CALCOLO NUMERICO DI DERIVATE
Determinazione di $f'(x_0)$ con precisione $O\left((\Delta x)^{2p}\right)$

Premessa

Scopo del procedimento è determinare l'insieme di coefficienti a_k, $k = 1, \ldots, p$ che risolve l'equazione

$$\frac{1}{\Delta x}\sum_{k=1}^{p} a_k \left[f(x_0 + k\Delta x) - f(x_0 - k\Delta x)\right] \simeq f'(x_0) + R_1 \Delta x^{2p}\,.$$

Impostazione del metodo

Per prima cosa sviluppiamo in serie le funzioni al primo membro fino alla derivata di ordine $(2p+1)$; in questo modo otteniamo

$$\frac{1}{\Delta x}\sum_{k=1}^{p} a_k \left[\sum_{n=0}^{2p+1}\frac{k^n}{n!}f^{(n)}(x_0)\,(\Delta x)^n - \sum_{n=0}^{2p+1}\frac{(-1)^n k^n}{n!}f^{(n)}(x_0)\,(\Delta x)^n\right] \simeq f'(x_0) + R_1 \Delta x^{2p}\,.$$

Questa espressione può essere semplificata esplicitando, nelle due somme, i termini con indici pari e dispari:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\Delta x}\sum_{k=1}^{p} a_k \Bigg[&\sum_{n=0}^{p}\frac{k^{2n}}{(2n)!}f^{(2n)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n} + \sum_{n=0}^{p}\frac{k^{2n+1}}{(2n+1)!}f^{(2n+1)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n+1} + \\ &-\sum_{n=0}^{p}\frac{k^{2n}}{(2n)!}f^{(2n)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n} + \sum_{n=0}^{p}\frac{k^{2n+1}}{(2n+1)!}f^{(2n+1)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n+1}\Bigg] \simeq f'(x_0) + R_1(\Delta x)^{2p},\end{aligned}$$

da cui

$$\frac{2}{\Delta x}\sum_{k=1}^{p} a_k \sum_{n=0}^{p}\frac{k^{2n+1}}{(2n+1)!}f^{(2n+1)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n+1} \simeq f'(x_0) + R_1(\Delta x)^{2p}\,.$$

Ora possiamo scambiare l'ordine della somma in modo da ottenere (dopo avere semplificato il Δx al denominatore nel primo membro)

$$2\sum_{n=0}^{p}\frac{1}{(2n+1)!}f^{(2n+1)}(x_0)(\Delta x)^{2n}\sum_{k=1}^{p} a_k\, k^{2n+1} \simeq f'(x_0) + R_1(\Delta x)^{2p}\,.$$

Il problema si risolve se si mettono in evidenza, al primo membro, il primo e l'ultimo termine della sommatoria:

$$\begin{aligned}2f'(x_0)\sum_{k=1}^{p} k\, a_k + 2\sum_{n=1}^{p-1}\frac{1}{(2n+1)!}f^{(2n+1)}(x_0)(\Delta x)^{2n}\sum_{k=1}^{p} a_k\, k^{2n+1} + \\ + \frac{2}{(2p+1)!}f^{(2p+1)}(x_0)(\Delta x)^{2p}\sum_{k=1}^{p} a_k\, k^{2p+1} \simeq f'(x_0) + R_1(\Delta x)^{2p}.\end{aligned}$$

Il primo membro è uguale al secondo se è soddisfatto il sistema (di p equazioni in p incognite)

$$\begin{cases} 2\displaystyle\sum_{k=1}^{p} k\, a_k = 1 \\ \displaystyle\sum_{k=1}^{p} a_k\, k^{2n+1} = 0\,, \qquad n = 1, \ldots, p-1 \end{cases}, \tag{1}$$

e il coefficiente R_1 risulta

$$R_1 = \frac{2}{(2p+1)!} f^{(2p+1)}(x_0) \sum_{k=1}^{p} a_k\, k^{2p+1}\,,$$

dove gli $\{a_k,\ k = 1, \ldots,\ p\}$ sono le soluzioni del sistema precedente.

Perché il problema sia risolto completamente è necessario dimostrare che il sistema (1) ammmette sempre soluzione. A questo proposito è sufficiente esaminare il determinante dei coefficienti

$$A_p \equiv \begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & p-1 & p \\ 1 & 2^3 & 3^3 & \cdots & (p-1)^3 & p^3 \\ 1 & 2^5 & 3^5 & \cdots & (p-1)^5 & p^5 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 2^{2p-3} & 3^{2p-3} & \cdots & (p-1)^{2p-3} & p^{2p-3} \\ 1 & 2^{2p-1} & 3^{2p-1} & \cdots & (p-1)^{2p-1} & p^{2p-1} \end{vmatrix}$$

in cui si può raccogliere 2 nella seconda colonna, 3 nella terza, e così via fino a p nell'ultima, ottenendo

$$\begin{aligned} A_p &= 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot \ldots \cdot p \cdot \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 2^2 & 3^2 & \cdots & (p-1)^2 & p^2 \\ 1 & 2^4 & 3^4 & \cdots & (p-1)^4 & p^4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 2^{2(p-2)} & 3^{2(p-2)} & \cdots & (p-1)^{2(p-2)} & p^{2(p-2)} \\ 1 & 2^{2(p-1)} & 3^{2(p-1)} & \cdots & (p-1)^{2(p-1)} & p^{2(p-1)} \end{vmatrix} \\ &= p! \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 2^2 & 3^2 & \cdots & (p-1)^2 & p^2 \\ 1 & (2^2)^2 & (3^2)^2 & \cdots & \left[(p-1)^2\right]^2 & (p^2)^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & (2^2)^{(p-2)} & (3^2)^{(p-2)} & \cdots & \left[(p-1)^2\right]^{(p-2)} & (p^2)^{(p-2)} \\ 1 & (2^2)^{(p-1)} & (3^2)^{(p-1)} & \cdots & \left[(p-1)^2\right]^{(p-1)} & (p^2)^{(p-1)} \end{vmatrix} \\ &= p!\, V(1,\, 2^2,\, 3^2, \ldots, (p-1)^2,\, p^2) \end{aligned}$$

dove $V(1,\, 2^2,\, 3^2, \ldots, (p-1)^2,\, p^2)$ è il determinante di Vandermonde. Dal momento che questo è sempre diverso da zero, anche A_p lo è e il sistema (1) ammette, in ogni caso, una e una sola soluzione.

Determinazione di $f''(x_0)$ con precisione $O((\Delta x)^{2p})$

Con l'esperienza acquisita nel calcolo precedente non è difficile, ora, risolvere il problema di calcolare i coefficienti b_k, $k = 1, \dots, p$ che permettono di determinare, in modo numerico, la derivata seconda di una funzione con la stessa precisione ottenuta prima. A questo scopo esaminiamo l'equazione

$$\frac{1}{(\Delta x)^2}\left\{\sum_{k=1}^{p} b_k\left[f(x_0+k(\Delta x))+f(x_0-k(\Delta x))\right]-2Bf(x_0)\right\}\simeq f''(x_0)+R_2\Delta x^{2p}\,.$$

Sviluppando le funzioni al primo membro fino alla derivata di ordine $2(p+1)$ ed esplicitando, nelle due somme, gli indici pari e dispari otteniamo

$$\frac{1}{(\Delta x)^2}\left\{\sum_{k=1}^{p} b_k\left[\sum_{n=0}^{2(p+1)}\frac{k^n}{n!}f^{(n)}(x_0)\,(\Delta x)^n+\sum_{n=0}^{2(p+1)}\frac{(-1)^n k^n}{n!}f^{(n)}(x_0)\,(\Delta x)^n\right]-2Bf(x_0)\right\}\simeq$$
$$\simeq f''(x_0)+R_2(\Delta x)^{2p}\,,$$

da cui

$$\frac{1}{(\Delta x)^2}\left\{\sum_{k=1}^{p} b_k\left[\sum_{n=0}^{p+1}\frac{k^{2n}}{(2n)!}f^{(2n)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n}+\sum_{n=0}^{p}\frac{k^{2n+1}}{(2n+1)!}f^{(2n+1)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n+1}\,+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\sum_{n=0}^{p+1}\frac{k^{2n}}{(2n)!}f^{(2n)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n}-\sum_{n=0}^{p}\frac{k^{2n+1}}{(2n+1)!}f^{(2n+1)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n+1}\right]-2Bf(x_0)\right\}\simeq$$
$$\simeq f''(x_0)+R_2(\Delta x)^{2p}\,,$$

cioè

$$\frac{2}{(\Delta x)^2}\left\{\sum_{k=1}^{p} b_k\sum_{n=0}^{p+1}\frac{k^{2n}}{(2n)!}f^{(2n)}(x_0)\,(\Delta x)^{2n}-Bf(x_0)\right\}\simeq f''(x_0)+R_2(\Delta x)^{2p}\,.$$

Ancora in analogia con il caso precedente, invertiamo l'ordine delle sommatorie e poi mettiamo in evidenza i casi $n = 0$, $n = 1$ e $n = p + 1$:

$$\frac{2}{(\Delta x)^2}\left\{\sum_{n=0}^{p+1}\frac{1}{(2n)!}f^{(2n)}(x_0)(\Delta x)^{2n}\sum_{k=1}^{p+1} b_k\,k^{2n}-Bf(x_0)\right\}\simeq f''(x_0)+R_2(\Delta x)^{2p}\,,$$

che diventa:

$$\frac{2}{(\Delta x)^2}\left\{f(x_0)\left(\sum_{k=1}^{p} b_k-B\right)+\frac{1}{2}f''(x_0)(\Delta x)^2\sum_{k=1}^{p}k^2\,b_k+\sum_{n=2}^{p}\frac{f^{(2n)}(x_0)}{(2n)!}(\Delta x)^{2n}\sum_{k=1}^{p} b_k\,k^{2n}+\right.$$
$$\left.+\frac{1}{(2p+2)!}f^{(2p+2)}(x_0)(\Delta x)^{2p+2}\sum_{k=1}^{p} b_k\,k^{2p+2}\right\}\simeq f''(x_0)+R_2(\Delta x)^{2p}\,.$$

Ponendo

$$B=\sum_{k=1}^{p} b_k$$

l'equazione diviene, finalmente,

$$f''(x_0)\sum_{k=1}^{p} k^2\, b_k + 2\sum_{n=2}^{p}\frac{1}{(2n)!}f^{(2n)}(x_0)(\Delta x)^{2n-2}\sum_{k=1}^{p} b_k\, k^{2n} +$$
$$+\frac{2}{(2p+2)!}f^{(2p+2)}(x_0)(\Delta x)^{2p}\sum_{k=1}^{p} b_k\, k^{2p+2} \simeq f''(x_0) + R_2(\Delta x)^{2p}\,.$$

Il primo membro è uguale al secondo se è soddisfatto il sistema (di p equazioni in p incognite)

$$\left\{\begin{array}{l} \displaystyle\sum_{k=1}^{p} k^2\, b_k = 1 \\ \displaystyle\sum_{k=1}^{p} b_k\, k^{2n} = 0\,, \qquad n = 2, \ldots, p \end{array}\right. , \tag{2}$$

e il coefficiente R_2 risulta

$$R_2 = \frac{2}{(2p+2)!}f^{(2p+2)}(x_0)\sum_{k=1}^{p} b_k\, k^{2p+2}\,,$$

dove i $\{b_k,\ k = 1, \ldots p\}$ sono le soluzioni del sistema precedente. Naturalmente, dopo avere determinato i $\{b_k\}$ occorre calcolare il valore della costante B che serve a eliminare il contributo di $f(x_0)$.

Anche in questo caso è necessario studiare il determinante B_p dei coefficienti del sistema (2) per vedere se è diverso da zero. Esso risulta:

$$B_p \equiv \begin{vmatrix} 1 & 2^2 & 3^2 & \cdots & (p-1)^2 & p^2 \\ 1 & 2^4 & 3^4 & \cdots & (p-1)^4 & p^4 \\ 1 & 2^6 & 3^6 & \cdots & (p-1)^6 & p^6 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 2^{2p-2} & 3^{2p-2} & \cdots & (p-1)^{2p-2} & p^{2p-2} \\ 1 & 2^{2p} & 3^{2p} & \cdots & (p-1)^{2p} & p^{2p} \end{vmatrix}$$

che è proprio il determinante di Vandermonde $V(1,\, 2^2,\, 3^2, \ldots, (p-1)^2,\, p^2)$ già incontrato prima. Dal momento che esso è senz'altro diverso da zero, la dimostrazione è conclusa.

Soluzioni esplicite

Utilizzando gli algoritmi precedenti, si sono calcolate, con precisioni dal secondo all'ottavo ordine in (Δx), le derivate prime e seconde di una funzione nota o tabulata.

Al secondo ordine $(p = 1)$
Si ottiene

$$a_1 = \frac{1}{2} \qquad \text{e} \qquad b_1 = 1 \qquad (2B = 2)\,.$$

per cui le espressioni per le derivate prima e seconda sono:

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} \tag{3}$$

$$f''(x_0) \simeq \frac{f(x_0+\Delta x) + f(x_0-\Delta x) - 2f(x_0)}{(\Delta x)^2} \tag{4}$$

Al quarto ordine ($p = 2$)
Si ottiene

$$\begin{cases} a_1 = \dfrac{2}{3} \\ a_2 = -\dfrac{1}{12} \end{cases} \qquad \text{e} \qquad \begin{cases} b_1 = \dfrac{4}{3} \\ b_2 = -\dfrac{1}{12} \\ 2B = \dfrac{5}{2} \end{cases} .$$

per cui le espressioni per le derivate prima e seconda sono:

$$f'(x_0) \simeq \frac{8[f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)] - [f(x_0+2\,\Delta x) - f(x_0-2\,\Delta x)]}{12\,\Delta x} \tag{5}$$

$$f''(x_0) \simeq \frac{16[f(x_0+\Delta x) + f(x_0-\Delta x)] - [f(x_0+2\Delta x) + f(x_0-2\Delta x)] - 30f(x_0)}{12\,(\Delta x)^2} \tag{6}$$

Al sesto ordine ($p = 3$)
Si ottiene

$$\begin{cases} a_1 = \dfrac{3}{4} \\ a_2 = -\dfrac{3}{20} \\ a_3 = \dfrac{1}{60} \end{cases} \qquad \text{e} \qquad \begin{cases} b_1 = \dfrac{3}{2} \\ b_2 = -\dfrac{3}{20} \\ b_3 = \dfrac{1}{90} \\ 2B = \dfrac{49}{18} \end{cases} .$$

All'ottavo ordine ($p = 4$)
Si ottiene

$$\begin{cases} a_1 = \dfrac{4}{5} \\ a_2 = -\dfrac{1}{5} \\ a_3 = \dfrac{4}{105} \\ a_4 = -\dfrac{1}{280} \end{cases} \qquad \text{e} \qquad \begin{cases} b_1 = \dfrac{8}{5} \\ b_2 = -\dfrac{1}{5} \\ b_3 = \dfrac{8}{315} \\ b_4 = -\dfrac{1}{560} \\ 2B = \dfrac{205}{72} \end{cases} .$$

Scrivere esplicitamente le corrispondenti espressioni per le derivate prima e seconda è lungo e scomodo, per cui tale compito è lasciato al lettore per esercizio.