Numerische Differentiation

Differenzenformeln

Zur numerischen Berechung der Ableitung einer Funktion geht man auf die Definition der Ableitung über Differentialquotienten zurück:

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

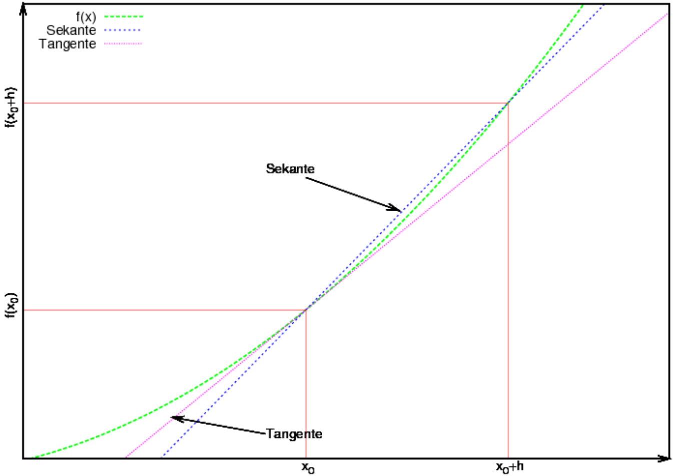
Die Ableitung an der Stelle $f(x_0)$ entspricht der Tangentensteigung.

Die Tangentensteigung entspricht der Sekantensteigerung durch die Punkte $(x_0, f(x_0))$ und $(x_0 + h, f(x_0 + h))$ gegeben durch

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{(x_0 + h) - x_0}$$

für den Grenzübergang $h \to 0$.

Darstellung der Vorgehensweise zur Bestimmung der numerischen Ableitung



Der Grenzübergang $h \to 0$ kann numerisch nicht durchgeführt werden (sonst Overflow).

Daher nähert man die Ableitung einer Funktion $f(x)$ im Punkt x_0 durch die Sekantensteigerung

$$D^+ f(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

mit $h > 0$ an. Dies ist die sogenannte rechtsseitige Differenzenformel basierend auf finiten (endlichen) Differenzen.

Analog lässt sich die linksseitige Differenzenformel herleiten:

$$D^- f(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

Bemerkung:

Analytisch berechnet man die Ableitung einer Funktion, numerisch den Wert der Ableitung in einem speziellen Punkt x_0.

Eigenschaften der einseitigen Differenzenformeln:

- für $h \to 0$, geht der Wert der Differenzenformel gegen den exakten Wert der Ableitung (bei Vernachlässigung von Rundungsfehlern)
- Polynome vom Grad Eins: $f(x) = mx + b$ werden exakt differenziert, da:

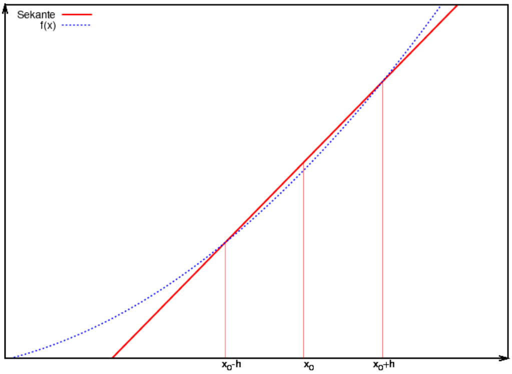
$$\begin{aligned} D^+ f(x) &= \frac{1}{h}\Big[f(x+h) - f(x)\Big] \\ &= \frac{1}{h}\Big[m(x+h) + b - (mx+b)\Big] \\ &= m = f'(x) \end{aligned}$$

Eine genauere Differenzenformel erhält man durch Mittelung der rechts- und linksseitige Differenzen:

$$Df(x_0) = \frac{1}{2}\,\frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{h},$$

die sogenannte zentrale Differenzenformel.

Darstellung der zentralen Differenzenformel



Eigenschaft:

Die zentrale Differenzenformel nähert Polynome 2. Grades $f(x) = ax^2 + bx + c$ exakt an, da

$$
\begin{aligned}
Df(x) &= \frac{1}{2h}\Big\{a(x+h)^2 + b(x+h) + c - a(x-h)^2 - b(x-h) - c\Big\} \\
&= \frac{1}{2h}\Big\{a(x^2 + 2hx + h^2) + bx + bh \\
&\qquad -a(x^2 - 2hx + h^2) - bx + bh\Big\} \\
&= \frac{1}{2h}\Big\{4ahx + 2bh\Big\} \\
&= 2ax + b \\
&= f'(x)
\end{aligned}
$$

Beispiel

Gegeben ist die Funktion $f(x) = \sin x \ln x$ und die Stelle $x_0 = \frac{1}{2}$.

Mit der Produktregel ergibt sich für die Ableitung $f'(x) = \cos x \ln x + \frac{\sin x}{x}$. Daraus folgt $f'(\frac{1}{2}) = 0.3505571$ als exakter Wert der Ableitung an der Stelle x_0.

Fehlerbetrachtung der numerischen Differentiation für $D^{\pm}$ und D und für verschieden Schrittwerten h:

h	Fehler für $D^{\pm}$	Fehler für D
$h = 10^{-1}$	$8.8 \cdot 10^{-2}$	$8.6 \cdot 10^{-3}$
$h = 10^{-2}$	$9.5 \cdot 10^{-3}$	$8.5 \cdot 10^{-5}$
$h = 10^{-3}$	$9.5 \cdot 10^{-4}$	$8.5 \cdot 10^{-7}$
$h = 10^{-4}$	$9.6 \cdot 10^{-5}$	$8.5 \cdot 10^{-9}$
	$\sim h$	$\sim h^2$

$\Rightarrow$ Fehlerverhalten der beiden Differenzenverfahren:

- beim einseitigen Verfahren $D^{\pm}$ ist der Fehler proportional zu h
- beim zentralen Verfahren D ist der Fehler proportional zu h^2

$\Rightarrow$ Ordnung des Verfahrens:

- $D^{\pm}$ ist von 1. Ordnung
- D ist von 2. Ordnung

Die Herleitung der Fehlerordnung erfolgt formal über einen Taylorreihenansatz.

Sei $f(x)$ eine 4 mal differenzierbare Funktion.

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \\ &\quad \frac{f'''(x_0)}{3!}(x-x_0)^3 + R(x) \end{aligned}$$

Einsetzen zentraler Differenzen ergibt:

$$\begin{aligned} f(x_0+h) &= f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 + \\ &\quad \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + R(h) \\ f(x_0-h) &= f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 - \\ &\quad \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + R(-h) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow f(x_0+h) - f(x_0-h) = 2hf'(x_0) + \frac{f'''(x_0)}{3}h^3 + (R(h) - R(-h))$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}}_{\text{zentraler Differenzen}} = \underbrace{f'(x_0) + O(h^2)}_{\text{1.Ableitung+Term}_{\sim h^2}}$$

d.h. bis auf den Term $O(h^2)$ stimmen die zentralen Differenzen und die exakte Ableitung überein.

Definition 18

Der Exponent n in dem Ausdruck $O(h^n)$ heißt Ordnung des Verfahrens.

Bemerkung:

- Dies entspricht der Beobachtung aus dem Beispiel.
- Bei der Abschätzung der Ordnung sind Rundungsfehler vernachlässigt.

Beispiel (fortgesetzt)

h	Fehler für $D^{\pm}$	Fehler für D
$h = 10^{-5}$	$9.6 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$
$h = 10^{-6}$	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$3.0 \cdot 10^{-8}$
$h = 10^{-7}$	$2.9 \cdot 10^{-6}$	$7.1 \cdot 10^{-7}$
$h = 10^{-8}$	$7.5 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$

Wird h immer kleiner, so steigt der Fehler wieder an, d.h. obwohl der Verfahrensfehler (=Diskretisierungsfehler) gegen Null geht, steigt der

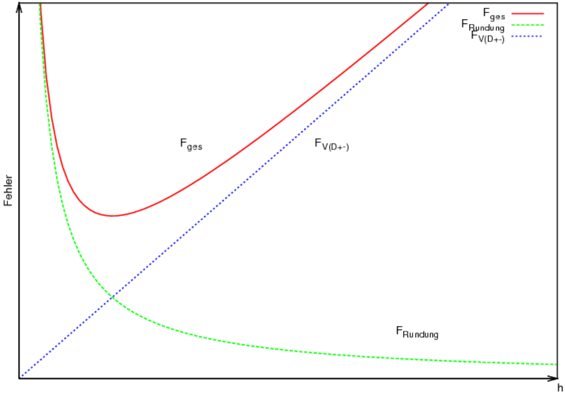
$$\text{Gesamtfehler} = \text{Verfahrensfehler} + \text{Rundungsfehler}$$

wieder an.

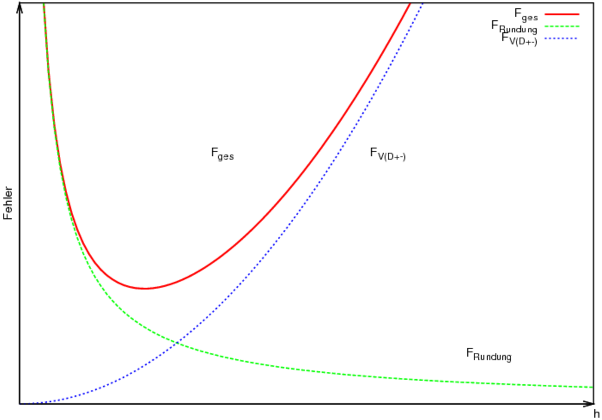
Der Verfahrensfehler entspricht dem Fehler aufgrund der Näherung durch die Differenzenformel für ein endlich kleines h, aber $h \nrightarrow 0$.

Der Rundungsfehler entspricht dem Fehler durch das numerische Rechnen mit Zahlen endlicher Genauigkeit.

Darstellung des Fehlerverhaltens für die einseitigen Differenzenverfahren:



Darstellung des Fehlerverhaltens für das zentrale Differenzenverfahren:



Der Diskretierungsfehler geht gegen Null für $h \to 0$ und der Rundungsfehler verhält sich $\sim \frac{1}{h}$ für $h \to 0$.

Differenzenformel für die 2. Ableitung

Herleitung der zentralen Differenzenformel:

$$D^2 f(x_0) = D(Df(x_0)) = D^-(D^+ f(x_0)) = D^+(D^- f(x_0))$$

Es wird beispielhaft der Ansatz über die einseitigen Differenzenformeln vorgestellt.

$$\begin{aligned} D^-(D^+ f(x_0)) &= D^-\left(\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}\right) \\ &= \frac{1}{h}\left\{D^- \underbrace{f(x_0+h)}_{f(y_0)} - D^- f(x_0)\right\} \\ &= \frac{1}{h}\left\{\frac{f(y_0)-f(y_0-h)}{h} - \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}\right\} \\ &= \frac{1}{h^2}\left\{f(x_0+h)-f(x_0)-f(x_0)+f(x_0-h)\right\} \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow \quad D^2 f(x_0) = \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}$$

Bemerkung:

- Der Diskretierungsfehler ergibt sich aus einem Taylorreihenansatz.
- Das Verfahren ist 2.Ordnung.
- Das Gesamtfehlerverfahren verhält sich wie bei der 1. Ableitung.

Beispiel

Finite Differenzen Formeln

$$\begin{aligned} f(x) &= 3x^2 - 5x & & x_0 = 1, h = 0.1 \\ f'(x) &= 6x - 5 & \Rightarrow \quad & f'(1) = 1 \\ f''(x) &= 6 & \Rightarrow \quad & f''(1) = 6 \end{aligned}$$

Beispiel (fortgesetzt)

$$
\begin{aligned}
D^+ f(x) &= \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} \\
&= \frac{3(x_0+h)^2 - 5(x_0+h) - 3x_0^2 + 5x_0}{h} \\
&= \frac{3(x_0^2 + 2x_0 h + h^2) - 5x_0 - 5h - 3x_0^2 + 5x_0}{h} \\
&= \frac{6x_0 h + 3h^2 - 5h}{h} = 6x_0 - 5 + 3h \\
&= 6 - 5 + 3 \cdot 0.1 = 1.3
\end{aligned}
$$

Beispiel (fortgesetzt)

$$\begin{aligned} Df(x) &= \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h} \\ &= \frac{3(x_0+h)^2-5(x_0+h)-3(x_0-h)^2+5(x_0-h)}{2h} \\ &= \frac{3(x_0^2+2x_0h+h^2)-5h-3x_0^2+6x_0h-3h^2-5h}{2h} \\ &= \frac{12x_0h-10h}{2h} = \frac{12x_0-10}{2} = 1.0 \end{aligned}$$

$$D(Df(x)) = \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2} =$$

$$\frac{3(x_0+h)^2-5(x_0+h)-2(3x_0^2-5x_0)+3(x_0-h)^2-5(x_0-h)}{h^2}$$

$$= \frac{6h^2}{h^2} = 6.0$$