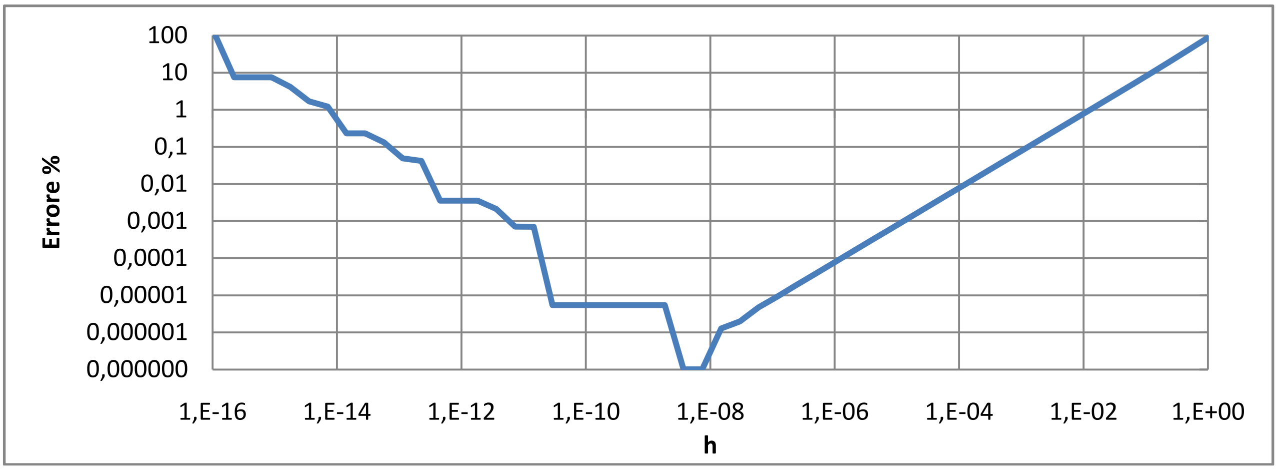
Derivazione numerica

L'approssimazione della derivata di una funzione in un punto mediante il suo rapporto incrementale suggerisce direttamente la formula seguente:

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

Un'applicazione indiscriminata di tale procedimento rischia tuttavia di portare a risultati non accurati. In particolare, un aspetto critico è rappresentato dalla scelta di h:

1. h dovrebbe essere scelto sufficientemente piccolo in modo da rispettare la definizione di derivata come limite del rapporto incrementale calcolato per h che tende a 0,
2. ma non troppo piccolo per evitare di introdurre errori di arrotondamento dovuti al numero limitato di cifre significative utilizzate dalla macchina per il calcolo.



Calcoli teorici ed esperimenti numerici suggeriscono per h la scelta di un valore intermedio come ordine di grandezza fra il valore del punto x in cui viene calcolata la derivata e la precisione del calcolo.
Ad esempio se x è pari a 1 e vengono utilizzati nei calcoli numeri a doppia precisione con 16 cifre significative, avremo che la precisione nella rappresentazione dei numeri nell'intorno di 1 sarà 10^{-16}; la scelta ottimale per h sarà quindi 10^{-8}, ovvero la radice quadrata di 10^{-16} (vedi figura qui sopra).
Se invece x è pari a 10^{+5} e vengono utilizzati nei calcoli sempre numeri a doppia precisione, avremo che la precisione nella rappresentazione dei numeri nell'intorno di 10^{+5} sarà 10^{-11} e la scelta ottimale per h sarà quindi 10^{-3}: la potenza –3 è infatti il punto medio fra la potenza +5 e la potenza –11.
In definitiva con numeri a doppia precisione la scelta ottimale per h è pari a un 100'000'000-simo di x, cioè:

$$h = |x| \cdot 10^{-8}$$

mentre con numeri a singola precisione con 8 cifre significative la scelta ottimale per h è pari a un 10'000-simo di x, cioè:

$$h = |x| \cdot 10^{-4}$$

Una relazione più accurata per il calcolo numerico della derivata è il rapporto incrementale centrato ottenuto calcolando il valor medio dei due rapporti incrementali destro e sinistro:

$$f'(x) = \frac{\frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \frac{f(x-h) - f(x)}{-h}}{2} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

In questo caso la scelta ottimale per h con numeri a doppia precisione è pari alla radice cubica di $10^{-16} \approx 5 \cdot 10^{-6}$:

$$h = |x| \cdot 5 \cdot 10^{-6}$$

Il calcolo della derivata seconda può effettuarsi calcolando la differenza fra rapporto incrementale destro e sinistro e dividendola per h:

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

In questo caso la scelta ottimale per h con numeri a doppia precisione è pari alla radice quarta di 10^{-16} ovvero 10^{-4}:

$$h = |x| \cdot 10^{-4}$$