Serie 1 – Approximation von Ableitungen mittels finiter Differenzen (Teil 2: Bericht)

Thema: numerisches Differenzieren

1. Einleitung/Motivation

- im Gegensatz zur Analysis bietet die Numerik praktikable Näherungen an Real- bzw. Idealbilder
- die Güte dieser Näherung ist im Minimum abschätzbar oder gegen eine Toleranz beweisbar

- Wozu müssen/wollen wir Ableitungen approximieren?
- Wieso ist es sinnvoll, dies auf die dargestellte Weise durchzuführen?

- Funktion durch Formeln explizit bekannt, aber Differenzieren zu aufwendig
- Ermitteln von Funktionswerten schwierig, weil Ableitung zu komplex
- Hauptanwendungsgebiet: Datenverarbeitung von Messwerten
- Funktion nicht explizit bekannt/liegt nicht in analytischer Form vor, nur Wertetabelle/Liste von Messdaten (diskrete Punkte)
- > Infos lückenhaft (nur endliche Auswahl von Messwerten)
- > Ableitung mit Methoden der Differentialrechnung nicht (exakt) bestimmbar
- > numerische Verfahren, um Ableitungen näherungsweise zu berechnen oder zu schätzen > Problemlösung z.B. via finite Differenzen/Differenzenformeln

- in Praxis wichtiger Fall: 1. Ableitung (Steigung/Änderung)

2. Theorie

- Gesamtfehler = Verfahrensfehler (Diskretisierungs-/Abbruchfehler) + Rundungsfehler
- Verfahrensfehler: Unterschied zwischen dem exakten Wert der Ableitung an der Stelle x und dem exakten Wert des Differenzenquotienten an der Stelle x (Ersetzen des Differentialquotienten der Ableitung durch Sekantenanstieg)
- Rundungsfehler: Zahldarstellung und Rechnen auf Computer nur näherungsweise, mit endlicher Genauigkeit
- Computerarithmetik

Herleiten der Formeln

- zwei Ansätze möglich: Definition der Ableitung durch den Differentialquotienten/geometrisch, Taylorentwicklung
- Def. Differentialquotient: Grenzübergang h gegen 0 numerisch nicht durchführbar (overflow)
- wenn Rundungsfehler vernachlässigt werden, geht der die numerischer Wert vom Differenzenquotienten gegen den der exakten Ableitung
- Ableitung von f an Stelle x geometrisch: Anstieg der Tangente von f in x
- Taylorentwicklung liefert Approximationsmöglichkeit für Ableitungen von Funktionen (Taylorentwicklung von f um x: f(x+h), f(x-h) …)

- Differenzenquotient misst mittlere spezifische Veränderung von f zwischen x und x+h (Sekante durch x und x+h > Sekantensteigung)
- linksseitiger/Vorwärts-Differenzenquotient/Differenzenformel, rechtsseitiger/Rückwärts-Differenzenquotient/Differenzenformel, symmetrischer Differenzenquotient/zentrale Differenzenformel erster Ordnung, symmetrischer Differenzenquotient zweiter Ordnung
- links- und rechtsseitiger Differenzenquotient Näherungen für f'(x)
- > suboptimal, v.a. für einseitig gekrümmte Funktionsgraphen: sehr große Abweichung zwischen Sekanten- und Tangentensteigung (Differenzenquotient und Differentialquotient)
- > sinnvoll: Fehler durch Mittelung verkleinern > arithmetische Mittel der beiden einseitigen/asymmetrischen Differenzenquotienten: symmetrischer Differenzenquotient (Sekantensteigung zwischen x-h und x+h) genauere Differenzenformel
- Verdoppeln der Schrittweite gut aus numerischer Sicht > optimales Ergebnis schon bei größerem h
- Fehler der Differenzenformel in Größenordnung O(h^2), nicht mehr proportional zu h, sondern sogar zu h^2 (falls man Rundungsfehler vernachlässigt)
- Abbruch-/Verfahrens-/Diskretisierungsfehler linear in h, Abbruchfehler bei symmetrischem Differenzenquotienten nur von Größenordnung h^2
- > Exponent = Ordnung des Verfahren: 1 bzw. 2 (Konvergenzordnung/-geschwindigkeit)
- durch mehrfaches Anwenden einer Differenzenformel für die erste Ableitung lassen sich Differenzenformeln für höhere Ableitungen gewinnen

optimale Schrittweite h

- Problem der Differenzenquotienten ist Wahl der optimalen Schrittweite h:
- zu großes h führt zu Verfahrensfehlern (Verfahren funktionieren nicht zuverlässig genug),
- zu kleines h führt zu Rundungsfehlern zu Auslöschung

- z.B. Tabelle Schrittweite h in Abhängigkeit von maximalem absoluten Fehler e
- (Diskretisierungs)Fehler wird beim Vermindern der Schrittweite zunächst kleiner, dann aber bei sehr kleinen h wieder größer (Grund: Rundungsfehler, begrenzte Genauigkeit der Funktionenberechnung, (Stellen-)Auslöschung bei Subtraktion von zwei fast gleich großen Zahlen > Auslöschen von Ziffern/signifikanten Stellen)
- Auswertung des Fehlers u.U. Fehler, der durch Division vom sehr kleinen h stark vergrößert wird
- > h nicht allzu klein wählen für möglichst exakte Ergebnisse
- bei Berechnung mit Gleitkommaarithmetik und begrenzter Mantissenlänge kann im Differenzenquotienten Stellenauslöschung auftreten, wenn h zu nahe an der 0 liegt
- > analytische Fehlerabschätzung nur begrenzt tauglich

Grenzen des Verfahrens

- Approximation der Ableitung mittels Differenzenquotient numerisch problematisch, da für kleine Schrittweiten h die Gefahr der Auslöschung besteht

3. Experimente: Beobachtungen

4. Experimente: Auswertung
(experimentelle Ergebnisse im Kontext zur Theorie, Erklräungen)

1.2, a) Vergleichen Sie die exakte und approximierte erste und zweite Ableitung von g_1 für h = pi/3, h = pi/4, h = pi/5 und h = pi/10 graphisch: (4 Plots)

- in diesem Bsp.: je kleiner die Schrittweite h, desto besser die Approximation
- schon gute Approximation mit gröbster Schrittweite bei zweiter Ableitung
- bei erster Ableitung erst mit kleinster Schrittweite ähnlich gute Approximation wie bei erster Ableitung mit gröbster Schrittweite
- bei kleinster Schrittweite liegt der Graph der finiten Differenz zweiter Ordnung bereits so gut wie auf dem Graphen der zweiten Ableitung

Erklärungen:

- die Approximation der zweiten Ableitung konvergiert i. A. schneller und verursacht kleinere Fehler
- die Approximation der zweiten Ableitung mittels finiter Differenz zweiter Ordnung konvergiert quadratisch
- hingegen konvergiert die Approximation der ersten Ableitung mittels finiter Differenz erster Ordnung nur linear (sieht man am Fehlerterm: durch h^2 bzw. durch h)
- auch erkennbar im Konvergenz-/Fehlerplot:

1.2, b) Zeichnen Sie die Fehlerplots in Abhängigkeit von h = 1, 0.1, . . . , 10^-l. Wählen Sie l jeweils so groß, dass das in der Theorie ermittelte und zunächst erwartete Konvergenzverhalten nicht für alle h beobachtet wird.

- zum einen ist der maximale absolute Fehler bei der Approximation der zweiten Ableitung mittels finiter Differenz zweiter Ordnung in dem gewählten Bereich der Schrittweiten (pi/3 bis pi/10, also ca. 1 und 0,3) immer kleiner als der der Approximation der ersten Ableitung mittels finiter Differenz erster Ordnung
- zum anderen wird er schneller kleiner
- der Anstieg entspricht dem von h^2 bzw. h, also 2 bzw. 1 (dessen Anstieg im doppeltlogarithmischen Plot mit dem geraden Graphen gut erfassbar ist)

- "zu kleine" Schrittweite:
- Fehler bei Rundung sehr kleiner Zahlen sehr groß
- (Eingabe von nicht-Maschinenzahlen > Rundung zur nächstgelegenen Maschinenzahl,
- Pseudoarithmetik: Menge der Maschinenzahlen bzgl. Operationen der Addition, Subtraktion, Multiplikation und Division nicht abgeschlossen > Ergebnis wird wieder zur nächstgelegenen Maschinenzahl gerundet)
- Gefahr der Auslöschung: Subtraktion zweier etwa gleich großer Zahlen > starke Verringerung der gültigen/signifikanten Stellen
- In der Computerarithmetik sind Addition und Multiplikation kommutativ, Assoziativ- und Distributivgesetze gelten aber i. A. nicht.

- > Dies hat zur Folge, dass analytisch äquivalente Ausdrücke auf dem Computer zu erheblich unterschiedlichen Ergebnissen führen können.
- Fehler pflanzen sich fort: Rundungsfehler verstärken sich.

1.3 a)

- Teil a: Strecken in x-Richtung, Stauchen in y-Richtung
- Größenordnung des maximalen absoluten Fehlers nimmt ab, optimale Schrittweite h wird größer

1.3 b)

- Teil b: Stauchen in x-Richtung, Strecken in y-Richtung
- Größenordnung des maximalen absoluten Fehlers nimmt zu, optimale Schrittweite h wird kleiner

<u>Schluss und Ausblick</u>

- Vorteile: sehr überschaubare, leicht anwendbare Formel, einfaches Verfahren mit quadratischer Konvergenzgeschwindigkeit (zentrale Differenzenquotienten)
- Nachteile: sehr kleine Zahlen und Schrittweiten problematisch

- noch interessant: Experimente mit zentralen Differenzenquotienten, Stichwort Effizienz > Wie viel Zeit benötigt Rechner zum Bereitstellen einer passablen Lösung?, Stichwort Genauigkeit > Könnten wir die Formel analytisch so äquivalent umstellen, dass genauere Ergebnisse geliefert werden?