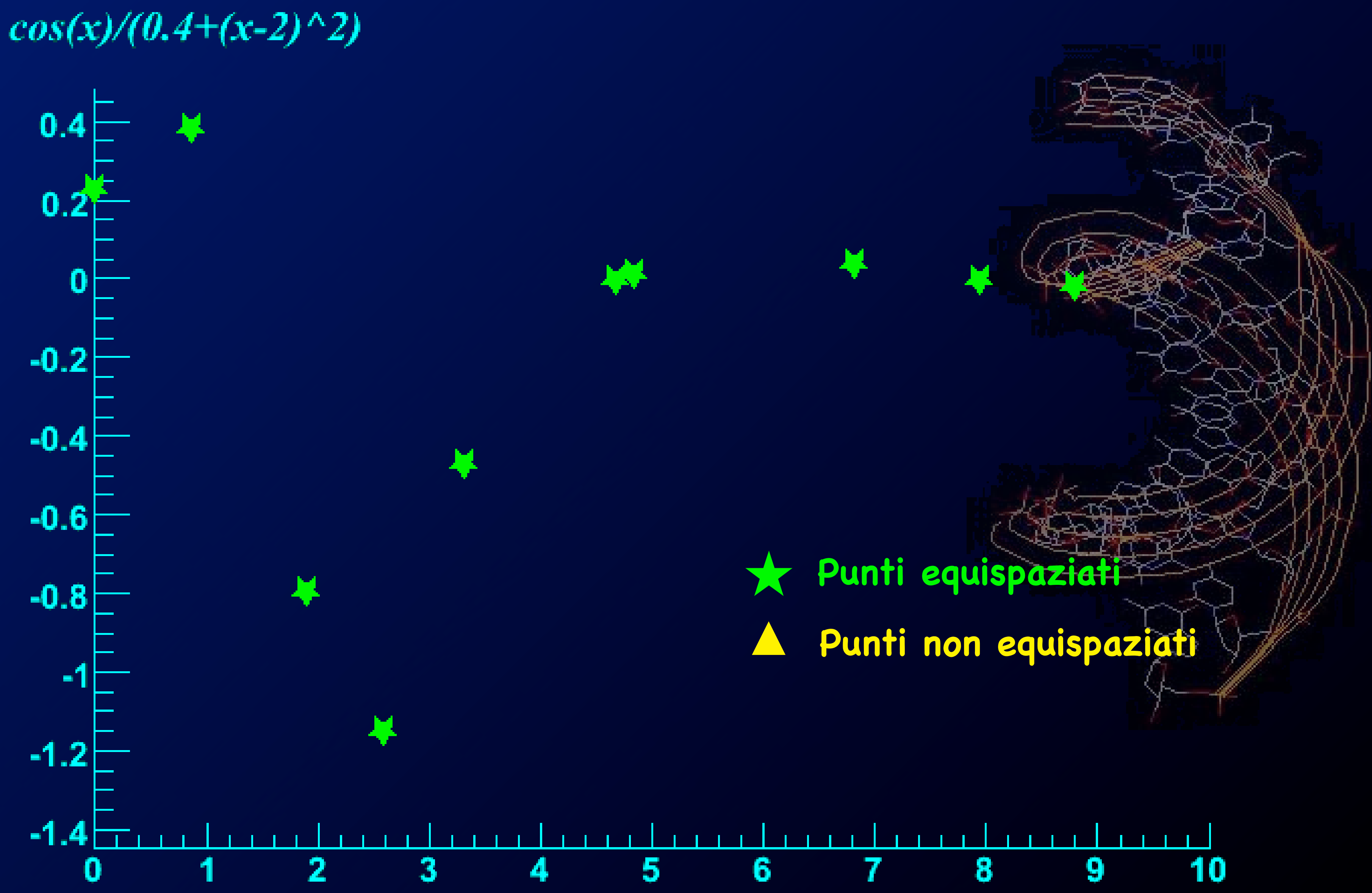


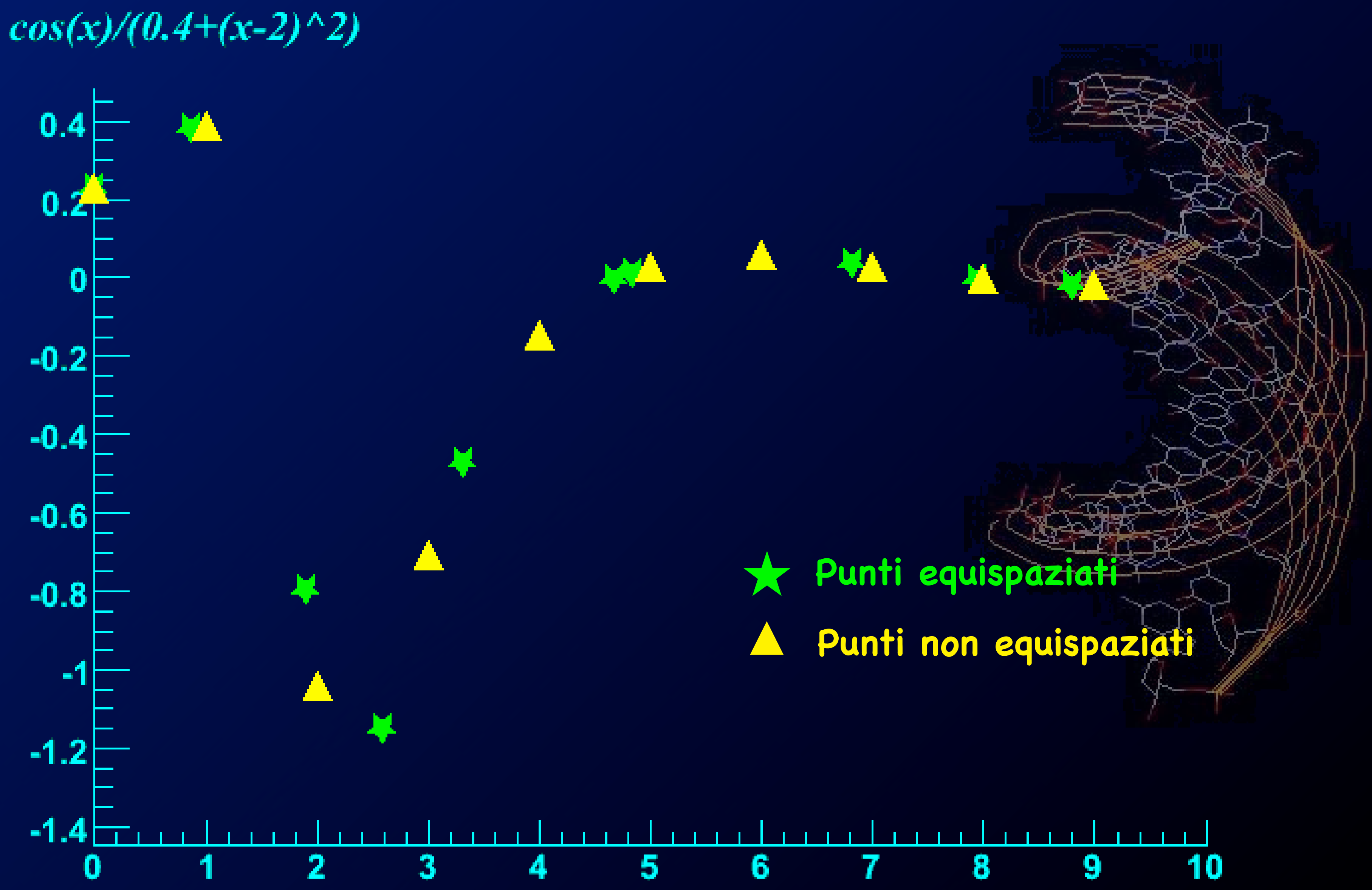
cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati

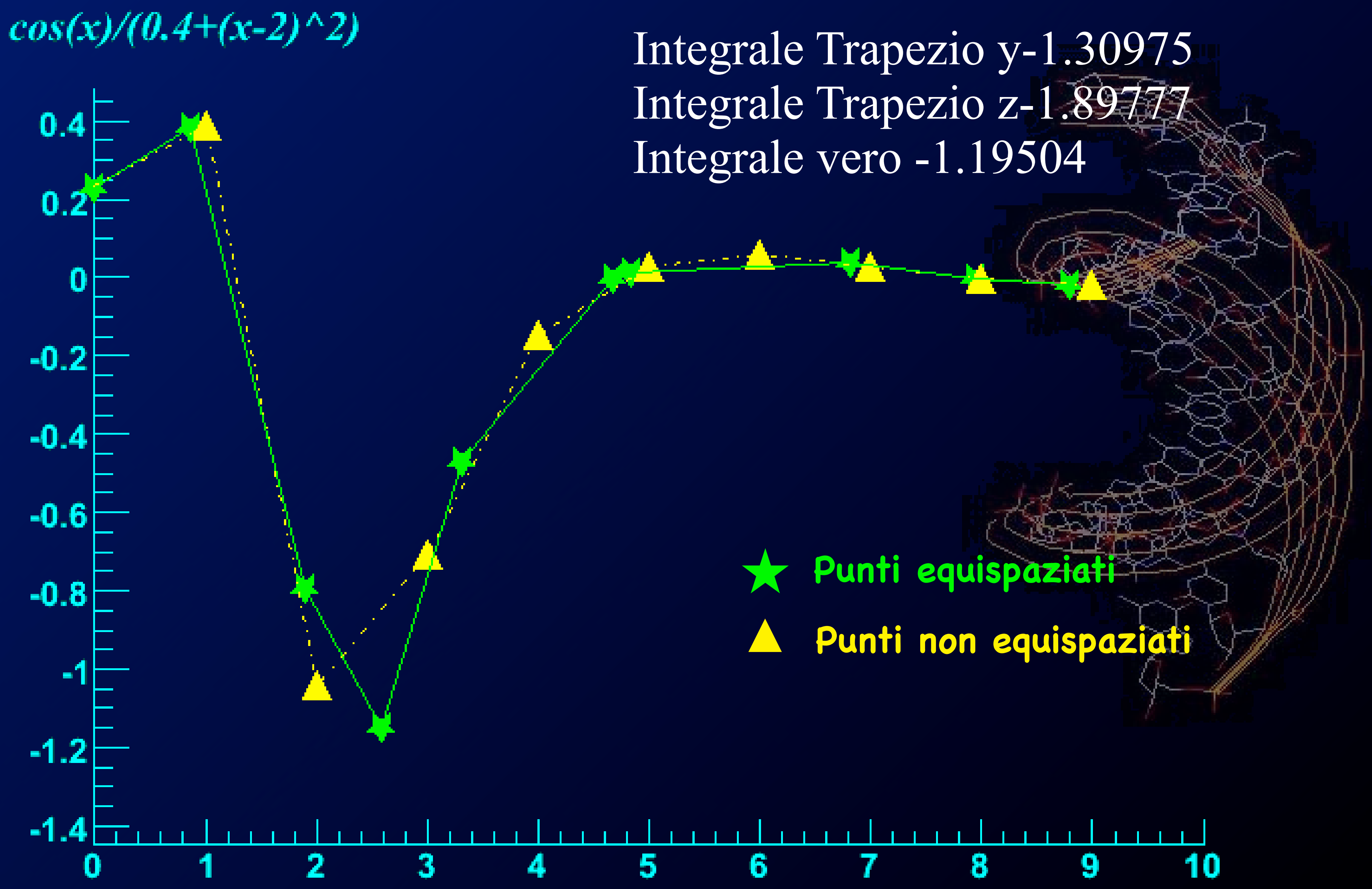

cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati

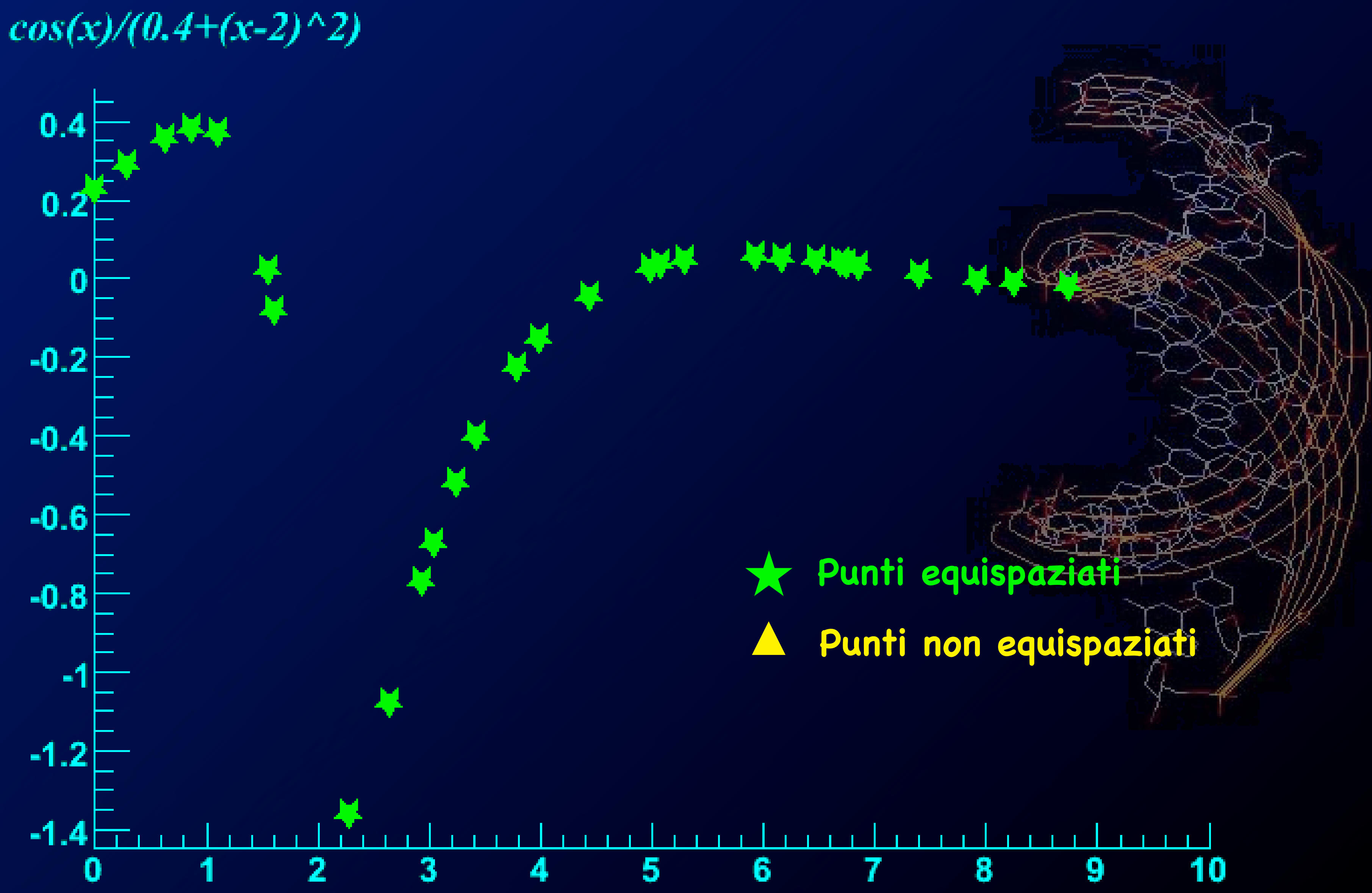
Integrale Trapezio y-2.04547
Integrale Trapezio z-0.645969
Integrale vero -1.19504

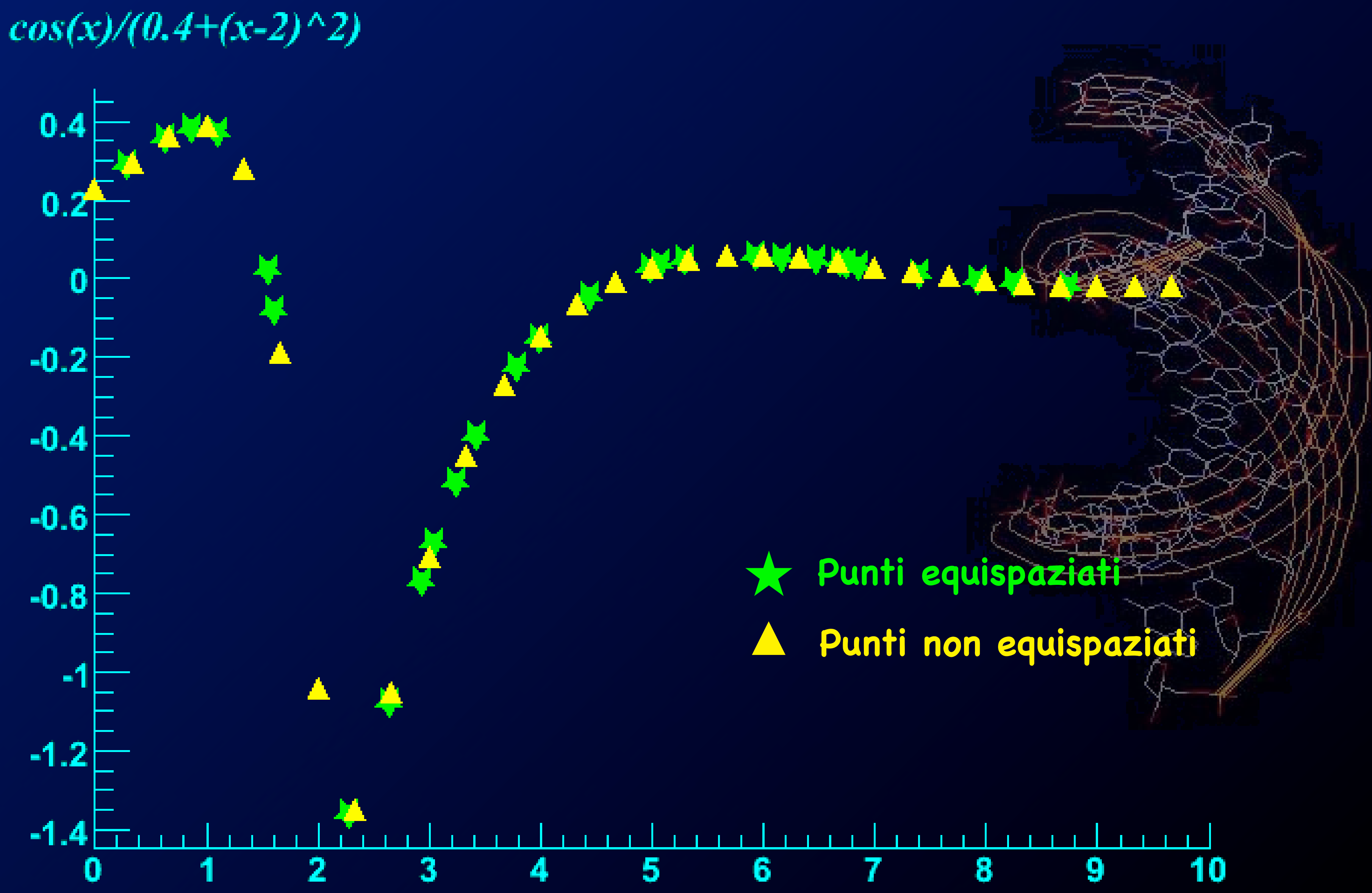


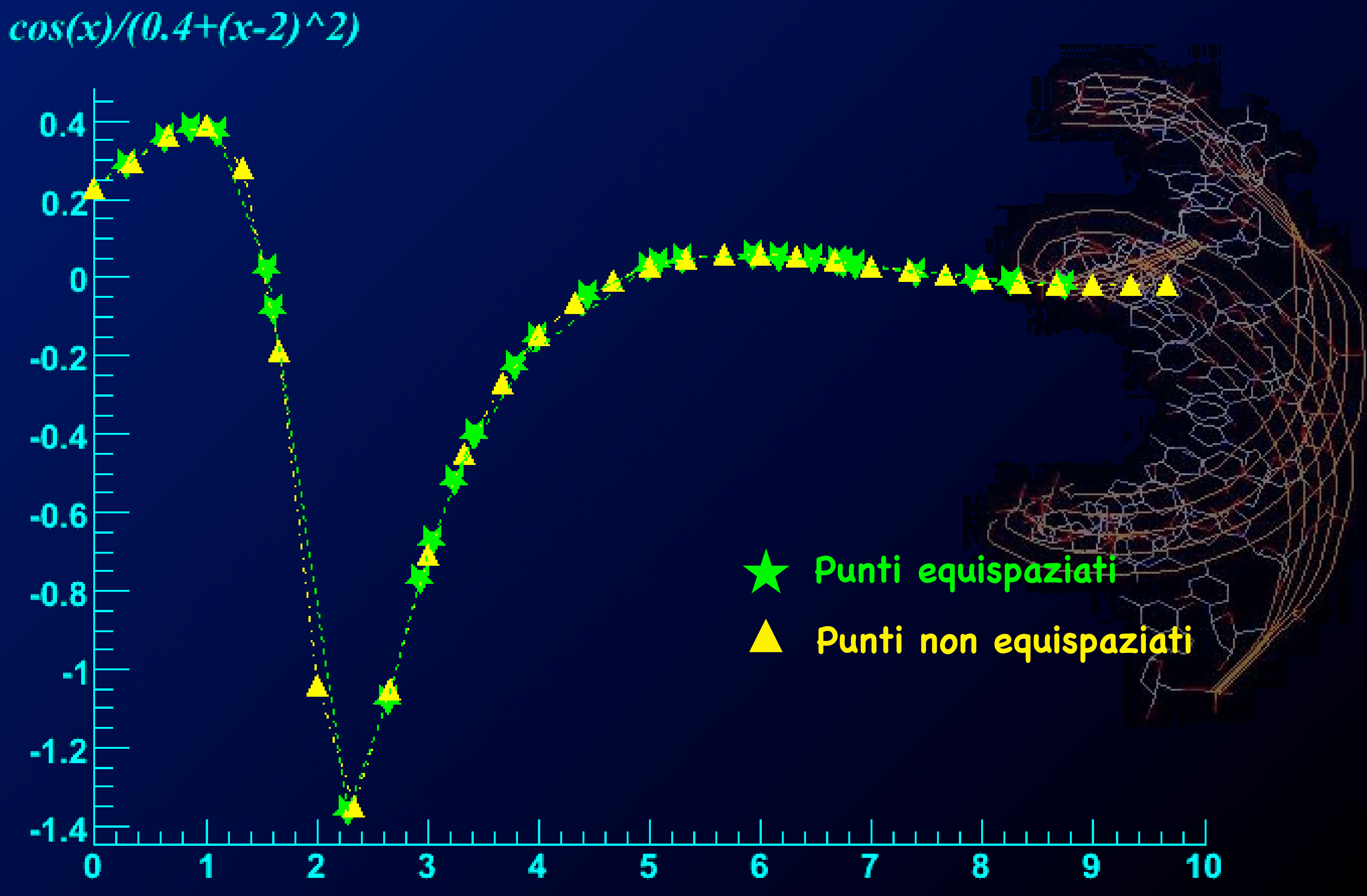

cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati


cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati

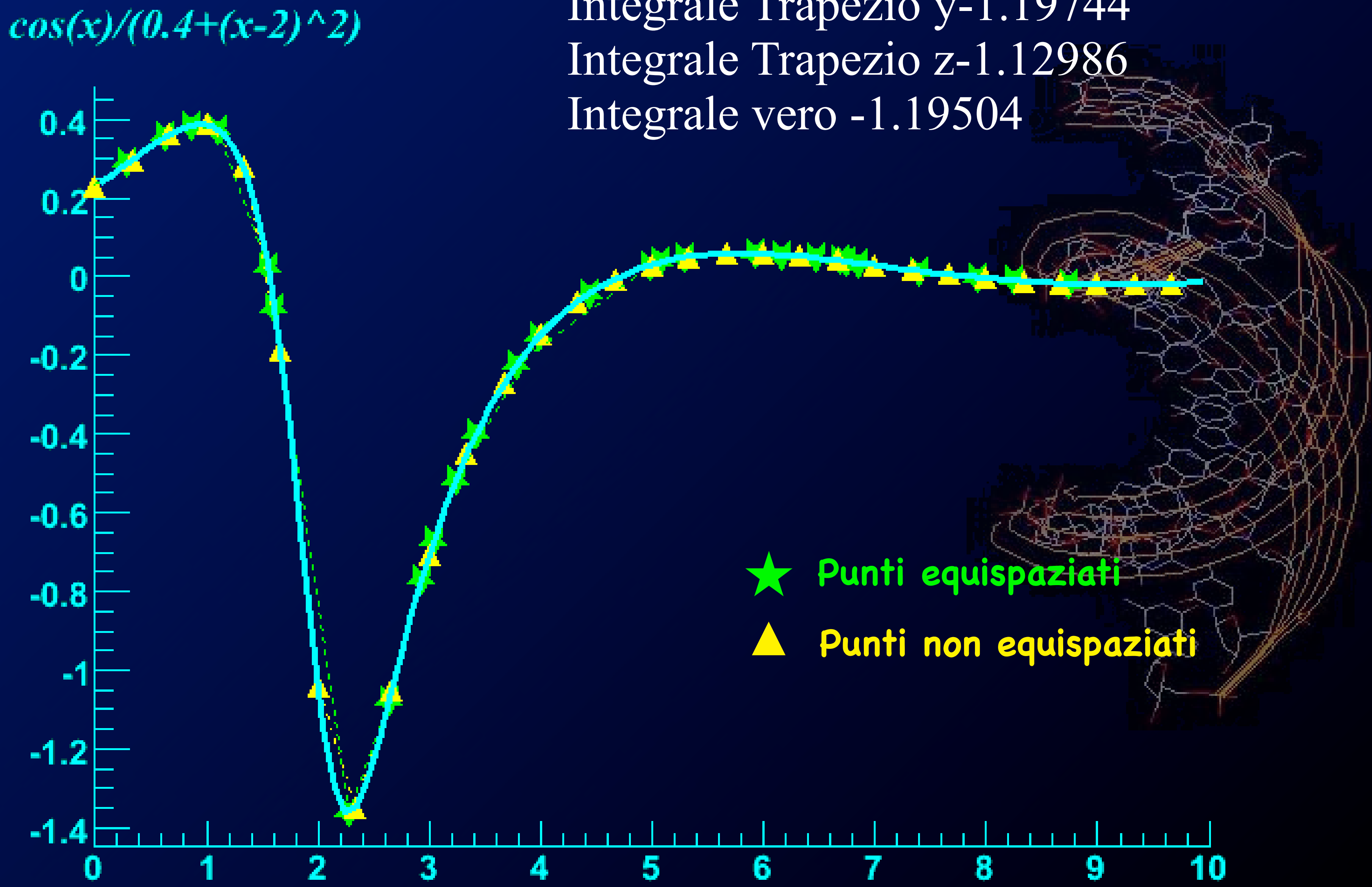

cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
Integrale Trapezio y-1.30975
Integrale Trapezio z-1.89777
Integrale vero -1.19504
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati


cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati


cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati


cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati

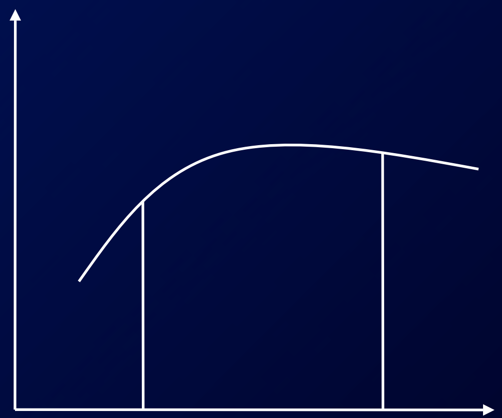
Integrale Trapezio y-1.19744
Integrale Trapezio z-1.12986
Integrale vero -1.19504

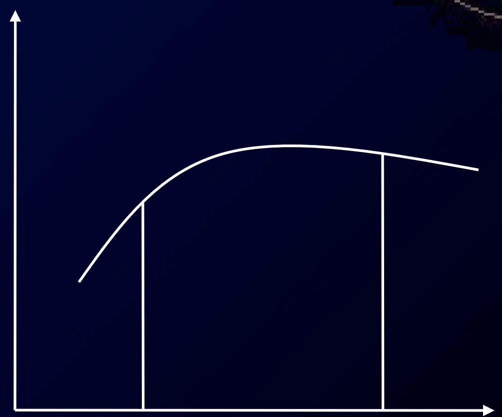


Integrazione

Integrazione numerica

L'integrazione numerica si basa semplicemente sulla definizione di integrale definito e sulla interpolazione di una funzione in un certo intervallo con una funzione polinomiale data. Ad esempio se il grado del polinomio è zero si sta approssimando la funzione con una costante e si dovrà calcolare l'area di un rettangolo, se è 1 si sta considerando la funzione lineare e si dovrà calcolare l'area di un trapezio etc.





Metodo dei trapezi

Il metodo dei trapezi

Con una approssimazione al primo ordine l'integrale definito di una generica funzione f si può scrivere:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2}(f(b) - f(a)) = I_1$$

Se l'intervallo [a,b] non è piccolo l'approssimazione lineare può risultare troppo rozza: ma sfruttando l'additività dell'integrale si può suddividere l'intervallo in n intervalli più piccoli di ampiezza h =(b-a)/n. Su ogni intervallino si avrà:

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(x_i) - f(x_i + h)) = \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})$$

Il metodo dei trapezi (II)

Dati ***n*** intervallini si ottiene allora la stima dell'integrale data da:

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_n = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + f_n)$$

Data la funzione ***f*** e l'intervallo ***[a,b]*** un calcolo dell'integrale potrà essere fatto per via iterativa calcolando la stima ***In*** dell'integrale al crescere di ***n*** e fermandosi quando due stime successive sono entro una certa tolleranza:

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_n \quad \text{quando} \quad |I_{n+1} - I_n| < \epsilon$$

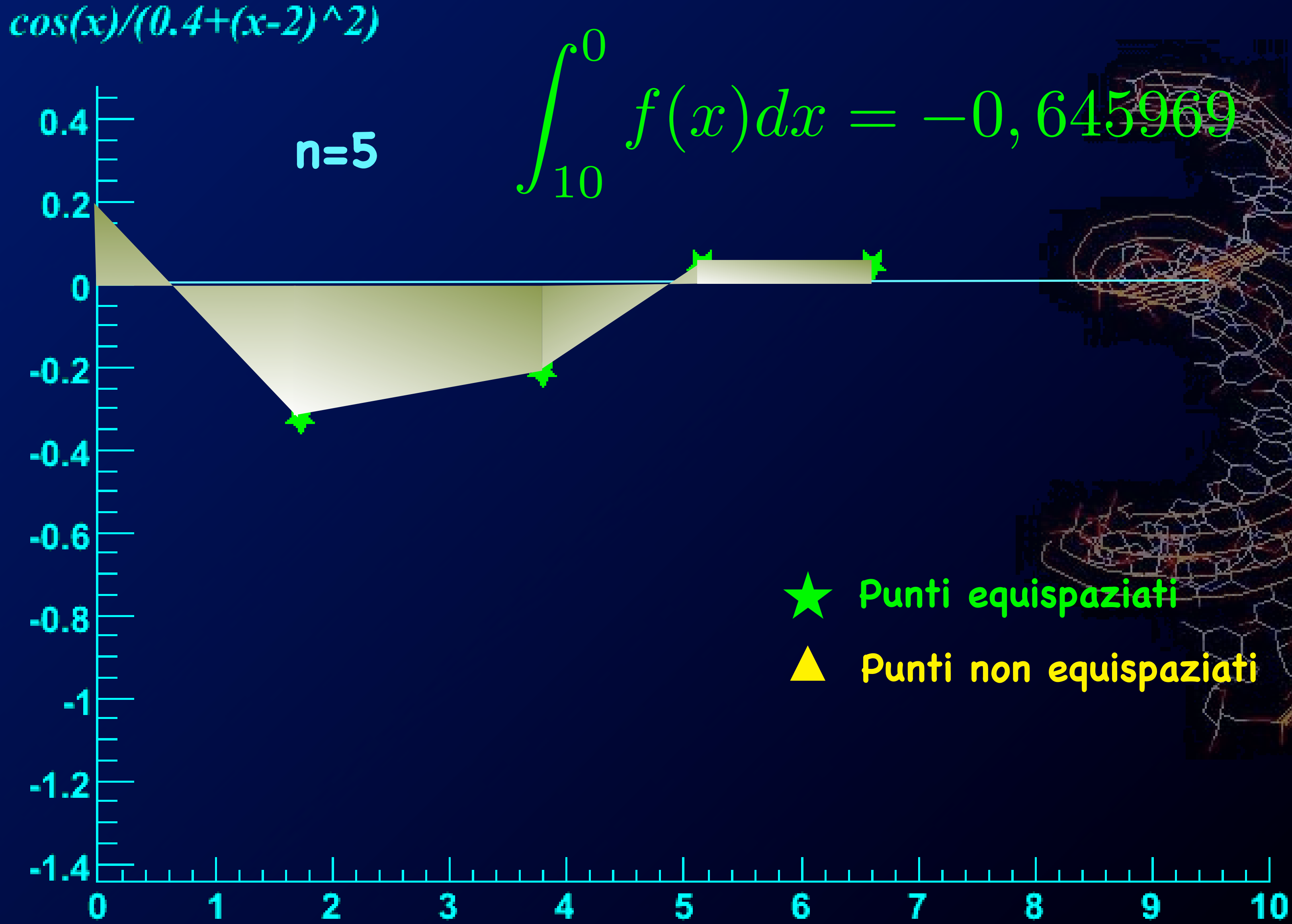
Il metodo dei trapezi (III)

Il modo più efficiente di aumentare n è di raddoppiarlo ad ogni iterazione in modo da dover calcolare la funzione ogni volta solo su metà dei punti, avendola calcolata sull'altra metà nell'iterazione precedente:

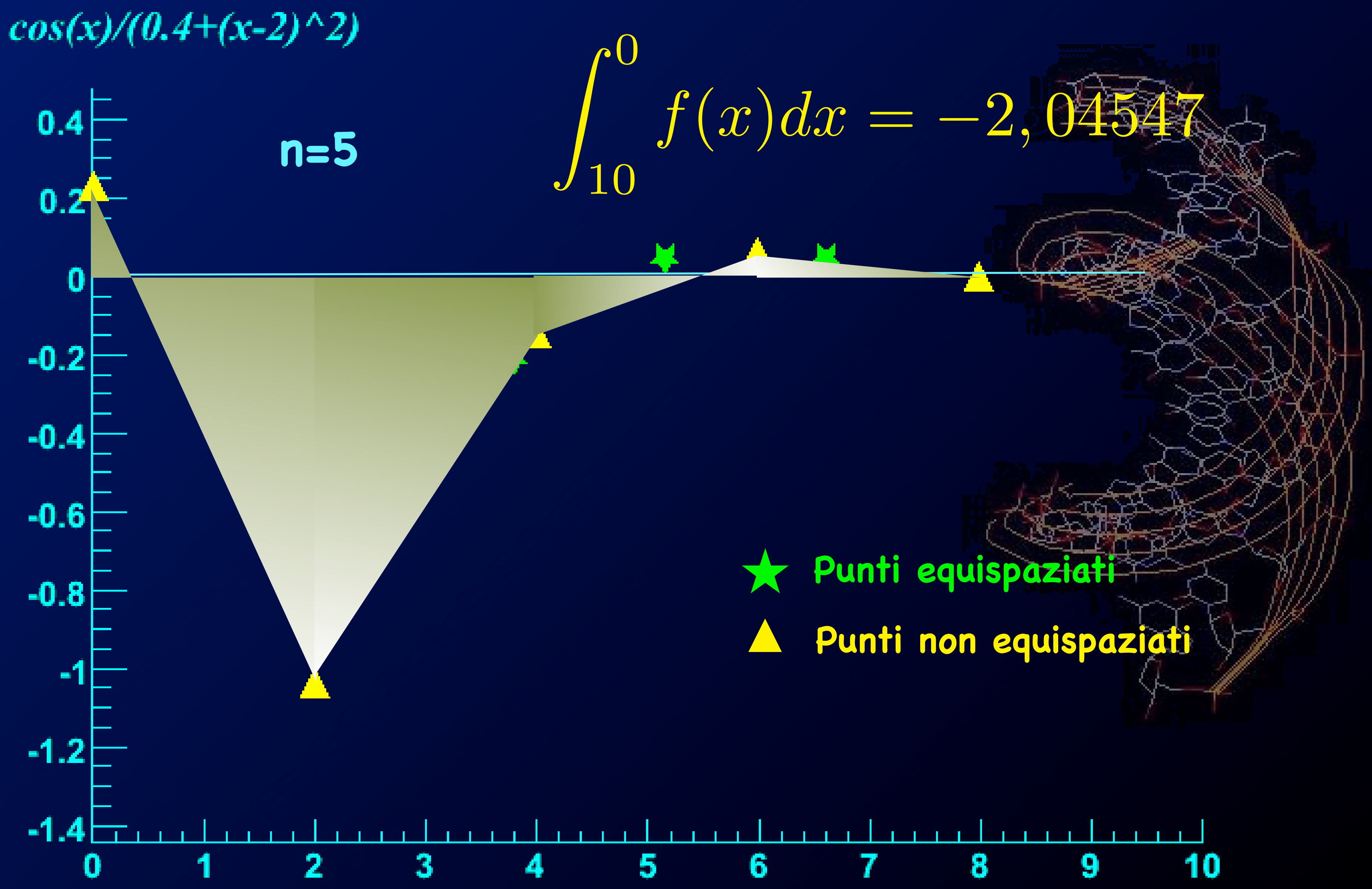
$$h = \frac{b-a}{n} \qquad h_{new} = \frac{b-a}{2n} = h/2$$

$$I_n = h\left(\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \cdots + \frac{f_n}{2}\right)$$

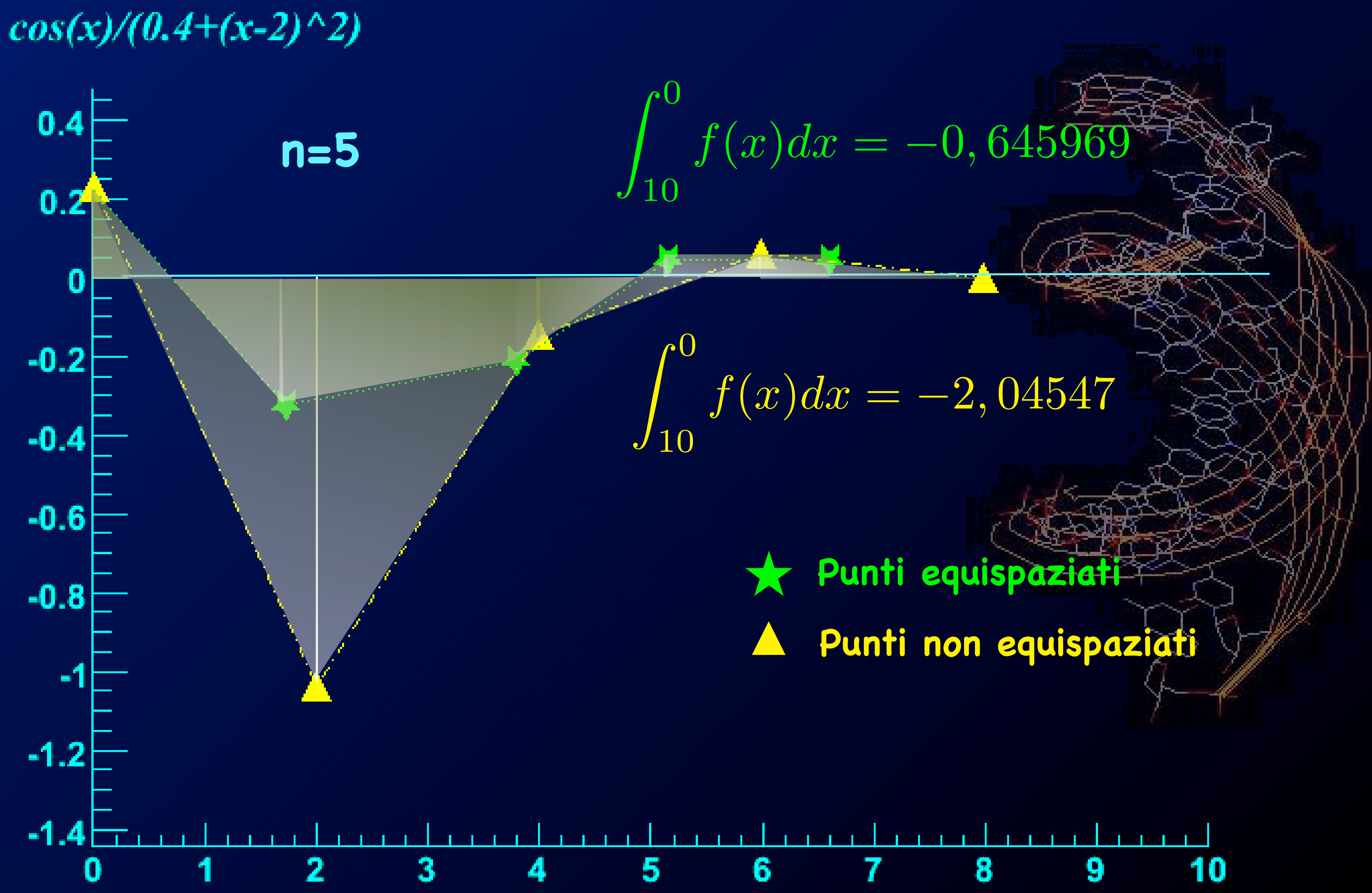
$$I_{2n} = \frac{I_n}{2} + h_{new} \sum_{\substack{k=1 \\ k=2n-1}}^{n} f(a + kh_{new})$$



$$\int_{10}^{0} f(x)dx = -0,645969$$



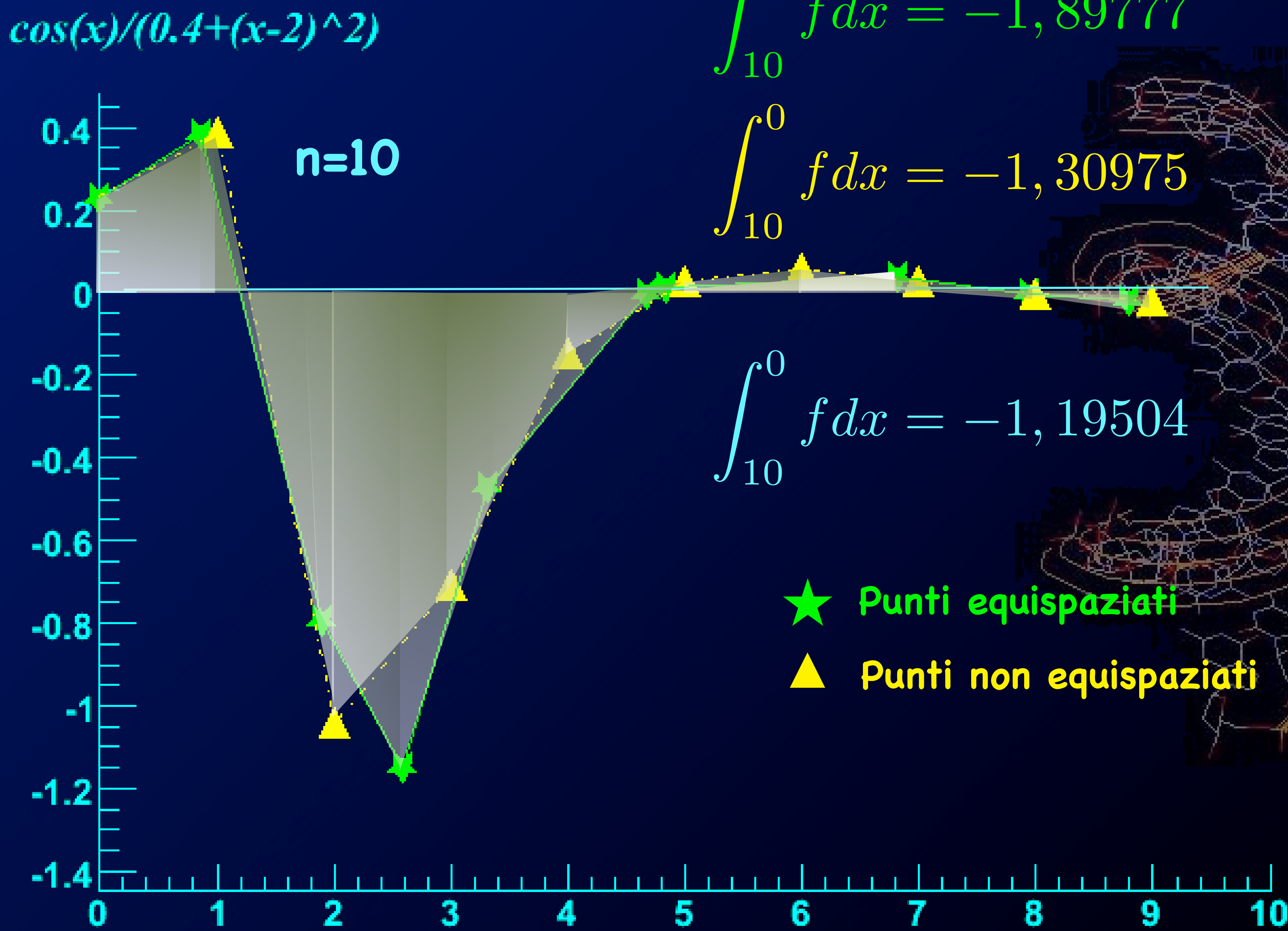
$$\int_{10}^{0} f(x)dx = -2,04547$$

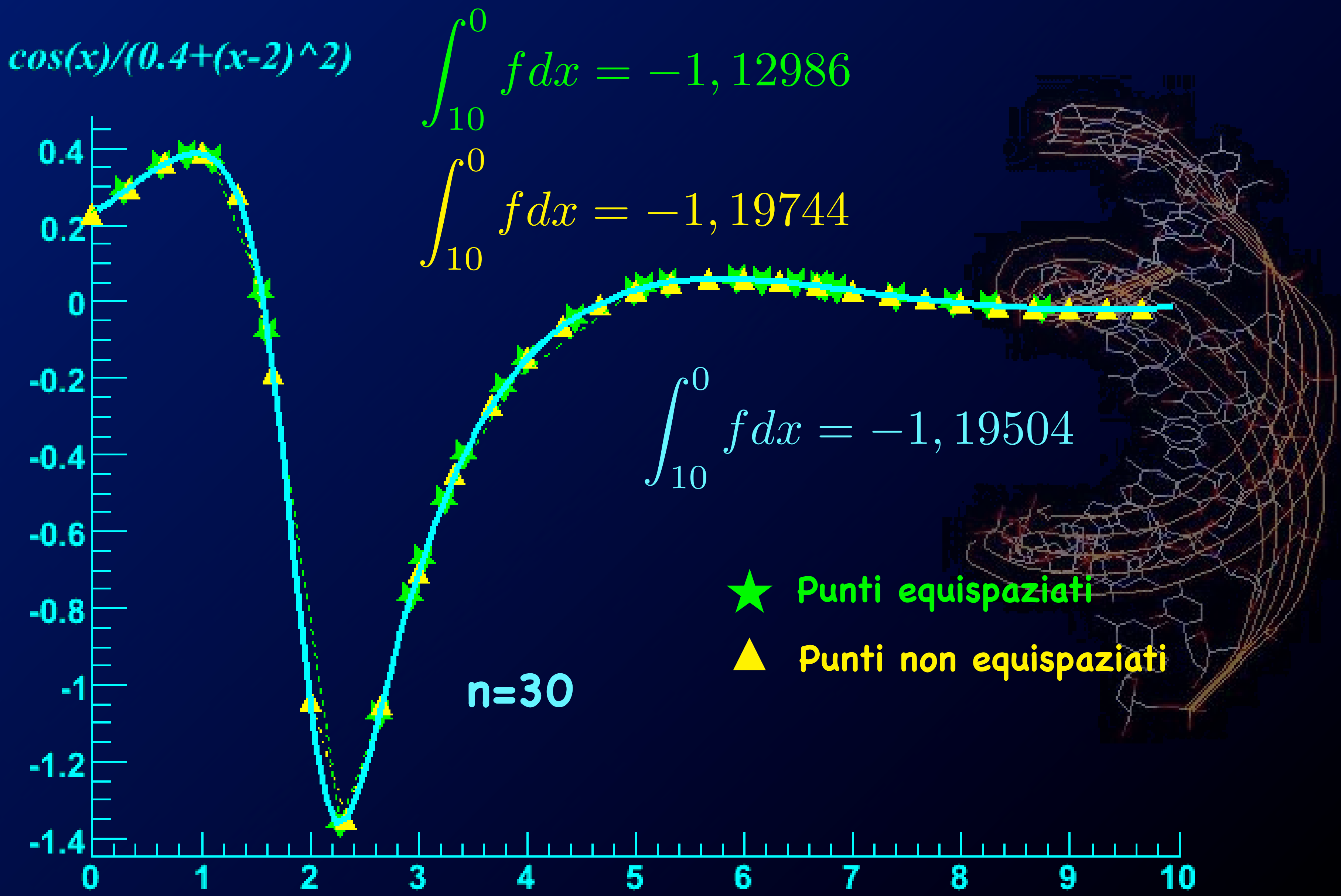

cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
n=5
$\int_{10}^{0} f(x)dx = -0,645969$
$\int_{10}^{0} f(x)dx = -2,04547$
Punti equispaziati
Punti non equispaziati
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

$$\int_{10}^{0} f\,dx = -1,89777$$

$$\int_{10}^{0} f\,dx = -1,30975$$

$$\int_{10}^{0} f\,dx = -1,19504$$




cos(x)/(0.4+(x-2)^2)
$\int_{10}^{0} f\,dx = -1,12986$
$\int_{10}^{0} f\,dx = -1,19744$
$\int_{10}^{0} f\,dx = -1,19504$
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Punti equispaziati
Punti non equispaziati
n=30

Errore di troncamento

Valutiamo l'errore commesso nel calcolo dell'integrale usando, al solito, uno sviluppo in serie di Taylor:

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)dx = \int_0^h f(x_i+t)dt = \int_0^h (f(x_i) + tf'(x_i) + \frac{t^2}{2}f''(x_i) + \frac{t^3}{6}f'''(x_i))dt =$$

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

Da confrontare con la regola dei trapezi :

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(x_i) + f(x_i+h)) =$$

$$\frac{h}{2}(f(x_i) + f'(x_i)h + f''(x_i)\frac{h^2}{2} + \mathcal{O}(h^3))$$

Errore di troncamento (II)

L'errore su una singola striscia vale allora:

$$f''(x_i)\frac{h^3}{12} + \mathcal{O}(h^4)$$

L'errore sull'integrale è n volte quello su una singola striscia, e siccome $n = (b-a)/h$ si ottiene:

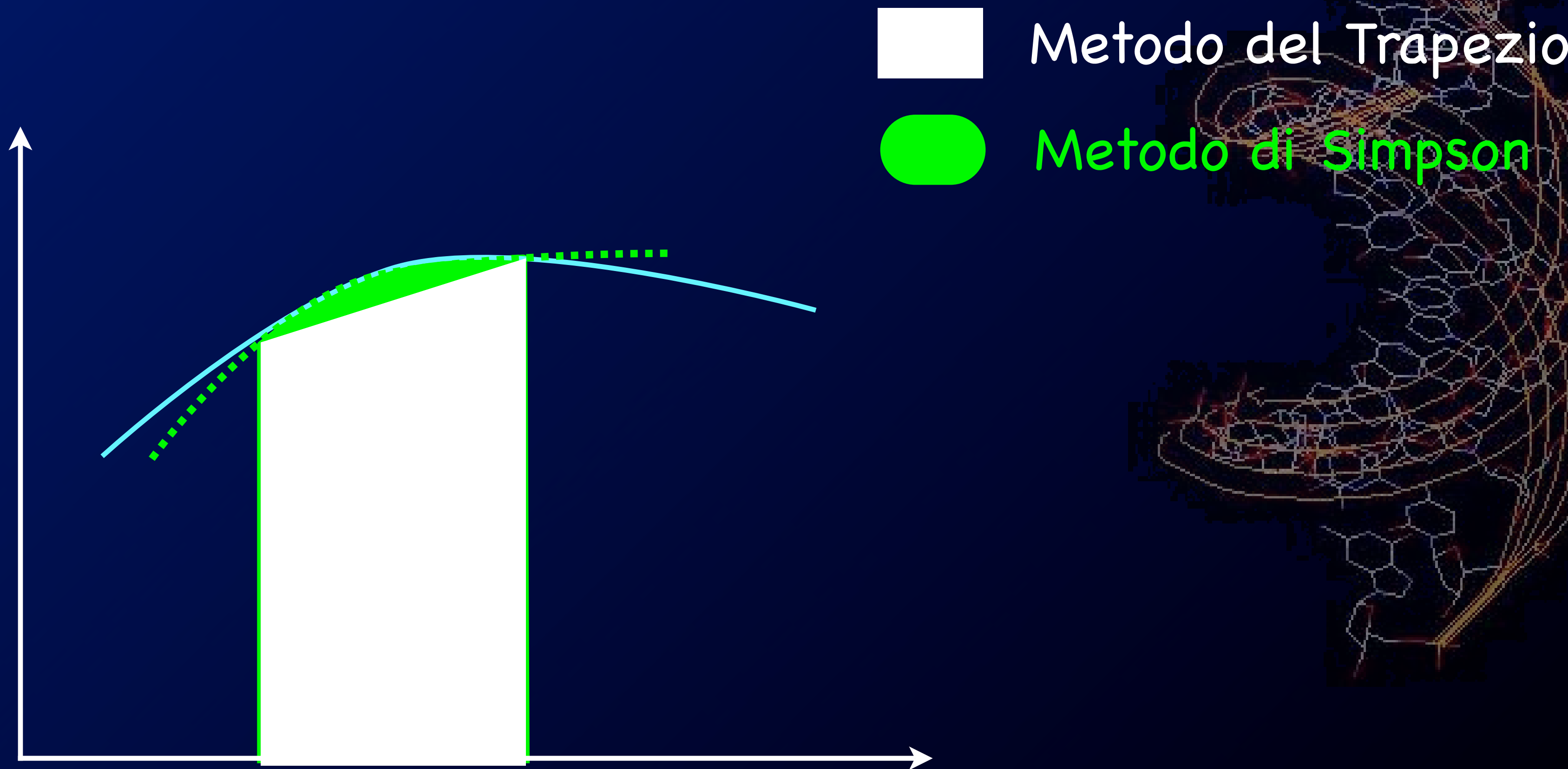
$$\delta I_n \approx \mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

Metodo di Simpson

Il metodo di Simpson

- Una migliore approssimazione di una curva, rispetto ad una retta, è una polinomiale di grado *n*.
- Il grado minimo è il secondo grado (parabola).
- Il metodo di Simpson usa questa approssimazione per calcolare l'integrale
- Come prevedibile, a parità di numero di strisce *n* ha un errore di troncamento inferiore a quello del metodo dei trapezi e pari a $O(1/n^4)$.

Il metodo di Simpson



Il metodo di Simpson

Usiamo un *numero pari di strisce* e consideriamo per ogni punto x_i quelli precedente x_{i-1} e successivo x_{i+1}. Si avrà:

$$\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left(f(x_i-h)+4f(x_i)+f(x_i+h)\right)$$

$$= \frac{h}{3}\left(f_{i-1}+4f_i+f_{(i+1)}\right)$$

$$I_n = \frac{h}{3}\left(f_0+4f_1+2f_2+4f_3+2f_4+\cdots+4f_{n-1}+f_n\right)$$

Metodo di Romberg

Integrazione alla Romberg

Per accelerare il processo di convergenza dell'integrale, è auspicabile che l'errore di troncamento diminuisca il più rapidamente possibile con l'aumentare di n .

Ad es. il metodo di Simpson è migliore di quello dei trapezi e giungerà a convergenza con un numero inferiore di iterazioni e chiamate alla funzione f.

Ripartiamo ora dal metodo dei trapezi di ordine n e osserviamo che, detto I il valore vero dell'integrale:

Integrazione alla Romberg

$$I \cong I_n + \left(\frac{C}{n^2}\right) \qquad I \cong I_{2n} + \left(\frac{C}{4n^2}\right)$$

$$I \cong I_n^2 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^4}\right) \qquad con \quad I_n^2 = \frac{4I_{2n} - I_n}{3}$$

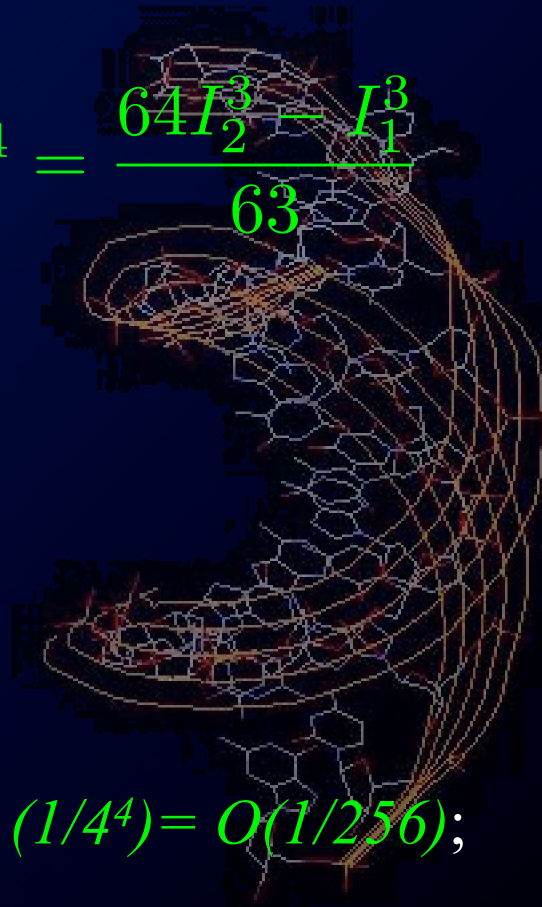
Integrazione alla Romberg (II)

I_n^2 non è altri che l'approssimazione fornita dal metodo di Simpson.

In questo modo però è possibile costruire una tabella in cui fissato un ordine n del numero di strisce del metodo dei trapezi, e calcolate le varie approssimazioni $I_1 \ldots I_{2n}$ si possono ottenere approssimazioni molto più accurate ripetendo il "trucco" visto in precedenza, e calcolando :

$$I_i^k = \frac{4^{k-1} I_{2i}^{k-1} - I_i^k}{4^{k-1} - 1}$$

Esempio



$$
\begin{array}{llll}
I_1 & I_1^2 = \dfrac{4I_2 - I_1}{3} & I_1^3 = \dfrac{16I_2^2 - I_1^2}{15} & I_1^4 = \dfrac{64I_2^3 - I_1^3}{63} \\
I_2 & I_2^2 = \dfrac{4I_4 - I_2}{3} & I_2^3 = \dfrac{16I_4^2 - I_2^2}{15} & \\
I_4 & I_4^2 = \dfrac{4I_8 - I_4}{3} & & \\
I_8 & & &
\end{array}
$$

I_8 ha accuratezza $O(1/64)$; $I_4^{\,2}$ ha accuratezza $O\ (1/4^4)= O(1/256)$;

$I_2^{\,2}$ ha accuratezza $O(1/2^4) = O(1/16)$;

$I_2^{\,3}$ ha accuratezza $O(1/2^6) = O(1/64)$ etc.

Soluzione di equazioni

Soluzione di equazioni

Siccome una generica equazione in una variabile reale può essere messa nella forma

$$f(x) = 0$$

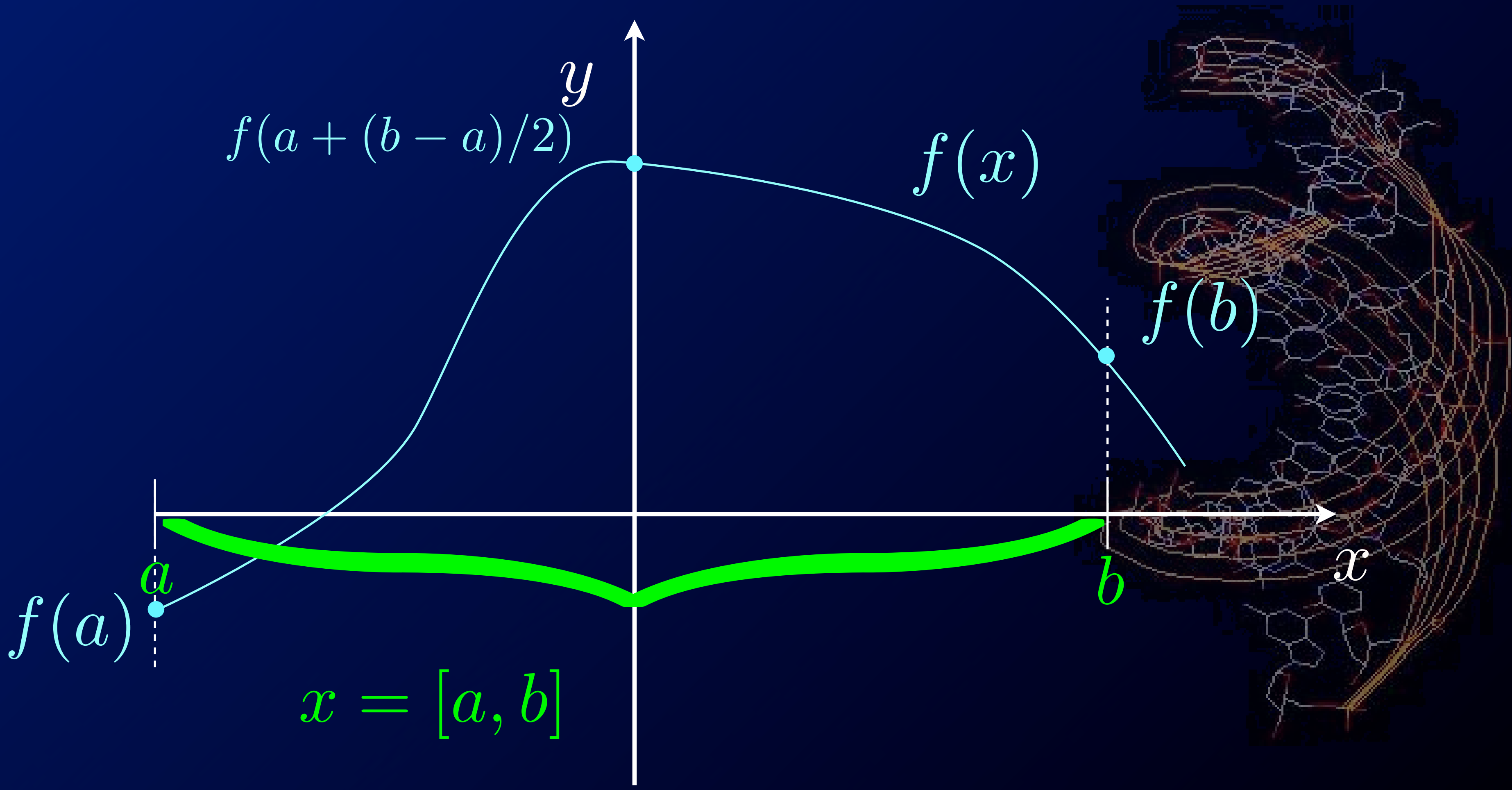
cercare una soluzione è equivalente a cercare lo zero di una funzione.

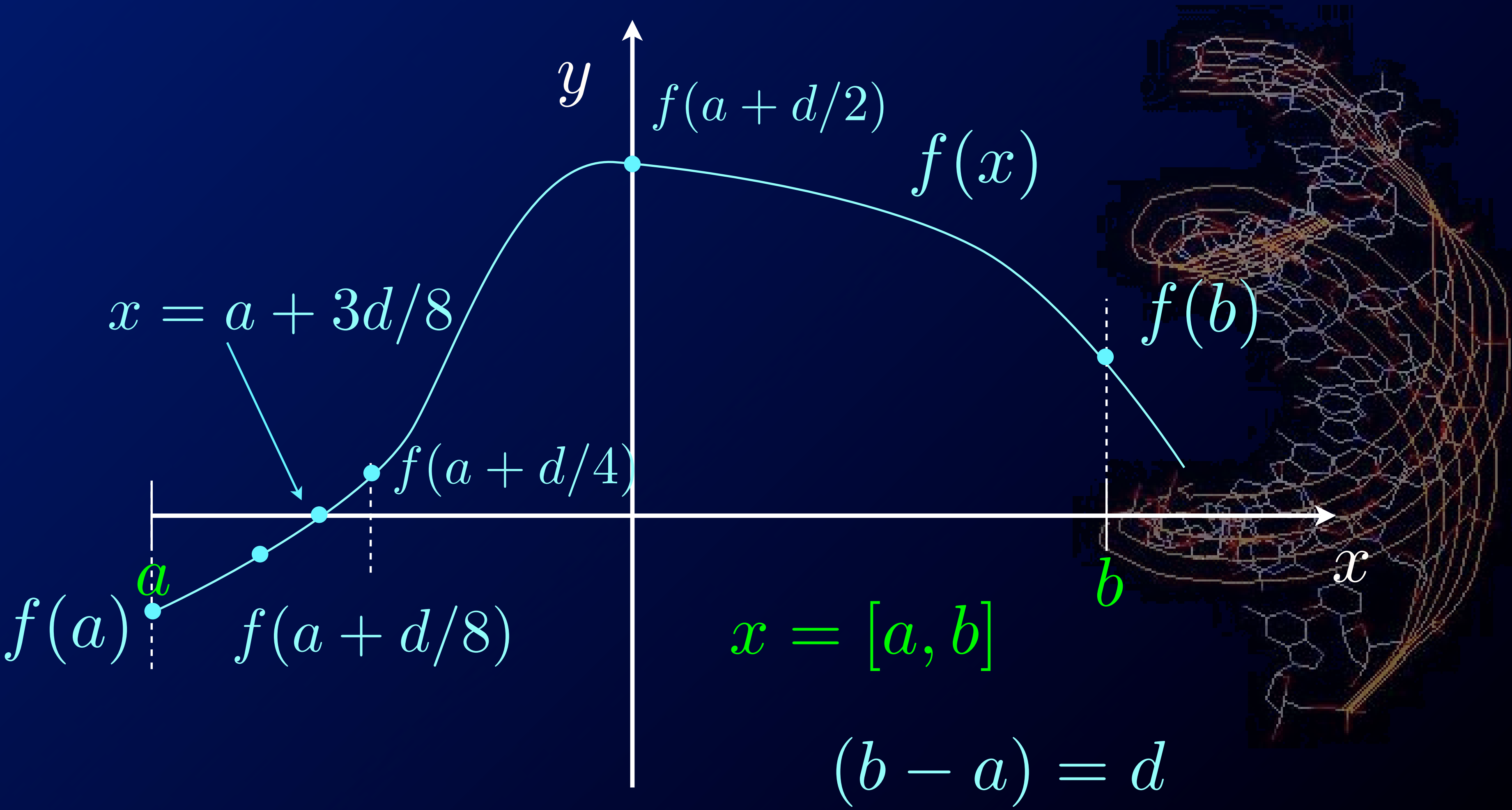
Il punto di partenza per individuare un metodo è ragionare in maniera grafica.

Metodo della bisezione…(o ricerca binaria)

Se *f* è continua e lo zero cercato non è un punto di massimo o minimo relativo un metodo molto semplice ma sicuro e affidabile per trovare la soluzione è quello della bisezione, che ricorda molto da vicino l'algoritmo di ricerca binaria.

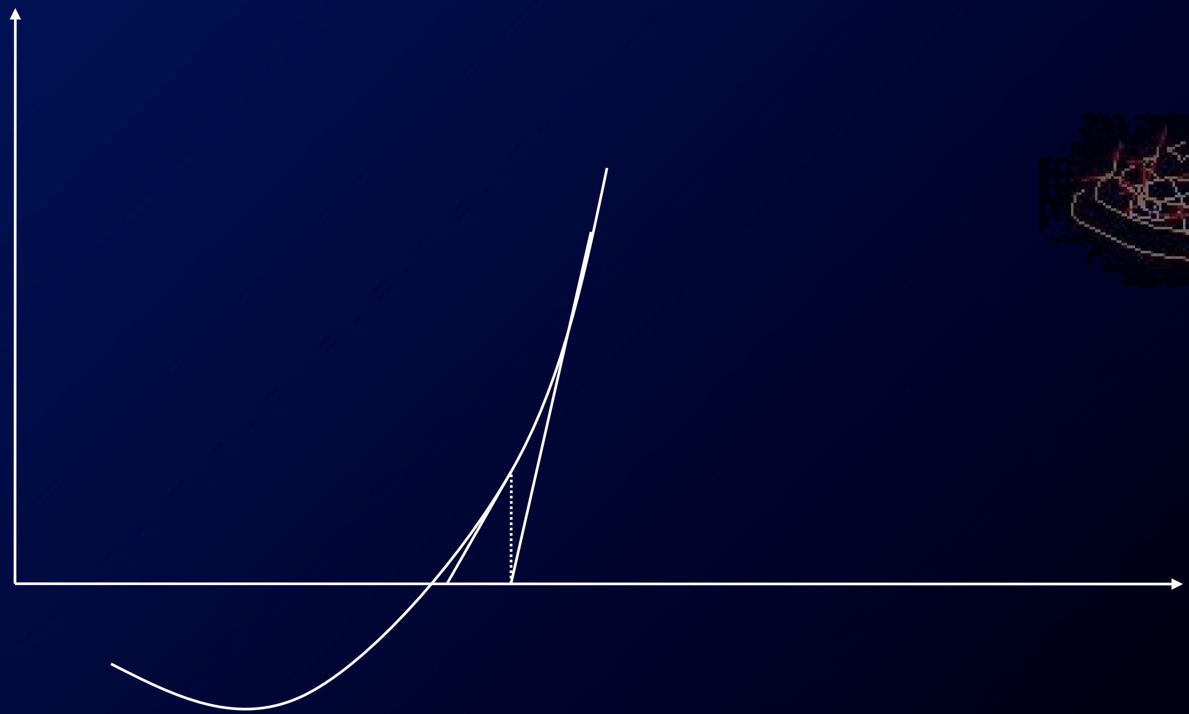
Individuato un intorno *[a,b]* dello zero in cui la funzione ha segno opposto si confronta *f(a)* con *f(a+(b-a)/2)* e *f(b)* e si sceglie il "ramo" i cui due estremi abbiano ancora segno opposto. Si itera il procedimento fino a trovare la soluzione cercata.


y
$f(a+(b-a)/2)$
$f(x)$
$f(b)$
a
$f(a)$
b
x
$x=[a,b]$


y
$f(a+d/2)$
$f(x)$
$x = a + 3d/8$
$f(b)$
$f(a+d/4)$
a
b
x
$f(a)$
$f(a+d/8)$
$x = [a, b]$
$(b - a) = d$

Metodo di Newton-Raphson

L'idea è di partire da un punto in cui la derivata di f sia non nulla, usare l'intersezione della tangente al grafico di f con l'asse delle x come prossima stima dello zero e poi iterare.



Metodo di Newton-Raphson

Ricordando che la tangente al grafico di f in un punto ha per coefficiente angolare la derivata prima di f calcolata in quel punto si dimostra facilmente che:

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

Lo zero è stato trovato quando due valori successivi di x, x_{i+1} e x_i differiscono tra loro per un valore inferiore all'accuratezza voluta.

Metodo di Newton-Raphson

Il metodo di Newton-Raphson è del secondo ordine, nel senso che detta

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

si può dimostrare che se c è lo zero della funzione, ovvero ***f(c)=0***, vale

$$\lim_{x \to c} \frac{g(x) - c}{(x-c)^2} = cost$$

e quindi per ***x*** che tende a ***c*** si ha che

$$|g(x) - c| \approx k \times (x-c)^2$$

Il metodo della secante

Il metodo della secante non è altri che il metodo di Newton-Raphson in cui però si calcoli la derivata numericamente.

Come il metodo di Newton-Raphson è un metodo del secondo ordine.

Può risultare molto utile nei casi in cui di un funzione non si riesce a calcolare facilmente una derivata analitica, o nei casi in cui una funzione sia nota solo per punti.