

Ableitungen, analytisch und numerisch

H.R. Schneebeli

Version vom 19. Mai 2016

Zusammenfassung

Bei Funktionen, die numerisch berechnet werden, ist die Wertemenge diskret. Aus Sicht der Analysis, stellt sich die Frage, wie aus endlich vielen approximativ berechneten Werten einer differenzierbaren Funktion Näherungen für die Funktionswerte der Ableitung gefunden werden. Analoge Fragen ergeben sich bei Abtastungen von Funktionen oder bei Funktionen, die experimentell durch digitale Messdaten erfasst werden.

Die Rechnerzahlen \mathbb{R}_M , Approximationen bei der Funktionsberechnung, Diskretisierung bei der numerischen Ableitung führen zu unvermeidbaren Abweichungen zwischen formal exakten und numerischen Ableitungen. Ein numerisches Ableitungsverfahren gilt als umso besser, je mehr Funktionen es – bei exakter Arithmetik – exakt ableitet.

Es werden verschiedene Beispiele für numerische Ableitungen entwickelt, verglichen, analysiert.

Unter der Annahme, dass die Fehler der Funktionsberechnung abschätzbar sind, lässt sich die Diskretisierung bei der numerischen Ableitung so optimieren, dass der Gesamtfehler bei der numerischen Ableitung möglichst gering wird.

Wenn experimentell bestimmte Werte einer Funktion vorliegen und dazu Ableitungen gesucht sind, liegt ein ähnliches Problem vor. Es kann dann aber sinnvoll sein, die Daten vorab mit statistischen Verfahren zu glätten. Regression erzeugt elementare Funktionen, die sich formal exakt differenzieren lassen. Dieser Ansatz wird in Beispielen beleuchtet.

Voraussetzungen Grenzwerte [bei rationalen Funktionen], Differenzenquotienten, Ableitung und Interpretation der Ableitung in verschiedenen Zusammenhängen (Tangentensteigung, Momentangeschwindigkeit, lokale spezifische Veränderung)

Ziele

- Verschiedene numerische Näherungen für Ableitungen entwickeln, die auf diskreten Daten anwendbar sind.
- Die Diskretisierung bei numerischen Ableitungen auf die Genauigkeit der Funktionsauswertung abstimmen.
- Aus diskreten Daten mit Regression eine passende Funktion finden, die sich formal ableiten lässt.

1 Lokale Änderungsrate, Ableitungen in der Analysis

Wie lässt sich die Veränderung einer Grösse bestimmen? Man muss die Grösse mindestens in zwei verschiedenen Zeitpunkten messen und die Differenz der Ergebnisse beurteilen. Was aber ist eine momentane Veränderungsrate einer zeitabhängigen Grösse? Die Analysis kennt eine Standardantwort, wenn die Abhängigkeit durch eine Funktion beschreiben wird. Der Schlüsselbegriff heisst *Ableitung*. Sie wird in einem zweistufigen Vorgehen wie folgt bestimmt.

1. Diskretisierung und Näherung

Angenommen, die Funktion f ist in einem Intervall definiert, das x_0 und $x_1 \neq x_0$ enthält. Dann ist $\Delta f := f(x_1) - f(x_0)$ der Unterschied der Funktionswerte von f zwischen x_0 und x_1 und $\Delta x := x_1 - x_0$ der zugehörige Unterschied der Argumente. Das Verhältnis

$$\frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

heisst *Differenzenquotient* der Funktion f für x_0 und x_1 . Es misst die *mittlere spezifische Veränderung* von f zwischen x_0 und x_1 .

2. Idealisierung

Die Diskretisierung wird rückgängig gemacht durch einen Grenzübergang.

Wenn f in einer Umgebung von x_0 definiert ist, wird die *lokale spezifische Veränderung* von f an der Stelle x_0 definiert als *Grenzwert des Differenzenquotienten*, bei dem x_1 gegen x_0 strebt, falls dieser Limes existiert:

$$\frac{df}{dx}(x_0) := \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{\Delta f}{\Delta x}$$

Sonst gibt es diese lokale spezifische Veränderung nicht.

Eine andere Notation für die Ableitung von f an der Stelle x_0 ist $f'(x_0)$.

Wenn die Variable eine Zeit misst, so wird *lokal* als *momentan* bezeichnet.

Zunächst ist der als ‘Ableitung’ berechnete Grenzwert eine Zahl, die zu einer Funktion f und einer Stelle x_0 ihres Definitionsbereiches gehört. Wenn diese Ableitung für jeden Punkt des Definitionsbereiches von f existiert, lässt sich die Ableitung als Funktion definieren mit der Zuordnung $f' : x \mapsto f'(x)$. Funktionen heissen *differenzierbar*, wenn auf ihrem Definitionsbereich eine Ableitungsfunktion existiert.

Die formale Berechnung der Ableitungen im Sinne der Analysis kümmert sich in der Regel nicht um die konkrete Berechnung der Funktionswerte. Sie wird einfach durch die Definition der Funktion als gegeben angenommen. Beim praktischen numerischen Rechnen zeigt sich ein anderes Bild: Funktionswerte müssen für Dezimalzahlen (genauer Rechnerzahlen aus \mathbb{R}_M) mit endlich vielen arithmetischen oder logischen Operationen *angenähert werden*.

Bei rationalen Funktionen mit rationalen Koeffizienten und bei rationalem Input gelingt eine exakte Berechnung in endlich vielen Schritten mit den vier Grundoperationen.

Die Werte der für die Analysis typischen Funktionen müssen fast immer durch Grenzwerte definiert werden. Die Analysis nimmt vereinfachend oder idealisierend an, dass alle benötigten Funktionswerte absolut exakt als reelle Zahlen bestimmt seien. Der feine Unterschied zwischen ‘bestimmt’ und effektiv ‘bestimmbar’ wird oft übersehen. Die Numerik ersetzt ‘bestimmbar’ durch ‘approximierbar’. Exakte Grenzwertberechnungen vermag die Numerik nur ausnahmsweise zu leisten.

Manchmal müssen Funktionen durch Listen mit Näherungswerten ersetzt werden. Beispielsweise, wenn eine Funktion in regelmässigen Abständen abgetastet wird und die Ergebnisse in einer Tabelle mitgeteilt werden. Ein vergleichbarer Fall liegt vor, wenn eine Funktion empirisch durch eine Liste von Messdaten erfasst wird. In beiden Fällen ist die Information lückenhaft, weil nur eine endliche Auswahl der Funktionswerte – und diese in der Regel nur mit beschränkter Genauigkeit – zur Verfügung steht. In derartigen Fällen werden numerische Verfahren benutzt, um Ableitungen angenähert zu berechnen oder zu schätzen. Wenn die Daten nur mit begrenzter Genauigkeit erfassbar sind, treten zusätzliche Schwierigkeiten auf.

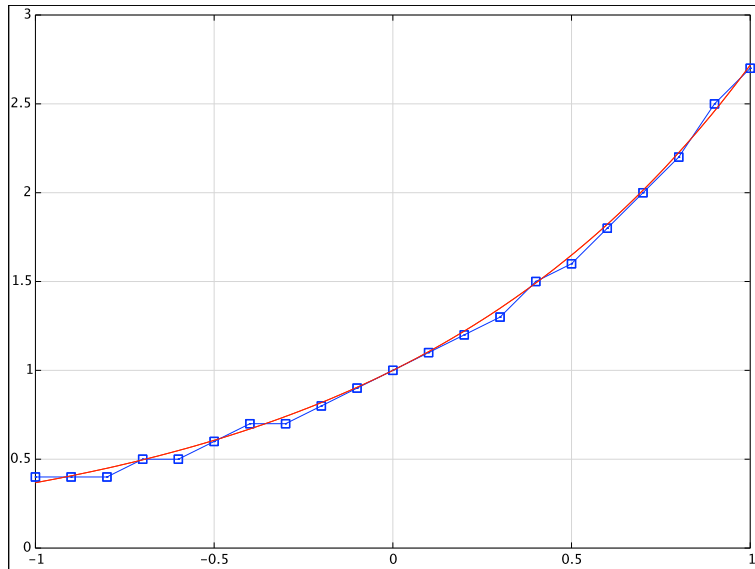


Abbildung 1: Diskretisierungsrauschen bei einer Abtastung und Rundung auf 0.1

Oft lassen sich beim Messen die eigentlichen Daten nicht von allen unkontrollierbaren oder auch zufälligen Einflüssen abschotten. Es ist dann die Rede vom *Signal*, das idealisierend die reinen Daten darstellt und vom *Rauschen*, das dem Signal überlagert ist. Bei synthetisch erzeugten Daten kennt man das Signal und das Rauschen aufgrund der Konstruktion. Bei Messdaten versucht man, ein Signal herauszufiltern und die Differenz als Rauschen zu erklären. Typisch wird das ‘Signal’ mit ‘glatt’ und das ‘Rauschen’ mit ‘wild’ assoziiert.

Diskretisierung oder Rundung der Daten auf ein bestimmtes Datenformat erzeugt eine Form von Rauschen, das Diskretisierungsrauschen, das auch die Numerik betrifft. In Abb. 1 stellt der Graph der Exponentialfunktion (rot) das Signal dar und die Abtastung mit Rundung auf 0.1 (blaue Quadrate) die Messung. Die Abweichung zwischen dem Graphen der Exponentialfunktion und den Zentren der Quadrate stellt das Rauschen dar. Die Steigung der Segmente im Streckenzug variiert stärker als die Tangentensteigung auf dem roten Graphen. Damit wird dargestellt, dass das Diskretisierungsrauschen auf die Differenzenquotienten in der Abtastung durchschlägt.

Das ‘Rauschen’ der Daten wird durch das Ableiten in der Regel vergrößert. Die numerische Berechnung der Ableitung kann sich aber auch um die Rauschunterdrückung kümmern. In Abschnitt 3.3 werden Approximationsfehler wie zufälliges Rauschen der Grösse ε betrachtet werden. Dann wird die Schrittweite bei der numerischen Ableitung so angepasst, dass Rauschen und Diskretisierung sich möglichst wenig bemerkbar machen.

Bei verrauschten Messdaten besteht eine weitere Möglichkeit, die Daten zu glätten, indem mit statistischen Methoden eine einfache und ‘glatte’ Funktion möglichst gut an die Daten angepasst wird. In Abschnitt 4 wird mit Regressionsrechnung aus den Daten eine Funktion erzeugt, welche den Datensatz so vereinfacht, dass das Rauschen herausgefiltert wird und eine einfache Funktion übrig bleibt, von der man denken kann, dass sie die Quintessenz der Daten enthält. Die formale Ableitung der Regressionsfunktion wird dann als Ersatz für die Ableitung der nur lückenhaft definierten Funktion selbst benutzt. Die Berechnung der Regressionsfunktion überlassen wir einem Statistikprogramm, dessen Innenarchitektur hier nicht betrachtet werden wird.

Numerik ergänzt und erweitert die Macht der Analysis. Das hat seinen Preis beim digitalen Rechnen mit unvermeidlichen Rundungsfehlern, Diskretisierungsfehlern, Approximationsfehlern und allenfalls Modellfehlern.

2 Numerisch ableiten mit Differenzenquotienten

Im Gegensatz zur Analysis kümmert sich Numerik um praktikable Näherungen an Idealbilder, wobei die Güte der Näherung mindestens abschätzbar ist oder gar eine vorgegebene Toleranz beweisbar einhält.

Numerik beantwortet die Frage: Was bleibt vom Ableitungsbegriff übrig, wenn alle Rechnungen in endlich vielen Schritten und mit endlich vielen Zahlen in endlich vielen Ziffern abgehandelt werden müssen?

2.1 Differenzenquotient

Beginnen wir mit den Differenzenquotienten einer differenzierbaren Funktion f für zwei Stellen $x_0 \neq x_1$ im Definitionsbereich. Sie stellen im Sinne der Analysis für hinreichend kleine Schrittweiten $h := x_1 - x_0 \neq 0$ Näherungswerte für die Ableitungen dar, allerdings nur, falls alle Rechnungen beliebig genau ausführbar sind. Wir gehen zuerst auf die Hypothese der exakten Funktionsberechnungen ein und betrachten einige Folgerungen.

In der Folge wird x_0 oft festgehalten und $h \neq 0$ in der Nähe von 0 variiert, wobei das Verhalten des Differenzenquotienten interessiert. Wir benutzen daher eine spezielle Notation für den Differenzenquotienten, die alle relevanten Größen sichtbar macht

$$DQ(f, x_0, h) := \frac{1}{h} \cdot (f(x_0 + h) - f(x_0))$$

2.2 Diskretisierungsfehler des Differenzenquotienten bei exakter Funktionsauswertung

Die Taylorentwicklung

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h \cdot f'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 \cdot f''(x_1) \quad \text{mit } x_1 \in [x_0, x_0 + h]$$

ergibt eine Abschätzung

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}(f(x_0 + h) - f(x_0)) - \frac{h}{2}f''(x_1) \quad \text{mit } x_1 \in [x_0, x_0 + h]$$

Daraus ergibt sich eine Fehlerabschätzung für den Differenzenquotienten als Näherung für die Ableitung $|DQ(f, x_0, h) - f'(x_0)| = |f''(x_1) \cdot h/2| = \mathcal{O}(h)$.

Bei Berechnung mit Gleitkommaarithmetik und begrenzter Mantissenlänge kann sich im Differenzenquotienten Stellenauslöschung einstellen, wenn h zu nahe an 0 gerückt wird. Daher ist die analytische Fehlerabschätzung nur begrenzt tauglich.

3 Numerische Ableitungen höherer Güte

Die wesentliche Frage lautet: Gibt es einen Übergang von den Differenzenquotienten zu den Ableitungen, ohne Grenzwertberechnungen explizit zu benutzen? Wir betrachten zwei Möglichkeiten und nehmen zunächst an, dass alle Funktionsauswertungen exakt möglich sind:

1. *Extrapolation* der Differenzenquotienten $DQ(f, x_0, h_1)$ und $DQ(f, x_0, h_2)$ mit Schrittweiten $h_1 > h_2 > 0$ auf $h = 0$, eine Idee von Richardson.
2. *Gewichtete Mittelung* von mehreren Differenzenquotienten.

3.1 Richardsonextrapolation

Richardsonextrapolation versucht, die Limesberechnung durch Polynomextrapolation zu umgehen.

Wegen $|DQ(f, x_0, h) - f'(x_0)| = \mathcal{O}(h)$ ist es plausibel – aber keineswegs zwingend – anzunehmen, dass es eine Konstante A gibt, für die $DQ(f, x_0, h) - f'(x_0) = A \cdot h$ gilt, wenn h klein genug ist. Mit der Modellvorstellung $DQ(f, x_0, h) = f'(x_0) + A \cdot h$ genügen zwei Werte des Differenzenquotienten, um $f'(x_0)$ und A gemäss den Annahmen zu bestimmen.

Angenommen, wir wählen $DQ(f, x_0, h)$ und $DQ(f, x_0, x_0 + h/2)$, so ergibt die Richardsonextrapolation die Näherung

$$f'(x_0) \approx 2 \cdot DQ(f, x_0, x_0 + h/2) - DQ(f, x_0, h) = \frac{1}{h} \cdot (4 \cdot f(x_0 + h/2) - f(x_0 + h) - 3 \cdot f(x_0))$$

Die Richardsonextrapolation ist exakt auf allen Polynomen vom Grade kleiner als 3 und sie ergibt bei $f: x \mapsto x^3$ die Antwort $f'(x) \approx 3x^2 - h^2/2$ als Näherungswert für die Ableitung an der Stelle x . Mit der Taylorformel lässt sich nun allgemein zeigen, dass das Verfahren bei Funktionen, die mindestens dreimal stetig differenzierbar sind, einen Fehler zweiter Ordnung beinhaltet.

Es ist auch klar, dass sich das Verfahren iterieren lässt, um die Fehler der Grössenordnung $\mathcal{O}(h^2)$ und weiterer Ordnungen durch solche von noch höherer Ordnung zu ersetzen. Dabei werden aber zusätzliche Funktionswerte von f benötigt.

3.2 Symmetrische Differenzenquotienten

Die Differenzenquotienten $\frac{1}{h}(f(x_0 + h) - f(x_0))$ und $\frac{1}{h} \cdot (f(x_0) - f(x_0 - h))$ sind für kleine $h > 0$ beide Näherungen für $f'(x_0)$. Beide Näherungen sind oft suboptimal, denn bei einem einseitig gekrümmten Abschnitt des Funktionsgraphen ist die Differenz zwischen der Sekantensteigung (Differenzenquotient) und der Tangentensteigung $f'(x)$ an den Endpunkten der Sekante extremal.

In der Abbildung 2 ist der rechte Differenzenquotient grösser als die Tangentensteigung in $x_0 = 0$ und diese ist grösser als der linke Differenzenquotient. Daher ist es sinnvoll, den Fehler durch Mittelung zu verkleinern. Am einfachsten ist es, das arithmetische Mittel der beiden Differenzenquotienten zu verwenden:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{h}(f(x_0 + h) - f(x_0)) + \frac{1}{h} \cdot (f(x_0) - f(x_0 - h)) \right) = \frac{1}{2h}(f(x_0 + h) - f(x_0 - h))$$

Das ist die Sekantensteigung zwischen $x_0 - h$ und $x_0 + h$.

Wir verwenden die Notation $sDQ(f, x, h)$ für den *symmetrischen Differenzenquotienten* von f an der Stelle x_0 und mit der Schrittweite h . Für die Numerik ist es vorteilhaft, dass die Schrittweite gegenüber dem einfachen Differenzenquotienten von h auf $2h$ verdoppelt wurde. Der Testfall $sDQ(x^2, x_0, h) = 2x_0$ zeigt, dass ein Verfahren mindestens zweiter Ordnung vorliegt. Da die Operation linear ist, berechnet sie für alle Polynome der Ordnung kleiner als 3 die Ableitung exakt.

Das Beispiel $sDQ(x \mapsto x^3, x_0, h) = 3x_0^2 + h^2$ gibt den Hinweis, dass allgemein ein Fehler der Grössenordnung $\mathcal{O}(h^2)$ zu erwarten ist.

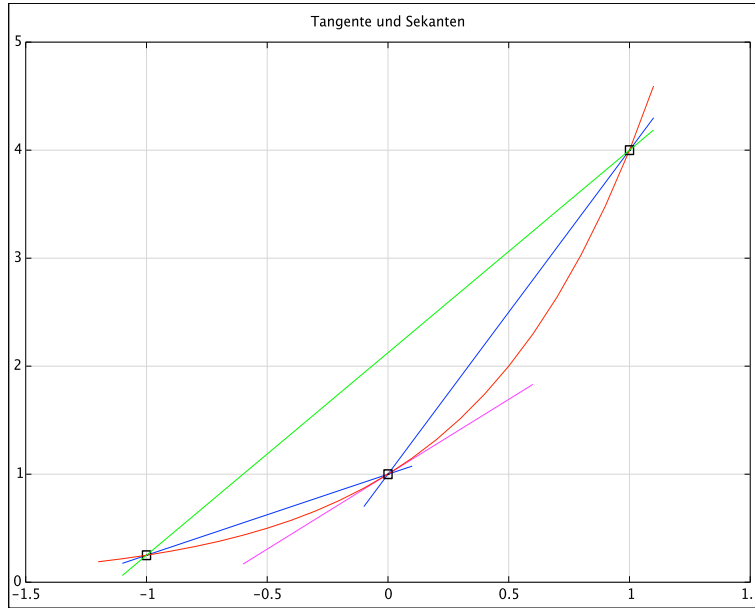


Abbildung 2: Drei Differenzenquotienten (Sekantensteigungen) und Tangentensteigung.

3.3 Angenäherte Funktionsauswertung, optimierte Schrittweite

Im nächsten Schritt wird die Hypothese der exakten Funktionsauswertung aufgegeben. Dann ergibt sich ein interessantes Optimierungsproblem. Wie muss die Diskretisierung gewählt werden, damit die Ableitung trotz Handicap möglichst gut erfasst werden kann.

Die Auswertung von Funktionen lässt sich mit endlich vielen Operationen und mit den Rechnerzahlen \mathbb{R}_M nur ausnahmsweise exakt ausführen. Wir nehmen jetzt an, dass Funktionsauswertungen nur angenähert verfügbar sind. Statt $f(x_0)$ wird $\tilde{f}(\tilde{x}_0)$ berechnet. Der zu erwartende absolute Fehler ist dann $\varepsilon(x_0) := |\tilde{f}(\tilde{x}_0) - f(x_0)|$. Wir vereinfachen die Diskussion mit der Annahme, dass in jeder Funktionsberechnung ein mittlerer Fehler der Grösse $\pm\varepsilon$ zu erwarten ist und dass Fehler stochastisch unabhängig auftreten. Damit lässt sich für die Verteilung der Fehler in einer Linearkombination von Funktionswerten ein Bernoullimodell adaptieren. Die mittleren Fehler entsprechen den Streuungen. Beim Differenzenquotienten oder dem symmetrischen Differenzenquotienten treten zwei Funktionsauswertungen auf, wir erwarten insgesamt einen mittleren Fehler infolge der angenäherten Funktionsauswertungen der Grösse $\varepsilon \frac{\sqrt{2}}{h}$ beim Differenzenquotienten und $\varepsilon \frac{\sqrt{2}}{2h}$ beim symmetrischen Differenzenquotienten. Bei der Richardsonextrapolation einen der Grösse $\frac{\sqrt{26}}{h} \cdot \varepsilon$ und allgemein bei Summen mit r ungewichteten Summanden etwa $\frac{\sqrt{r}}{h} \cdot \varepsilon$.

In numerischen Experimenten mit numerischen Ableitungen mit einem Diskretisierungsschritt der Grösse h lässt sich beobachten, wie die Diskretisierungsfehler der Methode zuerst beim Verkleinern von h abnehmen. Ab einer gewissen Schwelle machen sich andere Fehlerquellen bemerkbar: Beispielsweise steht Stellenauslöschung unter Generalverdacht, aber auch die begrenzte Genauigkeit der Funktionsberechnung wird sich auswirken. Lässt sich ein optimales h berechnen oder mindestens schätzen?

Wir betrachten den Differenzenquotienten, der mit einer Rechnerzahl h gebildet wird $\frac{1}{h}(f(x_0 + h) - f(x_0)) = f'(x_0) + \mathcal{O}(h)$ und einen mit angenäherten Funktionswerten berech-

Tabelle 1: Fehler des Differenzenquotienten und des symmetrischen Differenzenquotienten gegenüber dem exakten Wert der Ableitung abhängig von der Schrittweite h bei der Funktion $x \mapsto 10^x$ an der Stelle $x_0 = -2$

h	DQ- $f'(-2)$	sDQ- $f'(-2)$
10^{-1}	$2.88 \cdot 10^{-3}$	$2.04 \cdot 10^{-4}$
10^{-2}	$2.67 \cdot 10^{-4}$	$2.04 \cdot 10^{-6}$
10^{-3}	$2.65 \cdot 10^{-5}$	$2.04 \cdot 10^{-8}$
10^{-4}	$2.65 \cdot 10^{-6}$	$2.04 \cdot 10^{-10}$
10^{-5}	$2.65 \cdot 10^{-7}$	$-9.9 \cdot 10^{-12}$
10^{-6}	$2.61 \cdot 10^{-8}$	$-2.3 \cdot 10^{-10}$
10^{-7}	$-9.3 \cdot 10^{-10}$	$-1.9 \cdot 10^{-9}$
10^{-8}	$4.9 \cdot 10^{-8}$	$2.4 \cdot 10^{-8}$
10^{-9}	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$9.9 \cdot 10^{-8}$
10^{-10}	$4.1 \cdot 10^{-6}$	$2.1 \cdot 10^{-6}$
10^{-11}	$-2.6 \cdot 10^{-5}$	$-1.1 \cdot 10^{-5}$
10^{-12}	$-2.6 \cdot 10^{-5}$	$-2.6 \cdot 10^{-5}$

neten Differenzenquotienten

$$\left| \frac{1}{h}(\tilde{f}(\tilde{x} + h) - \tilde{f}(\tilde{x})) \right| \leq \left| \frac{1}{h}(f(x + h) - f(x) + \sqrt{2}\varepsilon) \right| + \mathcal{O}(h)$$

Für den Fehler $E(h)$ gilt $E(h) := |f'(x_0) - DQ(\tilde{f})(\tilde{x}_0, h)| \leq \left| \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{h} + \mathcal{O}(h) \right|$.

Für welches h wird $E(h)$ minimal? Für eine Abschätzung ersetzen wir $E(h)$ durch eine Näherung

$$\tilde{e}(h) := \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{h} + C \cdot h \quad \text{mit } h > 0, C > 0, \varepsilon > 0$$

An dieser Stelle haben wir eine Zusatzannahme eingeschmuggelt: Allgemein heisst $\eta(h) = \mathcal{O}(h)$, dass es eine Konstante C gibt, für die gilt $|\eta(h)| \leq C \cdot h$. Wir haben aber eine Proportionalität $\tilde{e}(h) \sim h$ postuliert.

Die Funktion \tilde{e} hat ein Minimum bei $h = \sqrt{\sqrt{2}\varepsilon/C}$. Für den zu erwartenden Fehler gegenüber dem wahren Wert der Ableitung gilt dann als *Faustregel* die Grössenordnung $\tilde{e}(h) = \mathcal{O}(h) = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$. Die Konstante C ist in der Regel nicht exakt bekannt. Sie liesse sich aufgrund der Taylorformel anhand der Funktionswerte der zweiten Ableitung $f''(x)$ mit $x \in [x_0, x_0 + h]$ oder gröber aufgrund einiger Differenzenquotienten schätzen. Die Taylorformel ist in diesem Zusammenhang wenig nützlich. Wie sollte f'' abgeschätzt werden, wenn f' sich offensichtlich nicht formal exakt berechnen lässt? Wir werden weiter unten ein pragmatisches und praktikables Vorgehen skizzieren, um die Genauigkeit zu kontrollieren.

Der Sinn der bisherigen Überlegungen besteht eher darin, die zu erwartende Genauigkeit der Verfahren vorgängig qualitativ abzuschätzen. Es zeigt sich, dass der symmetrische Differenzenquotient bei einem Rechenaufwand, der etwa gleich gross ist wie beim gewöhnlichen Differenzenquotienten, diesem überlegen ist. Das Optimum wird schon bei einer grösseren Schrittweite erreicht und das Ergebnis ist besser als jenes des einfachen Differenzenquotienten.

Eine analoge Rechnung für den symmetrischen Differenzenquotienten oder die Richardsonextrapolation mit 3 Funktionsauswertungen ergibt als Faustregel für eine geeignete Schrittweite $h \approx \mathcal{O}(\varepsilon^{1/3})$ und den zu erwartenden Approximationsfehler $\mathcal{O}(\varepsilon^{2/3})$.

Diese Faustregeln lassen sich im Rechnerexperiment von Tabelle 1 nachprüfen. Auf einem CAS-Rechner, der Funktionen im Fließkommamodus auf etwa 14 bis maximal 16 Dezimalen genau annähert, wurde für die Funktion $f : x \mapsto 10^x$ die beste Annäherung an den exakten Wert $f'(-2)$ gesucht, wobei die Schrittweite h variiert wurde anhand einer Liste von typischen Werten $h_r := 10^{-r}$.

Der gewöhnliche Differenzenquotient erreichte die besten Ergebnisse für $h \approx 10^{-7}$ mit einem Approximationsfehler von rund 10^{-9} . Der symmetrische Differenzenquotient erreicht das Fehlerminimum von 10^{-10} bis 10^{-11} bei h in der Größenordnung von 10^{-4} bis 10^{-6} . Was sagt die Faustregel? Bei $10^{-15} < \varepsilon < 10^{-14}$ ist $10^{-7} > \sqrt{\varepsilon}$ verträglich mit dem Ergebnis beim Differenzenquotienten und $10^5 < \sqrt[3]{\varepsilon}$ mit der Regel für den symmetrischen Differenzenquotienten. Die beobachtete maximale Genauigkeit ist in beiden Fällen sogar etwas besser, als die Faustregel voraussagt.

4 Ableitung und Regression

Wer aus einer Liste von Messdaten die momentanen Veränderungen bestimmen möchte, ist genau mit dem angesprochenen Problem konfrontiert. Die Messdaten sind in der Regel mit Messfehlern und Unsicherheiten kontaminiert. Was ist zu beachten, wenn man sicherstellen will, dass bei der Datenauswertung nicht die Messfehler vergrößert in Erscheinung treten und den gesuchten Effekt überdecken? Das Ziel ist die Begründung von praktikablen Faustregeln, die zu möglichst guten Ergebnissen in numerischen Ersatzverfahren für Ableitungen führen sollen.

Die Abbildung 3 zeigt einen ziemlich verrauschten Datensatz. Er wurde mit einer Simulation erzeugt. In diesem Falle ist das ‘Signal’ bekannt, es wird durch den rot markierten Graphen dargestellt. Es ist klar, dass Differenzenquotienten mit einem kleinen Schritt $0 < \Delta x \ll 1$ mit den verrauschten Daten zu groben Fehlern führen können. Bei grossen $\Delta x \gg 1$ wird der Einfluss des Rauschens gedämpft, aber es kann zu Diskretisierungsfehlern bei der Ableitung der Signalfunktion kommen.

Interessiert bloss eine mittlere Veränderungsrate über einen grossen Bereich, so kann ein Differenzenquotient, der diesen Bereich überspannt, die Antwort sein.

Wenn es eine Modellvorstellung gibt, welcher Funktionstyp zu erwarten ist, so kann Regression das Rauschen herausfiltern und eine Näherung des Signals rekonstruieren. So ist bei gewissen Versuchen ‘klar’, dass beispielsweise ein lineares Signal zu erwarten ist, in anderen Fällen kann eine Exponentialfunktion mindestens eine plausible Näherung darstellen.

Regression ist dann gut, wenn das Rauschen eine Summe von vielen kleinen Rauschanteilen ist, die sich unabhängig und zufällig überlagern. Dieses Verhalten des Rauschens gilt oft als Grundannahme bei sorgfältigen Messungen, denen man keine systematischen Fehler mehr unterstellt.

Abbildung 4 zeigt die Exponentialfunktion (rot) ohne das Rauschen. Die Regression einer Abtastung der verrauschten Daten mit einem quadratischen Polynom ist schwarz markiert. Entsprechend mit einem kubischen Polynom blau. In der Mitte des Intervalles ist die Übereinstimmung zwischen den quadratischen und kubischen Regressionsfunktionen und dem Original erstaunlich gut. Dennoch ist es wichtig, auch Abbildung 5 zu beachten und zu bemerken, dass

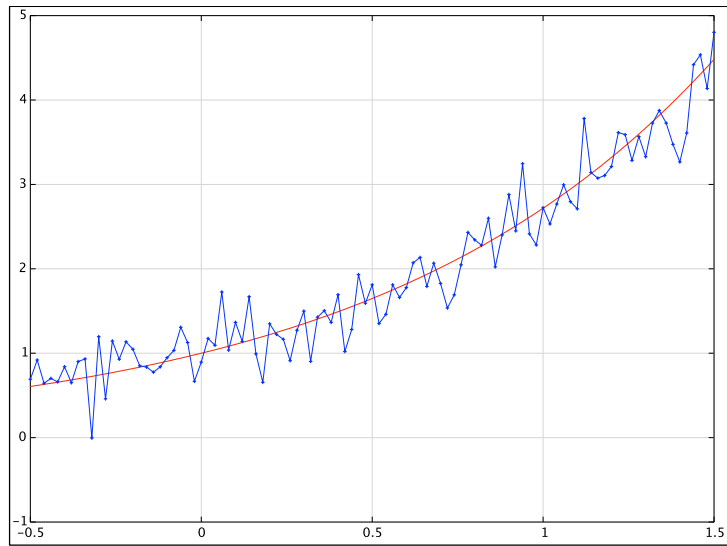


Abbildung 3: Ein verrauschtes Signal

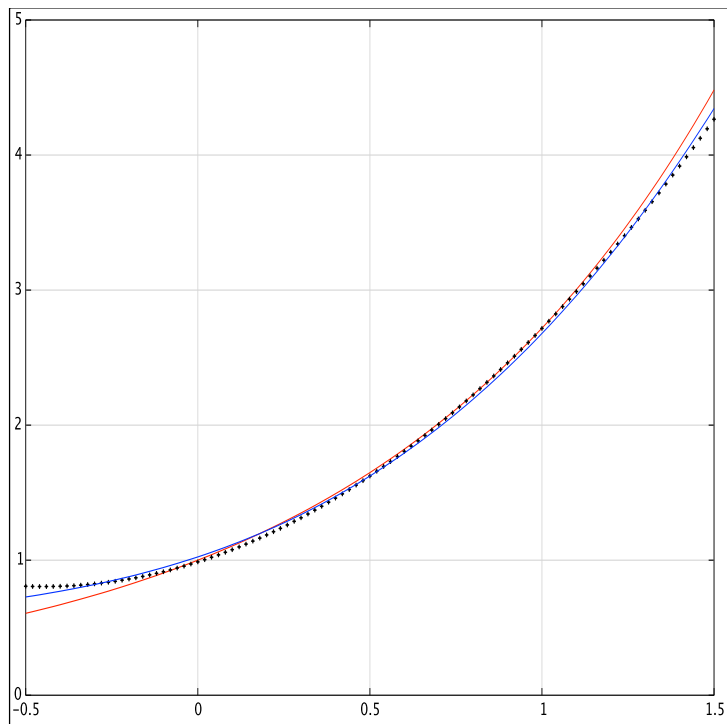


Abbildung 4: Regression glättet die verrauschten Daten im Bereich $0 \leq x \leq 1$ gut

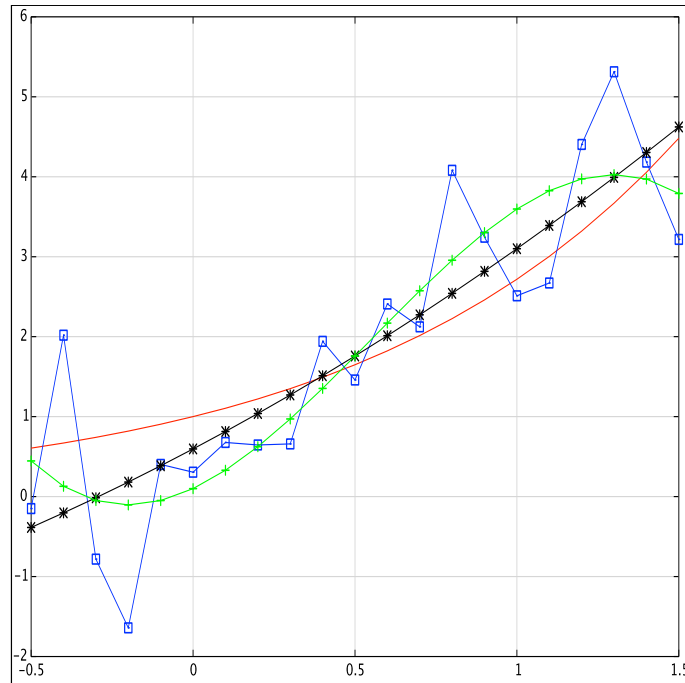


Abbildung 5: Wenige Daten mit grosser Streuung, untaugliche Regressionen

- die Antwort durch die Wahl der Regression subjektiv beeinflussbar und nicht eindeutig bestimmt ist.
- sich in günstigen Fällen (viele Daten, kleine Streuung) eine gute Übereinstimmung einstellt zwischen verschiedenen plausiblen Regressionsmodellen.
- Statistische Kenntnisse die Wahl einer Regressionsmethode erleichtern oder begründen können.

Regressionsfunktionen sind in der Regel von einfacher Bauart, sie sind auch formal differenzierbar. Die Ableitung jeder der Regressionsfunktionen in Abb.4 approximiert im Intervall $[0, 1]$ die Ableitung des durch Rauschen maskierten Signals. Aber die Regression ist kein Mittel, um die Kontamination durch Rauschen sicher und eindeutig zu beseitigen. Im Beispiel von Abb.5 ist der Datensatz mager und die Streuung relativ gross. Die Streuung beeinflusst hier die Regressionsfunktionen deutlich. Die quadratische und die kubische Regression weichen von einander und vom Modell ab, die kubische noch mehr als die quadratische. Die Regressionsfunktion erkennt das Signal im Rauschen nicht. Hier versagt die Idee, Regression als Datenglättung vor dem Ableiten zu verwenden.

Es gibt keine statistische Methode, um aus mageren und schlechten Daten gute zu gewinnen. Die Qualität der Daten begrenzt die Güte der Antwort: garbage in – garbage out.

5 Aufgaben

1. Warum braucht es für die Berechnung der Ableitungen von Polynomfunktionen keine numerischen Verfahren?
2. Warum braucht es zum Ableiten von rationalen Funktionen keine numerischen Verfahren? Wie lassen sich rationale Funktionen mit Hilfe des Hornerschemas ableiten?
3. Warum werden numerische Ableitungsverfahren gerne an Polynomfunktionen getestet?
4. Wir definieren für beliebige q

$$\text{sDQ}_+(f, x_0, h, q) := q \cdot \text{sDQ}(f, x_0, h/2) + (1 - q) \cdot \text{sDQ}(f, x_0, h)$$

- (a) Warum ist diese Linearkombination von symmetrischen Differenzenquotienten für alle q exakt auf allen Funktionen, für die der symmetrische Differenzenquotient schon exakt ist?
 - (b) Für welches q ist $\text{sDQ}_+(f, x_0, h, q) = f'(x_0)$ für $f : x \mapsto x^3$ und alle x_0 ?
 - (c) Welche Ordnung hat das neue Verfahren sDQ_+ mit diesem Wert von q ?
5. Imitieren Sie die Berechnung der optimalen Schrittweite h für den verbesserten symmetrischen Differenzenquotienten mit einem hypothetischen mittleren Fehler bei der Funktionsauswertung von $\varepsilon \approx 10^{-15}$. Berechnen Sie analog zu Tabelle1 die Werte von $\text{sDQ}_+ - f'(-2)$ für $f : x \mapsto 10^x$. Stützen Ihre Ergebnisse die Voraussage der Faustregel?
 6. Ein einfaches Simulationsexperiment zum Thema Regression und Ableitung: Angenommen, es gibt gar kein Signal. Wir beobachten also die Konstante 0. Sie wird überlagert durch Zufallsrauschen.

Wir wählen 101 Datenpaare $\{(n \cdot 10^{-2}, \text{RandNorm}(0, 1)) \mid 0 \leq n \leq 100\}$ in denen der ‘Messwert’ 0 durch simulierte Zufallsdaten mit einer Standardnormalverteilung dargestellt werden. Warum und wie lässt sich mit linearer Regression der mittlere Fehler abschätzen, der bei diesem Datensatz auftritt, wenn Regression mit formaler Ableitung kombiniert wird?
 7. Tasten Sie die Sinusfunktion $\sin : x \mapsto \sin(x)$ an den Stellen $x_n := n \cdot 0.1$ [rad] ab, $0 \leq n \leq 30$.
 - (a) Multiplizieren Sie die erste Differenzenfolge mit 10 und vergleichen Sie mit einer entsprechenden Abtastung der Kosinusfunktion. Warum sollte man die zweite Differenzenfolge mit 100 multiplizieren, wenn man sie mit einer Abtastung der Funktion $\sin'' = -\sin$ vergleichen möchte? Was zeigen die Ergebnisse?
 - (b) Was zeigt das analoge Experiment mit symmetrischen Differenzenquotienten, berechnet für x_k mit den Funktionswerten an den Stellen x_{k+1}, x_{k-1} ?
 - (c) Was zeigt sich, wenn die Abtastung der Sinusfunktion vor der Bearbeitung auf 3 Dezimalen gerundet wird?

14.2	13.6	13.1	12.4	11.9	11.35	10.85	10.35	9.9	9.4	8.9	8.4	8.0
7.5	7.15	6.7	6.3	5.95	5.6	5.3	4.9	4.6	4.25	4.0	3.7	3.4
3.15	2.9	2.7	2.45	2.3	2.05	1.8	1.65	1.5	1.35	1.3	1.15	-

Tabelle 2: Torricellis Versuch: Höhe einer Wassersäule in cm gemessen in Intervallen zu 10 Sekunden

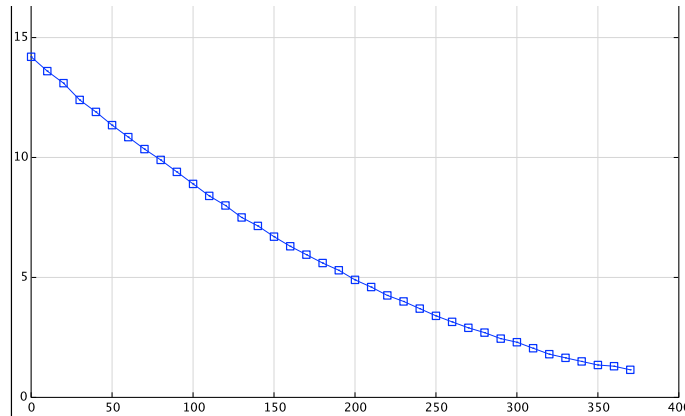


Abbildung 6: Streudiagramm der Rohdaten zum Torricelliversuch

8. Ein Experiment nach Torricelli: (Daten vgl. Tabelle 2)

Ein Glaszylinder ist mit Wasser gefüllt. Durch eine kleine Öffnung nahe beim Boden kann es ausfließen. Auf dem Mantel des Zylinders wurde ein Massstab angebracht, auf dem man die Höhe der Wassersäule über der Öffnung jederzeit ablesen kann. In einem Experiment wurden der Pegelstand h alle 10 Sekunden abgelesen und notiert.

- Wie gross ist die mittlere Geschwindigkeit der Wasseroberfläche beim Absinken?
- Wie gross ist die mittlere Beschleunigung der Wasseroberfläche beim Absinken?
- Erzeugen Sie aus den Daten mit verschiedenen numerischen Ableitungsmethoden Näherungswerte für die ‘momentane’ Geschwindigkeit und die ‘momentane’ Beschleunigung. In welchem Falle ist die Richardsonextrapolation nützlich? Wann ist der symmetrische Differenzenquotient und wann der verbesserte symmetrische Differenzenquotient anwendbar?
- Mit statistischen Kennzahlen der Datensätze lassen sich objektive Unterschiede zwischen den Ergebnissen der numerisch abgeleiteten Daten bei gleichen Grunddaten erkennen. Aus jedem Datensatz lassen sich Mittelwert, Median, Standardabweichung, ganze Streuung und Quartile ermitteln. [Einvariablen-Statistik]. Erstellen Sie je einen Boxplot für die Geschwindigkeitswerte und die Beschleunigungen, bestimmen Sie Mittelwert und Standardabweichungen der beiden abgeleiteten Datenreihen mit jeder der von Ihnen gewählten numerischen Ableitungen.
- Stellen Sie die Folgen der angenäherten momentanen Geschwindigkeiten und Beschleunigungen je in einem Streudiagramm dar. Vergleichen Sie gewöhnliche Differenzenquotienten mit den Folgen der symmetrischen Differenzenquotienten bei doppelter Schrittweite.
- Welche Effekte zeigt dieser Datensatz mit hoher Wahrscheinlichkeit? Welche Eigenschaft des Differenzenquotienten und des Datensatzes kommen hier zum Ausdruck?

9. (Diese Aufgabe benutzt die Daten von Tabelle 2 und Regressionsprogramme zur Konstruktion von Funktionen aus Datenlisten)

In einem ersten Schritt wird mit Regression der Messdaten ein statistisches Modell der Funktion $h : t \mapsto h(t)$ für den Pegelstand als Funktion der Zeit gefunden. Für die Wahl der Funktion h gibt es erhebliche Freiheiten. Es ist sinnvoll, den einfachsten plausiblen Ansatz zu verwenden. Sicher ist die Funktion nicht linear, sonst wäre die Absenkrate in etwa konstant.

- (a) Welche quadratische Funktion h passt im Sinne der Methode der kleinsten Quadrate am besten zu den Daten? (quadratische Regressionsfunktion)
- (b) Vergleichen Sie die Werte der analytischen Ableitung $\frac{dh}{dt}$ zu den Abtastzeiten mit den in Aufgabe 8 gefundenen numerischen Ableitungen aufgrund der Tabelle 2
- (c) Benutzen Sie lineare Regression auf den Daten der numerischen Ableitungen von Aufgabe 8 und vergleichen Sie mit der Ableitung $h'(t)$.
- (d) Die zweite Ableitung der Regressionsfunktion $h'' : t \mapsto h''(t)$ ist eine Konstante. Wie gut passt diese Aussage zu den zweifachen numerischen Ableitungen der Daten aus Aufgabe 8?

6 Ausgewählte Lösungen

1. Polynomfunktionen lassen sich mit den Regeln des Calculus formal exakt ableiten und in endlich vielen Schritten auswerten.
Das HornerSchema liefert einen Algorithmus, um Ableitungen von Polynomen numerisch auszuwerten.
2. Quotientenregel und Ergebnisse von Aufgabe 1.
3. Es gibt mindestens drei Gründe:

- (a) Polynome sind in endlich vielen Schritten exakt auswertbar und sie lassen sich formal exakt ableiten. Die Ableitung eines Polynoms ist auch ein Polynom.
 - (b) Die formale Ableitung und die numerischen Ableitungen sind linear. Daher reicht es, die numerischen Verfahren auf den Testfunktionen $p_r : x \mapsto x^r$ mit $r \in \mathbb{N}$ zu prüfen.
 - (c) Polynome als Testfunktionen sind auch sinnvoll, weil Polynome in der Taylorentwicklung bei allgemeineren Funktionen lokale Approximationen und Fehlerabschätzungen liefern können.
4. (a) konvexe Linearkombination von exakten Teilergebnissen:

$$q \cdot f'(x_0) + (1 - q) \cdot f'(x_0) = f'(x_0)$$
 - (b) Aus $\text{sDQ}(x^3, x_0, h) = 3x_0^2 + h^2$ und $\text{sDQ}(x^3, x_0, h/2) = 3x_0^2 + h^2/4$ folgt

$$-\frac{1}{3}\text{sDQ}(x^3, x_0, h) + \frac{4}{3}\text{sDQ}(x^3, x_0, h/2) = 3x_0^2 \quad \text{für alle } x_0$$

- (c) $\text{sDQ}_+(x^4, x_0, h) = 4x_0^3$ für alle x_0
 $\text{sDQ}_+(x^5, x_0, h) = 5x_0^4 - h^4/4$ für alle x_0 .
 Das Verfahren hat Ordnung $\mathcal{O}(h^4)$ und ist auf allen Polynomen vom Grad kleiner als 5 exakt.
5. Ist ε der typische Fehler, so ist $h \approx \varepsilon^{1/5}$ die Grössenordnung der optimalen Schrittweite. Mit $\varepsilon \approx 10^{-15}$ folgt $h \approx 10^{-3}$ und eine Differenz zum exakten Funktionswert der Ableitung von $\mathcal{O}(h^4) \approx 10^{-12}$.
 Diese Schätzung wird durch die Tabelle mit den Ergebnissen der Testfunktion $x \mapsto 10^x$ für $x_0 = -2$ gestützt. (minimaler Fehler etwa $2.4 \cdot 10^{-13}$ bei $h = 10^{-3}$)
 6. Es bezeichne $s : t \mapsto s(t)$ ein angenommenes Signal und $s_N : t \mapsto s_N(t) := s(t) + N(t)$ das gemessene verrauschte Signal. Dabei ist $N(t) := s_N(t) - s(t)$ das Rauschen alleine. Wegen der Annahme $s : t \mapsto 0$ wird nur N beobachtet. In Experimenten werden nur Abtastungen beobachtet. Die endliche Abtastung prägt den gesammelten Daten eine gewisse unbeabsichtigte Information auf. Damit verfälscht das gemessene Rauschen das Signal fast immer.

Da Ableitungen, auch alle numerischen Ableitungen nD , linear sind, gilt insbesondere $\text{nD}(s_N) = \text{nD}(s) + \text{nD}(N)$. Der Einfluss des Rauschens und jener des Signals auf das Ergebnis der numerischen Ableitung kann also getrennt untersucht werden. Hier interessiert einzig der Einfluss des Rauschens N auf den Fehler in der Ableitung der Regressionsfunktion.

Da der Sollwert der Ableitung der Nullfunktion ebenfalls die Nullfunktion ist, erkennt man in der Antwort die zu erwartende Grössenordnung des Fehlers bei der numerischen Ableitung des mit Regression geglätteten Rauschens. Wegen $s = 0$ kann lineare Regression verwendet werden. Ihre Ableitung ist ein Indikator für den mittleren Fehler, den das Rauschen in der Schätzung der Ableitung verursacht.

Bei der allgemeinen Regressionsmethode addiert sich dazu noch ein (hoffentlich) kleinerer Fehler, der von der Wahl der Regressionsmethode, also von unserer Ungewissheit über das vom Lärm maskierte Signal abhängt. In unserem Experiment gehen wir davon aus, dass das Signal absolut bekannt sei.

Das Ergebnis des speziellen Beispiels lässt sich verallgemeinern. Es ist allgemein skalierbar mit der Streuung (im Experiment $\sigma = 1$) und mit dem Kehrwert der Länge L des Messintervalles (im Experiment $L = 1$).

Allgemein ist zu erwarten, dass ein stetiges verrauschtes Signal im Sinne der Analysis nicht mehr differenzierbar sein muss. Die Abtastung 'glättet' das Signal durch Lückenbildung so weit aus, dass numerische Ableitungen möglich werden.