7.43 Esempio. Si approssima con il metodo Monte Carlo l'integrale

$$S = \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} (x \cos y + y \cos x) \ dx \ dy,$$

dell'esempio 7.41. Nella figura 7.18 sono riportati, in scala logaritmica, gli errori assoluti delle medie  $S_n$  per valori di n compresi fra 1 e  $10^6$  e il grafico di una retta di coefficiente angolare  $-\frac{1}{2}$ , che mostra come l'errore tenda a diminuire come  $n^{-1/2}$ .

Per  $n = 10^6$ , cioè con  $10^6$  valutazioni di f(x, y), si ottiene il valore 2.466504, che ha un errore assoluto di circa 0.898 10<sup>-3</sup> (si confronti con i valori ottenuti negli esempi 7.41 e 7.42).

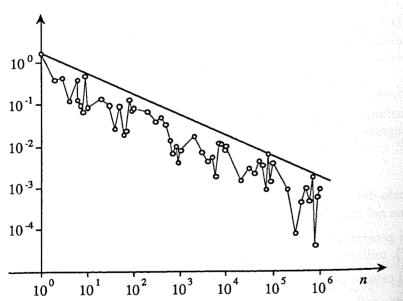


Fig. 7.18 - Errori nell'integrazione con il metodo Monte Carlo

La convergenza del metodo Monte Carlo risulta quindi molto lenta. È però possibile, utilizzando varie tecniche, diminuire il numero di valutazioni della funzione. Queste tecniche in generale riducono la varianza  $\sigma$  (si veda ad esempio l'esercizio 7.55), approssimando il problema dato con un opportuno problema modificato: riducendo la varianza di 100 volte, ad esempio, il numero di valutazioni di funzione può essere ridotto di 10 volte.

Capitolo 7. Integrazione e derivazione approssimate 787

## 11. Approssimazione delle derivate

Le formule per l'approssimazione delle derivate vengono usate soprattutto in questi casi:

- a) funzioni che sono note solo in un insieme discreto di punti,
- b) discretizzazione di un problema differenziale, cioè trasformazione di un problema continuo in un problema discreto, con l'utilizzazione di

Nella maggior parte dei casi le formule che si usano sono interpolatorie, cioè ottenute derivando dei polinomi di interpolazione, e quindi esatte se applicate a polinomi di grado opportuno.

Derivando il polinomio di interpolazione di Lagrange (5, cap. 5), si ottengono le formule di derivazione approssimata

$$p'_{n}(x) = \sum_{i=0}^{n} L'_{i}(x)f(x_{i}),$$
$$p''_{n}(x) = \sum_{i=0}^{n} L''_{i}(x)f(x_{i}),$$

Le formule più comunemente usate sono quelle che si ottengono quando i nodi sono equidistanti e il punto x coincide con uno di essi.

7.44 Esempio. Per n = 2,  $x_1 = x_0 + h$ ,  $x_2 = x_0 + 2h$ , e  $x = x_0$  si ha

$$L'_0(x_0) = \frac{2x_0 - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = -\frac{3}{2h},$$

$$L'_1(x_0) = \frac{x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{2}{h},$$

$$L'_2(x_0) = \frac{x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = -\frac{1}{2h},$$

da cui

$$p_2'(x_0) = \frac{1}{h} \left[ -\frac{3}{2} f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2} f(x_2) \right].$$

<sup>In modo</sup> analogo si ottengono le formule

$$p_2'(x_1) = \frac{1}{2h} \left[ -f(x_0) + f(x_2) \right],$$
  
$$p_2'(x_2) = \frac{1}{h} \left[ \frac{1}{2} f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2} f(x_2) \right].$$

$$L_0''(x) = \frac{1}{h^2}, \quad L_1''(x) = -\frac{2}{h^2}, \quad L_2''(x) = \frac{1}{h^2},$$

da cui

$$p_2''(x_0) = p_2''(x_1) = p_2''(x_2) = \frac{1}{h^2} \left[ f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2) \right].$$

In generale, se  $p_n(x)$  è il polinomio di interpolazione di grado n della funzione f(x) nei nodi distinti  $x_0, \ldots, x_n$ , si assume  $p_n^{(k)}(x)$ , per  $k \leq n$ , come approssimazione di  $f^{(k)}(x)$ . Se il punto x coincide con uno dei nodi, ad esempio con  $x_j$ , la formula di derivazione approssimata di ordine k assume la forma

$$p_n^{(k)}(x_j) = \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i),$$
 (74)

in cui i coefficienti  $\omega_i$  dipendono da k e da j. Fissati k e j, per ricavare i coefficienti  $\omega_i$ , anziché derivare il polinomio di interpolazione, si può fare ricorso al metodo dei coefficienti indeterminati, imponendo che la formula (74) abbia grado di precisione n, cioè che sia esatta per i polinomi di grado minore od uguale ad n. Per la linearità basterà imporre che la (74) sia esatta per le funzioni

$$f(x) = (x - x_j)^r$$
, per  $r = 0, ..., n$ ,

e poiché

$$f^{(k)}(x_j) = \begin{cases} 0 & \text{se } r \neq k, \\ k! & \text{se } r = k, \end{cases}$$

ne segue che gli  $\omega_i, \ i=0,\dots,n,$  devono soddisfare il sistema lineare

$$\sum_{i=0}^{n} \omega_i (x_i - x_j)^r = \begin{cases} 0 & \text{se } r \neq k, \\ k! & \text{se } r = k, \end{cases} \qquad r = 0, \dots, n.$$
 (75)

Poiché la matrice del sistema (75) è di Vandermonde e i punti  $x_i$  sono distinti, si possono ricavare gli  $\omega_i$   $i = 0, \ldots, n$ .

Dalla prima equazione (75), poiché  $k \ge 1$ , risulta che  $\sum_{i=0}^{n} \omega_i = 0$ , cioè la somma dei coefficienti di una formula di derivazione approssimata è nulla.

Se i nodi  $x_i$  sono equidistanti, cioè  $x_i = x_0 + ih$ , i = 0, ..., n, si può porre  $\alpha_i = h^k \omega_i$ , dove gli  $\alpha_i$  sono soluzione del sistema lineare

$$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i (i-j)^r = \begin{cases} 0 & \text{se } r \neq k, \\ k! & \text{se } r = k, \end{cases} \qquad r = 0, \dots, n. \tag{76}$$

In tal caso la formula di derivazione approssimata assume la forma

$$p_n^{(k)}(x_j) = \frac{1}{h^k} \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i), \tag{77}$$

Il resto di una formula di derivazione di ordine k è

$$r_n^{(k)}(x) = f^{(k)}(x) - p_n^{(k)}(x).$$

7.45 Teorema. Sia  $f(x) \in C^{n+1}[a,b]$ , siano  $x_0 < \ldots < x_n \in [a,b]$  e sia  $p_n(x)$  il polinomio di interpolazione. Allora esistono n punti distinti  $y_i \in (x_i, x_{i+1}), i = 0, \ldots, n-1$ , indipendenti da x, e un punto  $\xi = \xi(x)$  tali che

$$r'_n(x) = \prod_{i=0}^{n-1} (x - y_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{n!}.$$
 (78)

Dim. La funzione  $r_n(x) = f(x) - p_n(x)$ , derivabile con continuità, si annulla negli n+1 punti  $x_0, \ldots, x_n$  e quindi per il teorema di Rolle la funzione  $r'_n(x)$  ha n zeri  $y_0, \ldots, y_{n-1}$ , che dipendono dalla funzione f(x) e dai nodi dell'interpolazione, e tali che  $y_i \in (x_i, x_{i+1}), i = 0, \ldots, n-1$ . Quindi la (78) è verificata nei punti  $x = y_i$ . Per  $x \neq y_i$  sia

$$s(x) = \frac{r'_n(x)}{\prod_{i=0}^{n-1} (x - y_i)},$$
(79)

e si consideri la funzione della variabile y

$$z(y) = r'_n(y) - s(x) \prod_{i=0}^{n-1} (y - y_i).$$

La funzione z(y) si annulla almeno negli n+1 punti distinti  $y_i$ ,  $i=0,1,\ldots,$  n-1, e x. Proseguendo come nella dimostrazione del teorema 5.5, risulta che la  $z^{(n)}(y)$  si annulla in almeno un punto  $\xi \in (a,b)$ , per il quale si ha:

$$0 = z^{(n)}(\xi) = r_n^{(n+1)}(\xi) - n! \ s(x) = f^{(n+1)}(\xi) - n! \ s(x),$$

da cui, sostituendo nella (79), si ottiene la (78) per  $x \neq y_i$ ,  $i = 0, \ldots, n-1$ .

In modo analogo si può ottenere il resto per la derivata k-esima,  $k \leq n$ ,

$$r_n^{(k)}(x) = f^{(k)}(x) - p_n^{(k)}(x) = \prod_{i=0}^{n-k} (x - y_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1-k)!},$$

dove  $y_i \in (x_i, x_{i+k})$ , per  $i = 0, \ldots, n-k$ .

Per valutare il resto dell'approssimazione della derivata quando i nodi  $x_i$  sono equidistanti di passo h e il punto x coincide con uno dei nodi, conviene utilizzare la forma (22, cap. 5) del resto dell'interpolazione, che è derivabile per il teorema 5.28 se  $f(x) \in C^{n+1}[x_0, x_n]$ . Per la (29, cap. 5) si ha

$$r'_n(x) = \pi'_n(x) f[x_0, \dots, x_n, x] + \pi_n(x) f[x_0, \dots, x_n, x, x].$$

Poiché  $f[x_0,\ldots,x_n,x,x]$  è limitata in  $[x_0,x_n]$  e  $\pi_n(x_j)=0$ , risulta

$$r'_n(x_j) = \pi'_n(x_j) f[x_0, \dots, x_n, x_j],$$

e per il teorema 5.31 è

$$r'_n(x_j) = \pi'_n(x_j) \frac{f^{(n+1)}(\xi_j)}{(n+1)!}, \text{ dove } \xi_j \in (x_0, x_n).$$

Con il cambiamento di variabile  $x=x_0+th$  è

$$\pi_n(x) = h^{n+1} \tau_n(t), \text{ dove } \tau_n(t) = t(t-1) \dots (t-n),$$

e quindi

$$\pi'_n(x_j) = h^n \tau'_n(j).$$

Ne segue che

$$r'_n(x_j) = \gamma_j^{(1)} h^n f^{(n+1)}(\xi_j), \quad \text{dove} \quad \gamma_j^{(1)} = \frac{\tau'_n(j)}{(n+1)!}.$$
 (80)

In modo analogo si ha

$$r_n^{(k)}(x_j) = \gamma_j^{(k)} h^{n-k+1} f^{(n+1)}(\xi_j^{(k)}) + O(h^{n-k+2}),$$

$$\text{dove} \quad \gamma_j^{(k)} = \frac{\tau_n^{(k)}(j)}{(n+1)!}.$$
(81)

Quando j=n/2 e k è pari, risulta  $\tau_n^{(k)}(j)=0,$  e se  $f(x)\in C^{n+2}[x_0,x_n],$  si ha

$$r_n^{(k)}(x_j) = \delta_j^{(k)} h^{n-k+2} f^{(n+2)}(\xi_j^{(k)}) + O(h^{n-k+3}), \quad \text{dove } \delta_j^{(k)} = k \frac{\tau_n^{(k-1)}(j)}{(n+2)!}.$$

Le formule per cui j = n/2, cioè  $x_j$  è il punto centrale dell'intervallo  $[x_0, x_n]$ , sono dette centrali o simmetriche. Poiché tali formule hanno di solito coefficienti del resto più bassi, quando è possibile, conviene usarle.

7.46 Esempio. Sia  $x_i = x_0 + ih$ , i = 0, ..., n. Formule per la derivata prima si ottengono ponendo k = 1. Per n = 1,  $x = x_0$  dalla (76) risulta

$$\alpha_0 + \alpha_1 = 0 \quad e \quad \alpha_1 = 1,$$

da cui si ottiene

$$p_1'(x_0) = \frac{1}{h} \left( (f(x_1) - f(x_0)), \tag{82} \right)$$

che rappresenta l'approssimazione della derivata con il rapporto incrementale. Dalla (80) si ha

$$r'_1(x_0) = -\frac{h}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_1).$$

Una formula centrale si ottiene ponendo n=2 e  $x=x_1$ ; dalla (76) risulta

$$p_2'(x_1) = \frac{1}{2h} \left( f(x_2) - f(x_0) \right). \tag{83}$$

Dalla (80) si ha

$$r_2'(x_1) = -\frac{h^2}{6}f'''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_2).$$

Una formula centrale per la derivata seconda si ottiene ponendo n=2, k=2 e  $x=x_1$ ; dalla (76) risulta

$$p_2''(x_1) = \frac{1}{h^2} \left( f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0) \right).$$

Poiché  $\tau_2''(1)=0$ , il resto di questa formula viene espresso mediante la derivata quarta della f(x)

$$r_2''(x_1) = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_2).$$

Le formule di derivazione approssimata con nodi  $x_i$  equidistanti possono essere espresse anche mediante l'operatore  $\Delta$  di differenza finita. Dalla (25, cap. 5) il polinomio di interpolazione di Newton risulta

$$p_n(x_0 + th) = f(x_0) + \sum_{i=1}^n \frac{\tau_{i-1}(t)}{i!} \Delta^i f(x_0).$$