

Approximation von Ableitungen mittels finiter Differenzen

Marisa Breßler und Anne Jeschke

08.11.2019

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Theorie	3
2.1	Vom Differential- zum Differenzenquotienten und umgekehrt	3
3	Theorie	4
3.1	Herleitung der Formeln	4
3.2	Approximieren von Ableitungen via Taylorentwicklung	5
3.3	Fehler und Schrittweite	5
4	Experimente und Beobachtungen	6
5	Auswertung	7
6	Zusammenfassung	8
7	Literatur	9

1 Einleitung

Im Gegensatz zur Analysis bietet die Numerik praktikable Näherungen an Real- bzw. Idealbilder. Die Güte dieser Näherung ist im Minimum abschätzbar, bleibt also unterhalb einer beweisbaren Toleranzgrenze.

Ableitungen von Funktionen spielen in der Praxis eine große Rolle. So dienen die erste und die zweite Ableitung in der Physik z.B. der Untersuchung von Bewegungsabläufen (Geschwindigkeit und Beschleunigung definiert als erste bzw. zweite Ableitung des Weges nach der Zeit). Änderungsprozesse müssen in ganz unterschiedlichen Kontexten erfasst und/oder vorausgesagt werden. Dabei ist es in einer Vielzahl von Praxisbeispielen notwendig, Ableitungen zu approximieren. U.U. ist eine Funktion zwar durch Formeln bekannt, doch das exakte Differenzieren gestaltet sich als aufwändig oder das Ermitteln von Funktionswerten als schwierig, weil die Ableitungsfunktion von sehr komplexer Natur ist. Das näherungsweise Differenzieren hat eines ihrer Hauptanwendungsgebiete bei der Verarbeitung von Messwerten. Hier ist die Funktion i.A. nicht explizit bekannt, d.h. sie liegt nicht in analytischer Form, sondern nur in Form von diskreten Punkten vor. Aufgrund der gegebenen lückenhaften Informationen ist die Ableitung mit analytischen Methoden der Differentialrechnung nicht exakt bestimmbar. An dieser Stelle werden numerische Verfahren verwendet, um die Ableitungen (bzw. die Werte der Ableitungen an bestimmten Stellen) mit einer gewissen Genauigkeit näherungsweise zu ermitteln.

Numerik beantwortet die Frage: Was bleibt vom Ableitungsbegriff übrig, wenn alle Rechnungen in endlich vielen Schritten und mit endlich vielen Zahlen in endliche vielen Ziffern abgehandelt werden müssen? (Schneebeli, S. 4)

Numerisches Differenzieren ist z.B. mit den sogenannten finiten Differenzen möglich. Diese stellen eine überschaubares Verfahren zum Approximieren von Ableitungen zur Verfügung. Auf welche Weise und wie gut, d.h. mit welcher Genauigkeit, das funktioniert, soll im Folgenden erläutert werden.

2 Theorie

Die Formeln der finiten Differenzen, auch Differenzenformeln genannt, lassen sich auf verschiedene Weisen herleiten. Im Folgenden wollen wir zwei Ansätze vorstellen: Zum einen ist das ein geometrischer Ansatz, der die Definition der Ableitung über den Differentialquotienten nutzt, d.h. den Anstieg der Tangente an der zu untersuchenden Funktion an der zu betrachtenden Stelle. Zum anderen ist es ein Ansatz, der sich die Eigenschaften der Taylorentwicklung zunutze macht.

2.1 Vom Differential- zum Differenzenquotienten und umgekehrt

Der Ausgangspunkt unserer geometrischen Herleitung der Differenzenformeln bildet die Definition der Ableitung:

Eine Funktion $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ (mit $D \subset \mathbb{R}$) heißt differenzierbar an der Stelle $x_0 \in D$, falls folgender Grenzwert existiert:

$$f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

Dieser Grenzwert heißt *Differentialquotient* / *Ableitung* von f nach x an der Stelle x_0 .

Ersterer fordert, dass man h (DEFINITION AUFSCHREIBEN) gegen 0 laufen lässt. Dies ist numerisch nicht möglich, da es im Rechner zu einem Overflow kommen kann.

Wenn Rundungsfehler vernachlässigt werden, geht der numerische Wert des Differenzenquotienten gegen den exakten Wert der Ableitung.

Der Differenzenquotient misst die mittlere spezifische Veränderung von f zwischen den Stellen x und $x+h$, indem die Steigung der Sekante durch x und $x+h$ berechnet wird. Man unterscheidet zwischen dem rechtsseitigen Differenzenquotienten, bei dem man die Steigung zwischen x und $x+h$ betrachtet, und dem linksseitigen Differenzenquotienten, bei dem man die Steigung zwischen x und $x-h$ betrachtet.

Die Nutzung des links- oder rechtsseitigen Differenzenquotienten ist suboptimal vor allem für einseitig gekrümmte Funktionsgraphen, bei denen man oft eine sehr hohe Abweichung zwischen Sekanten- und Tangentesteigung beobachten kann. Deshalb kann es sinnvoll sein diesen Fehler durch Mittelung zu verkleinern und das arithmetische Mittel der beiden einseitigen Differenzenquotienten zu betrachten, d.h. die Sekantensteigung zwischen $x-h$ und $x+h$. Dies bezeichnet man als symmetrischen Differenzenquotienten erster Ordnung. Um die zweite Ableitung zu approximieren, kann man analog den symmetrischen Differenzenquotienten zweiter Ordnung nutzen. (FORMELN)

Numerisches Differenzieren ist z.B. mit den sogenannten finiten Differenzen möglich. Diese stellen eine überschaubares Verfahren zum Approximieren von Ableitungen zur Verfügung. Auf welche Weise und wie gut, d.h. mit welcher Genauigkeit, das funktioniert, soll im Folgenden erläutert werden.

3 Theorie

Die Fehler der numerischen Berechnung der Ableitungen gegenüber der exakten analytischen Berechnung setzen sich zusammen aus Verfahrensfehlern, d.h. Diskretisierungs- und Abbruchfehlern, und Rundungsfehlern.

Beim Verfahrensfehler hält es sich im Wesentlichen um den Unterschied zwischen dem exakten Wert der Ableitung an der Stelle x und dem exakten Wert des Differenzenquotienten an der Stelle x . Man ersetzt den Differentialquotienten durch den Sekantenanstieg.
- Computerarithmetik

Die Rundungsfehler sind darauf zurückzuführen, dass die Zahlendarstellung auf dem Computer nur mit endlicher Genauigkeit, näherungsweise an die eigentliche Zahl herankommt.

3.1 Herleitung der Formeln

Zur Herleitung einer Formel für die Approximation der Ableitung sind zwei Ansätze möglich: Der geometrische Ansatz über die Definition der Ableitung mittels des Differentialquotienten, also den Anstieg der Tangente an die Funktion an der zu betrachtenden Stelle und der Ansatz über die Taylorentwicklung. Ersterer fordert, dass man h (DEFINITION AUFSCHREIBEN) gegen 0 laufen lässt. Dies ist numerisch nicht möglich, da es im Rechner zu einem Overflow kommen kann.

Wenn Rundungsfehler vernachlässigt werden, geht der numerische Wert des Differenzenquotienten gegen den exakten Wert der Ableitung.

Die Taylorentwicklung liefert eine Approximationsmöglichkeit für Ableitungen von Funktionen mittels der Taylorentwicklung von einer Funktion f um einen Wert x , also an Stellen $x + h$, $x - h$.

Der Differenzenquotient misst die mittlere spezifische Veränderung von f zwischen den Stellen x und $x + h$, indem die Steigung der Sekante durch x und $x + h$ berechnet wird. Man unterscheidet zwischen dem rechtsseitigen Differenzenquotienten, bei dem man die Steigung zwischen x und $x + h$ betrachtet, und dem linksseitigen Differenzenquotienten, bei dem man die Steigung zwischen x und $x - h$ betrachtet.

Die Nutzung des links- oder rechtsseitigen Differenzenquotienten ist suboptimal vor allem für einseitig gekrümmte Funktionsgraphen, bei denen man oft eine sehr hohe Abweichung zwischen Sekanten- und Tangentesteigung beobachten kann. Deshalb kann es sinnvoll sein diesen Fehler durch Mittelung zu verkleinern und das arithmetische Mittel der beiden einseitigen Differenzenquotienten zu betrachten, d.h. die Sekantensteigung zwischen $x - h$ und $x + h$. Dies bezeichnet man als symmetrischen Differenzenquotienten erster Ordnung. Um die zweite Ableitung zu approximieren, kann man analog den symmetrischen Differenzenquotienten zweiter Ordnung nutzen. (FORMELN)

3.2 Approximieren von Ableitungen via Taylorentwicklung

Die Taylorentwicklung liefert eine Approximationsmöglichkeit für Ableitungen von Funktionen mittels der Taylorentwicklung von einer Funktion f um einen Wert x , also an Stellen $x+h$, $x-h$.

3.3 Fehler und Schrittweite

Die Fehler der numerischen Berechnung der Ableitungen gegenüber der exakten analytischen Berechnung setzen sich zusammen aus Verfahrensfehlern, d.h. Diskretisierungs- und Abbruchfehlern, und Rundungsfehlern.

Beim Verfahrensfehler hält es sich im Wesentlichen um den Unterschied zwischen dem exakten Wert der Ableitung an der Stelle x und dem exakten Wert des Differenzenquotienten an der Stelle x . Man ersetzt den Differentialquotienten durch den Sekantenanstieg.
- Computerarithmetik

Die Rundungsfehler sind darauf zurückzuführen, dass die Zahlendarstellung auf dem Computer nur mit endlicher Genauigkeit, näherungsweise an die eigentliche Zahl herankommt.

Ein Problem bei der Approximation mit Differenzenquotienten ist die Wahl der optimalen Schrittweite h . Ein zu großes h führt zu Verfahrensfehlern, ein zu kleines h zu Auslöschung.

Beim Vermindern der Schrittweite ist zu erwarten, dass der Fehler zunächst kleiner wird, da die Genauigkeit steigt. Da Maschinenzahlen jedoch nur eine endliche Genauigkeit besitzen, muss man bei zu kleinen Schrittweiten mit Auslöschungen bei der Subtraktion rechnen und damit wieder mit einer sinkenden Genauigkeit.

Ein Problem bei der Approximation mit Differenzenquotienten ist die Wahl der optimalen Schrittweite h . Ein zu großes h führt zu Verfahrensfehlern, ein zu kleines h zu Auslöschung.

Beim Vermindern der Schrittweite ist zu erwarten, dass der Fehler zunächst kleiner wird, da die Genauigkeit steigt. Da Maschinenzahlen jedoch nur eine endliche Genauigkeit besitzen, muss man bei zu kleinen Schrittweiten mit Auslöschungen bei der Subtraktion rechnen und damit wieder mit einer sinkenden Genauigkeit.

4 Experimente und Beobachtungen

- Untersuchen Konvergenzverhalten der Approximation der Ableitungen mit Finiten Differenzen
- 1.: $g_1(x) = \sin(x)/x$ auf $[\pi, 3\pi]$ mit $p = 1000$
- Vergleich der exakten und approximierten ersten und zweiten Ableitungen von g_1 für $h = \pi/3$, $h = \pi/4$, $h = \pi/5$ und $h = \pi/10$
- Fehlerplots für verschiedene h , Vergleich erwartetes und actual Konvergenzverhalten
- 2.: $g_1(x) = \sin(jx)/x$ Vergleich für kleinere j :
 - bei $j=0.5$, 0.25 e_2 fast konstant, e_1 lin
 - 0.1 , 0.075 wie gewohnt
 - 0.05 , 0.01 wieder konstant
- 3.: Vergleich für größeres j :
 - $j=2, 4, 10, 20$: e_1 fast linear, e_2 minimum bei 10^{-4} , fehler insgesamt immer größer
 - $j=100-450$: e_2 minimum bei ca. 10^{-5} , dann quadr, dann konstant?
 - $j=475$: e_1 konstant
 - $j=500$ e_2 fast gleich e_1
- Amplitude der exakten 2. Abl immer viel größer als der Appr.

5 Auswertung

- Größenordnung des Fehlers bei 1. Abl größer, weil h , bei 2. kleiner, weil h^2 für $h < 1$
- bei zu wenig auswertungspunkten ungenauer plot, etc.

6 Zusammenfassung

Dann die Zusammenfassung.

7 Literatur