Nummerische Differentiation

Sebastian Feichtenschlager(12109651), Lukas Haider (12110155)

20.05.2023

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

In folgender Arbeit wird die numerische Differntiation näher behandelt und verschiedene Formenln für die Berchnung dieser verwendet. Dabei ist unser Ziel die Verfahrensfehler und Rechenfehler der jeweiligen Methode zu analysieren und gegebenenfalls mit besseren Methoden den Fehler auf ein Minimum zu beschränken und gleichzeitig ein möglichst genaues Ergebnis zu produzieren.

2 Fehlerabschätzung

Es soll eine Fehlerabschätzung für 2 Modelle (1) und (2) der numerischen Differentiationen durchgeführt werden.

$$D_e(h) = \frac{y(t+h) - y(t)}{h} \tag{1}$$

$$D_z(h) = \frac{y(t+h) - y(t-h)}{2h} \tag{2}$$

2.1 Einseitiger Differernzenquotient

Für die folgende Betrachtung wird (1) als Basis verwendet.

2.1.1 Verfahrensfehler

Wir sind nun daran interessiert wie groß der absolute Verfahrensfehler bei einer gewählten Schrittweite ist. Dazu betrachten wird folgende Formel für den absulten Fehler:

$$D_e(h) - y'(t) = \frac{y(t+h) - y(t)}{h} - y'(t) \tag{3}$$

Als nächsten Schritt entwickeln wir die Funktion $y(t+h)$ in einem Taylorpolynom.

$$D_e(h) - y'(t) = \frac{y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + \mathcal{O}(h^3) - y(t)}{h} - y'(t) = \frac{h}{2}y''(t) + \mathcal{O}(h^2) \tag{4}$$

Dabei haben wir aber für die zu differenzierde Funktion ein paar Voraussetzungen getroffen nämlich

$$y(t) \in C^2[a,b] \tag{5}$$

Abschließend können wir noch eine Betragsabschätzung durchführen, wobei wir $\mathcal{O}(h^2)$ nicht mehr berücksichtigen.

$$|D_e(h) - y'(t)| \leq |\frac{h}{2}y''(t)| \leq \frac{h}{2}|y''| \leq \frac{h}{2}M_2 \tag{6}$$

Dabei bildet M_2 die Obere Schranke der 2ten Ableitung.

$$|y''(t)| \leq M_2 \quad \text{für} \quad t \in [a,b] \tag{7}$$

2.1.2 Rechenfehler

$$\tilde{D}_e(h) = \frac{\tilde{y}(t+h) - \tilde{y}(t)}{h} = \frac{(y(t+h)(1+\rho_1) - y(t)(1+\rho_2))(1+\rho_3)}{h}(1+\rho_4) \tag{8}$$

Dabei ist ρ_1 und ρ_2 der Rechenfehler von der Auswertung der Funktion, der Faktor ρ_3 durch Subtraktion der Werte und ρ_4 durch die Divison. Diese Formel wird jetzt ausmultipliziert und die Produkte kleiner Zahlen entfernt.

$$\tilde{D}_e(h) = \frac{y(t+h)(1+\rho_1+\rho_2+\rho_3) - y(t)(1+\rho_2+\rho_3+\rho_4)}{h} \tag{9}$$

Weiter Umformungen ergeben insgesamt.

$$\tilde{D}_e(h) = D_e(h)\left(1 + \frac{h}{(y(t+h) - y(t))h}(\rho_1+\rho_2+\rho_3)\right) \tag{10}$$

$$|y'(t)| \geq U_1 \quad \text{für} \quad t \in [a,b] \tag{11}$$

Dabei folgt, wenn wir annehmen das $\forall|\rho_i| \leq 10^{-8} = eps$ und der Annahme (11) , dass der Rechenfehler sich in folgender Schranke befindet:

$$|\tilde{D}_e(h) - D_e(h)| \leq \frac{1}{hU_1} 6eps \tag{12}$$

Daraus lässt sich nun der insgesamte maximale Fehler bei der Berechnung des einseitigen Differenzenquotienten mit folgender Rechnung bestimmen:

$$f_e(h) = \frac{h}{2} M_2 + 6eps \frac{1}{hU_1} \tag{13}$$

2.2 Zweiseitiger Differnenzenquotient

Hier wird (2) verwendet um den zweiseitigen Differenzenquotient zu berechnen.

2.2.1 Verfahrensfehler

Folgende Formel wird verwendet, um abermals den Fehler für eine bestimmte Schrittweite zu ermitteln.

$$D_z(h) - y'(t) = \frac{y(t+h) - y(t-h)}{2h} - y'(t) \tag{14}$$

Die Funktionen $y(t+h)$ und $y(t-h)$ werden in einer Taylorentwicklung angenähert, anders als unter Punkt 1.1 aber bis zur dritten Ableitung.

$$D_z(h) - y'(t) = \frac{y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2} y''(t) + \frac{h^3}{6} y''' + \mathcal{O}(h^4) - y(t) + hy' - \frac{h^2}{2} y'' + \frac{h^3}{6} y''' + \mathcal{O}(h^4)}{2h} - y'(t) \tag{15}$$

Dies ergibt zusammengefasst:

$$D_z(h) - y'(t) = \frac{h^2}{6} y''' \tag{16}$$

mit

$$y(t) \in C^3[a,b] \tag{17}$$

Bei der anschließenden Betragsabschätzung wird $\mathcal{O}(h^3)$ wieder nicht mehr berücksichtigt.

$$|D_e(h) - y'(t)| \leq |\frac{h^2}{6} y'''(t)| \leq \frac{h^2}{6} |y'''| \leq \frac{h^2}{6} M_3 \tag{18}$$

Hier bildet M_3 analog zu vorher die obere Schranke für die 3. Ableitung.

$$|y'''(t)| \leq M_3 \quad \text{für} \quad t \in [a,b] \tag{19}$$

2.2.2 Rechenfehler

Hier wird analog zu vorher vorgegangen.

$$\tilde{D}_z(h) = \frac{\tilde{y}(t+h) - \tilde{y}(t-h)}{2h} = \frac{(y(t+h)(1+\rho_1) - y(t-h)(1+\rho_2))(1+\rho_3)}{2h}(1+\rho_4) \tag{20}$$

Hier werden nach der Multiplikation wieder Produkte kleiner Zahlen vernachlässigt.

$$\tilde{D}_z(h) = \frac{y(t+h)(1+\rho_1+\rho_2+\rho_3) - y(t-h)(1+\rho_2+\rho_3+\rho_4)}{2h} \tag{21}$$

was nach herausheben folgenden Ausdruck liefert.

$$\tilde{D}_z(h) = D_z(h) \left(1 + \frac{2h}{(y(t+h) - y(t-h))2h}(\rho_1 + \rho_2 + \rho_3)\right) \tag{22}$$

Dies führt zu folgender Schranke:

$$|\tilde{D}_z(h) - D_z(h)| \leq \frac{1}{2hU_2} 6eps \tag{23}$$

2.3 Optimale Schrittweite

Somit ergeben sich für die beiden Differnenzenquotienten folgende Fehler:

$$f_e(h) = \frac{h}{2} M_2 + 6eps \frac{M_0}{hU_1} \tag{24}$$

$$f_z(h) = \frac{h^2}{6} M_3 + 3eps \frac{M_0}{hU_1} \tag{25}$$

Nach Kurvendiskussion der beiden Fehlerfunktionen kann das minimale h angegeben werden. Die Konstanten M_0, M_1, M_2 und U_1 werden als 1 angenommen, eps hat den Wert 10^{-16}. Somit erhalten wir für das einseitige und zweiseitige Verfahren folgende Formeln und Werte:

Einseitig:

$$h = (\frac{M_2 U_1}{12 M_0 eps})^{-1/2} = 3,4641 * 10^{-8} \tag{26}$$

Zweiseitig:

$$h = (\frac{M_3 U_1}{9 M_0 eps})^{-1/3} = 9,6549 * 10^{-6} \tag{27}$$

3 Extrapolierte Funktion zur Berechnung der Ableitung

Motiviert wird der folgende Ansatz dadurch, dass der Rechenfehler noch weiter minimiert werden soll und somit eine noch genauer numerische Differentiation möglich sein soll. Dabei werden die Formeln aufbauend auf die Theroie des Zweiseitigen Differenzenquotienten hergeleitet.

Grundsätzlich ist nun die Idee wir nehmen den Formelapparat des Zweiseitigen Differenzenquotienten her und werten diesen 3 mal aus, nämlich für $D_z(h), D_z(h/2), D_z(h/4)$. Im Anschluss können wir eine Exprapolation des Fehlers vornehmen.

3.0.1 Ansatz

Wir können für den Fehler annehmen das dieser nur von Potenzen von h^2 abhängt, da diese in der Formel (18) auftreten. Unser Ansatz für eine fehlerbehaftete Ableitungsfunktion, welche bei $h = 0$ unserer exakten Funktion entspricht ist folgender:

$$f(h) = C_0 + C_1 h^2 + C_2 h^4 \tag{28}$$

Für diese Funktion fordern wir das sie mit unseren zweiseitigen Differenzenquorienten zusammenstimmt und somit die folgenden Bedingungen erfüllt:

$$f(h) = D_z(h) := y_1 \tag{29}$$
$$f(h/2) = D_z(h/2) := y_2 \tag{30}$$
$$f(h/4) = D_z(h/4) := y_3 \tag{31}$$

Dieser Ansatz führt uns auf ein Lineares Gleichungssystem welches wir für c_0 lösen müssen.

$$\begin{pmatrix} 1 & h^2 & h^4 \\ 1 & \frac{h^2}{4} & \frac{h^4}{16} \\ 1 & \frac{h^2}{16} & \frac{h^4}{256} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

Aufgelöst für C_0 erhalten wir.

$$D_{extr}(h) = C_0 = \frac{1}{45} y_1 - \frac{4}{9} y_2 + \frac{64}{45} y_3 \tag{32}$$

Um diesen Ausdruck auszuwerten setzen wir für die einzelnen zweiseitigen Differenzenquotienten ein und entwickeln die Funktion $y(t+h)$ mit einem Taylorpolynom bis zur Ordnung h^6. Einfach algebraische Umformungen liefern uns das gewünschte Ergebnis.

$$D_{extr}(h) = y'(t) + \frac{1}{322560} h^6 y^{(7)}(t) + \mathcal{O}(h^8) \tag{33}$$

4 Experimentelle Untersuchtung

Numerische Differentation

```
eps = 10^(-16);
hEinseitig = (12*eps)^(1/2) % Die Konstanten M2, U1, M0 werden als 1 angenommen
```

```
hEinseitig = 3.4641e-08
```

```
hZweiseitig = (9*eps)^(1/3) % Die Konstanten M2, U1, M0 werden als 1 angenommen
```

```
hZweiseitig = 9.6549e-06
```

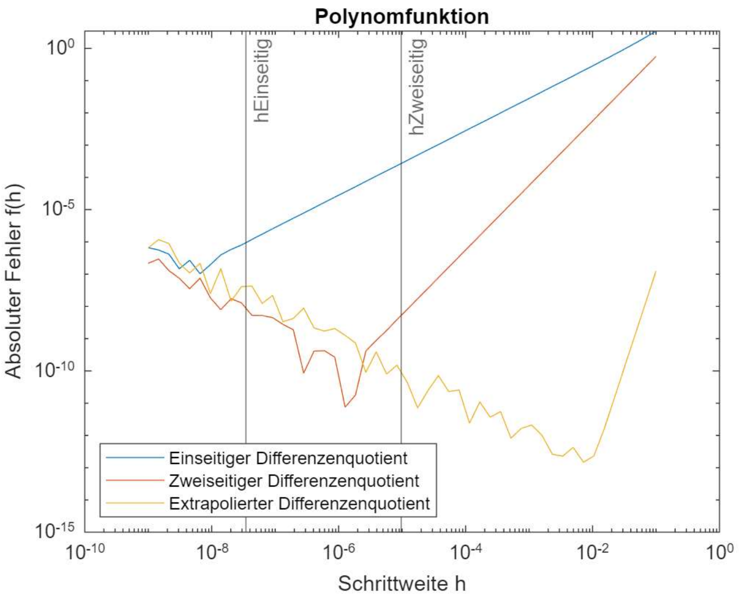
```
x=1;
h = logspace(-9,-1);
```

Polynomfunktion

```
f = @func3;
fa = @func3Strich;

AbsFehlerEinseitig = FehlerEinseitigerDifferenzenquotient(f,fa,h,x);
AbsFehlerZweiseitig = FehlerZweiseitigerDifferenzenquotient(f,fa,h,x);
AbsFehlerExtrapoliert = FehlerExtrapolierterDifferenzenquotient(f,fa,h,x);

loglog(h,AbsFehlerEinseitig)
hold on
loglog(h,AbsFehlerZweiseitig)
loglog(h,AbsFehlerExtrapoliert)
xline(hEinseitig,'-',{'hEinseitig'});
xline(hZweiseitig,'-',{'hZweiseitig'});
title('Polynomfunktion')
legend({'Einseitiger Differenzenquotient', 'Zweiseitiger Differenzenquotient', 'Extrapolierter Differenzenquotient'}, ...
    'Location','southwest')
ylabel('Absoluter Fehler f(h)')
xlabel('Schrittweite h')
hold off
```



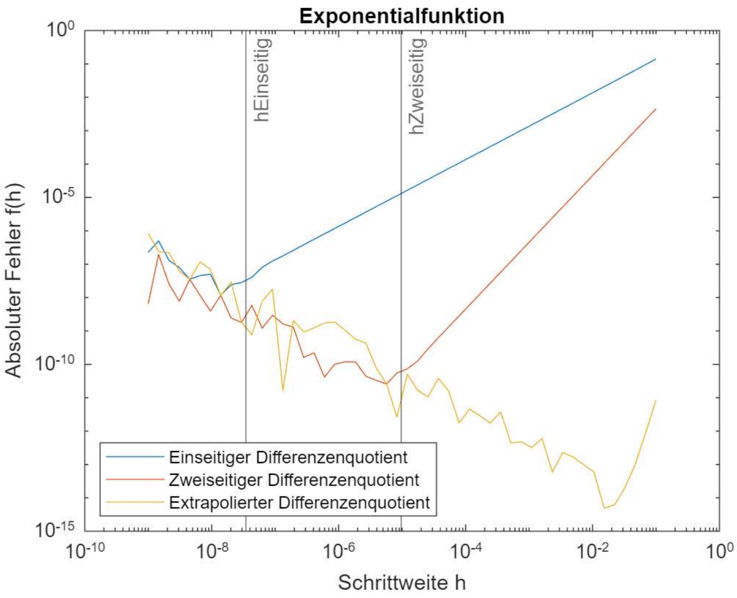
Exponentialfunktion

```
f = @func1;
fa = @func1Strich;

AbsFehlerEinseitig = FehlerEinseitigerDifferenzenquotient(f,fa,h,x);
AbsFehlerZweiseitig = FehlerZweiseitigerDifferenzenquotient(f,fa,h,x);
AbsFehlerExtrapoliert = FehlerExtrapolierterDifferenzenquotient(f,fa,h,x);

loglog(h,AbsFehlerEinseitig)
hold on
loglog(h,AbsFehlerZweiseitig)
loglog(h,AbsFehlerExtrapoliert)
xline(hEinseitig,'-',{'hEinseitig'});
xline(hZweiseitig,'-',{'hZweiseitig'});
title('Exponentialfunktion')
```

```
legend({'Einseitiger Differenzenquotient', 'Zweiseitiger Differenzenquotient', 'Extrapolierter Differenzenquotient'}, ...
    'Location','southwest')
ylabel('Absoluter Fehler f(h)')
xlabel('Schrittweite h')
hold off
```

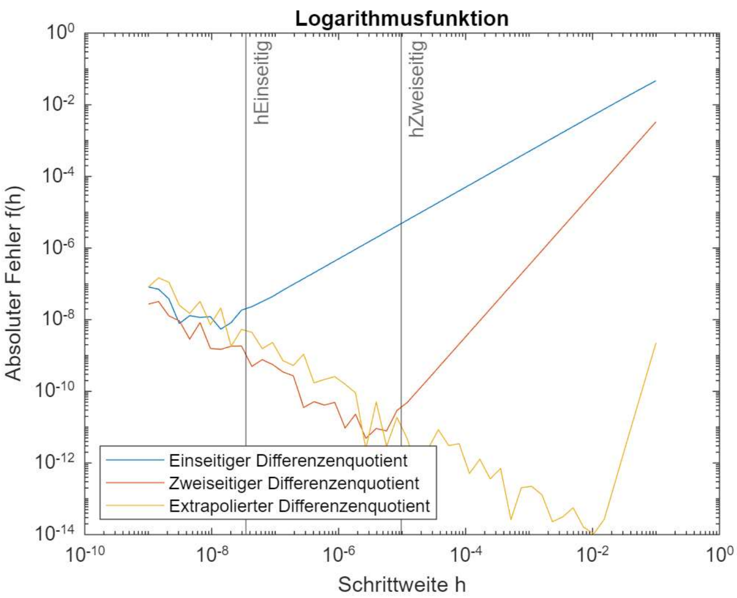


Logrithmus

```
f = @func2;
fa = @func2Strich;

AbsFehlerEinseitig = FehlerEinseitigerDifferenzenquotient(f,fa,h,x);
AbsFehlerZweiseitig = FehlerZweiseitigerDifferenzenquotient(f,fa,h,x);
AbsFehlerExtrapoliert = FehlerExtrapolierterDifferenzenquotient(f,fa,h,x);

loglog(h,AbsFehlerEinseitig)
hold on
loglog(h,AbsFehlerZweiseitig)
loglog(h,AbsFehlerExtrapoliert)
xline(hEinseitig,'-',{'hEinseitig'});
xline(hZweiseitig,'-',{'hZweiseitig'});
title('Logarithmusfunktion')
legend({'Einseitiger Differenzenquotient', 'Zweiseitiger Differenzenquotient', 'Extrapolierter Differenzenquotient'}, ...
    'Location','southwest')
ylabel('Absoluter Fehler f(h)')
xlabel('Schrittweite h')
hold off
```



Numerische Funktionen für die Differentation

Unsere Funktionen für die Berechnung des Absoluten Fehlers der einzelenen numerischen Ableitungsfunktionen

```
function output = FehlerEinseitigerDifferenzenquotient(g,ga,h,x)
    output = abs(EinseitigerDifferenzenquotient(g,h,x)-ga(x));
end

function output = FehlerZweiseitigerDifferenzenquotient(g,ga,h,x)
    output = abs(ZweiseitigerDifferenzenquotient(g,h,x)-ga(x));
end

function output = FehlerExtrapolierterDifferenzenquotient(g,ga,h,x)
    output = abs(ExtrapolierterDifferenzenquotient(g,h,x)-ga(x));
end
```

Als nächstes Definieren wir die einzelnen Numerischen Ableitungsfunktionen.

```
function output = EinseitigerDifferenzenquotient(g,h,x)
    output = (g(x+h)-g(x))./h;
end

function output = ZweiseitigerDifferenzenquotient(g,h,x)
    output = (g(x+h)-g(x-h))./(2*h);
end

function output = ExtrapolierterDifferenzenquotient(g,h,x)
    output = 1/45*(ZweiseitigerDifferenzenquotient(g,h,x)- ...
            20*ZweiseitigerDifferenzenquotient(g,h/2,x) + ...
            64*ZweiseitigerDifferenzenquotient(g,h/4,x));
end
```

Formeln Expotnetialfunktion

Für die folgende Berechnung defnieren wie die Funktion die wir ableiten wollen, als auch unsere analytisch abgeleitet Version der Funktion.

```
function output = func1(x)
    output = exp(x);
end

function output = func1Strich(x)
    output = exp(x);
end
```

Formeln Logrithmusfunktion

```
function output = func2(x)
    output = log(x);
end

function output = func2Strich(x)
    output = x.^(-1);
end
```

Formeln Polynomfunktion

```
function output = func3(x)
    output = x.^8;
end

function output = func3Strich(x)
    output = 8*x.^7;
end
```

Diskusion

Bei allen drei Testfunktionen (Polynomfunktion, Exponentialfunktion, Logarithmusfunktion) kann festgestellt werden, dass die optimalen Werte für hEinseitig und hZweiseitig nahe der experimentell ermittelten Minima sind. In weiterer Folge könnte für den extrapolierten Differenzenquotienten auch eine optimale Schrittweite ermittelt werden, welche nach den ermittelten Plots sind in einer Größenordnung von 0,01 befinden sollte. Weiters ist klar erkennbar, dass die erweiterten Alogrithmen für numerische Differentation bessere Ergebnisse liefern.