

## Numerisches Differenzieren

### Theorie: Numerisches Differenzieren

Die numerische Approximation der Ableitung einer Funktion  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  an der Stelle  $x_0$  geht auf die Definition des Differenzenquotienten zurück:

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x_0} := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (1)$$

Der Grenzübergang von Sekanten- zu Tangentensteigung  $h \rightarrow 0$  kann aufgrund des damit einhergehenden Exponentenüberlaufs der Gleitkommaarithmetik\* (auch: overflow) im IEEE-754-Format† numerisch nicht durchgeführt werden. Deshalb wird die Ableitung der Funktion  $f$  im Punkt  $x_0$  über eine Sekantensteigung nach Gleichung 2 mit einem endlichen Wert für  $h$  approximiert.

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

$$D^- f(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} \quad (3)$$

Für  $h > 0$  ( $h < 0$ ) ergibt sich die Vorwärts- (Rückwärts-) Differenzenformel. Es lässt sich zeigen, dass lineare Polynome mit Gleichung 2 bzw. 3 exakt differenziert werden [3]. Mit Hilfe der Taylor-Entwicklung ergibt sich für den Diskretisierungsfehler ein proportionales Verhalten zur verwendeten Schrittweite  $h$  [1].

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\zeta) \quad (4)$$

Wie in Abbildung 1 illustriert, wird die Genauigkeit der Sekanten-Approximation für ein festes  $h$  direkt durch die etwaige nicht-Linearität der Funktion determiniert. Durch Bilden des arithmetischen Mittels von  $D^- f(x)$  und  $D^+ f(x)$  ergibt sich die Zentraldifferenz.

$$Df(x) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \quad (5)$$

\*Der Leser entnehme eine Einführung in die Gleitkommaarstellung aus [2].

†IEEE-754 wurde 1985 erstmalig als technischer Standard für binäre Gleitkommazahlen vom Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) festgelegt.

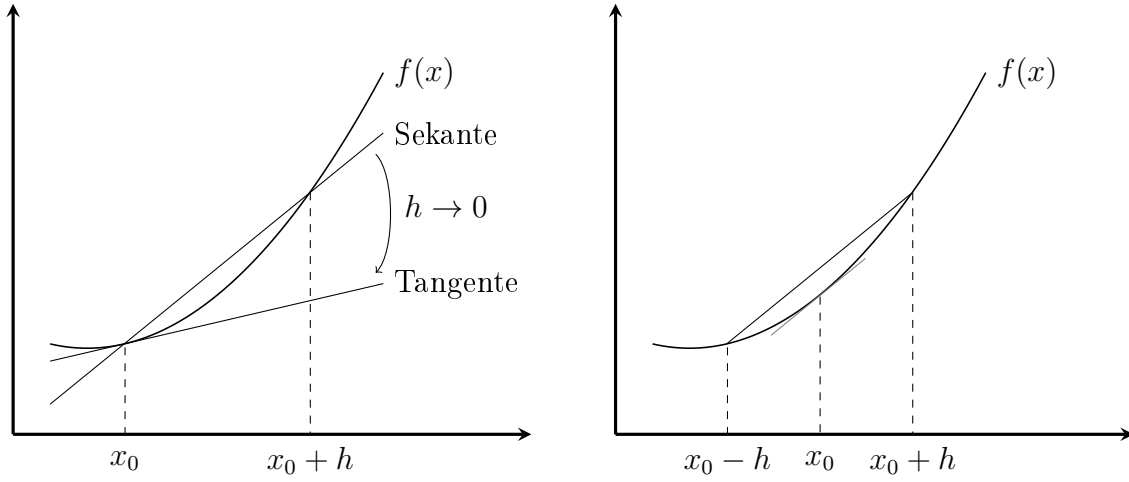


Abbildung 1: Links: Visualisierung des Grenzübergangs  $h \rightarrow 0$ , rechts: Exemplarische Darstellung der Zentraldifferenz.

Augenscheinlich werden mit Gleichung 5 Polynome bis zum Grad zwei exakt differenziert [3]. Der Diskretisierungsfehler skaliert quadratisch mit  $h$  [1].

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\zeta) \quad (6)$$

Dem Diskretisierungsfehler, welcher für  $h \rightarrow 0$  minimiert wird, wirken aufgrund von Rundungsfehlern Auslöschungseffekte, welche für  $h \rightarrow 0$  maximal werden, entgegen. Für eine mit Rundungsfehlern  $\epsilon$  behaftete Funktionsauswertung  $\tilde{f}(x)$  gilt  $|\tilde{f}(x) - f(x)| \leq \epsilon$ . Dabei ergeben sich folgende Abschätzungen für das Verhalten der Rundungsfehler für Vorwärtsdifferenzen:

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \\ \tilde{\delta} &= \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0)}{h} \\ |\delta - \tilde{\delta}| &= \frac{1}{h} \left[ \left( f(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0 + h) \right) - \left( f(x_0) - \tilde{f}(x_0) \right) \right] \leq \frac{2}{h} \epsilon \end{aligned} \quad (7)$$

und für Zentraldifferenzen:

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \\ \tilde{\Delta} &= \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0 - h)}{2h} \\ |\Delta - \tilde{\Delta}| &= \frac{1}{2h} \left[ \left( f(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0 + h) \right) - \left( f(x_0 - h) - \tilde{f}(x_0 - h) \right) \right] \\ &\leq \frac{1}{h} \epsilon \end{aligned} \quad (8)$$

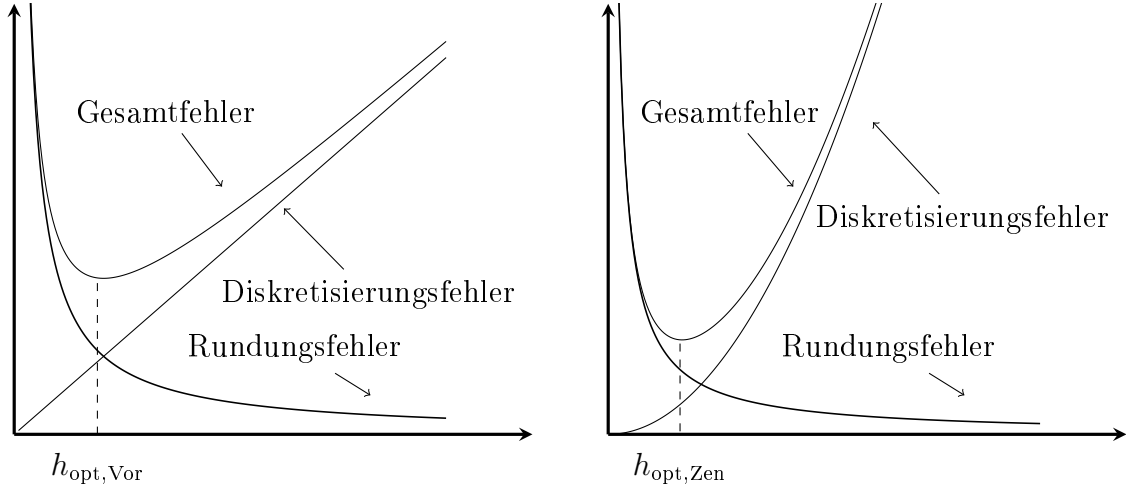


Abbildung 2: Visualisierung von Diskretisierungs-, Rundungs- und Gesamtfehler für Vorwärtsdifferenzen (links) und Zentralkifferenzen (rechts).

Damit ergibt sich für Vorwärtsdifferenzen ein Gesamtfehler nach Gleichung 9a mit einem Minimum nach Gleichung 9b.

$$F_{\text{Vor}}(h) \leq \frac{2}{h}\epsilon + c_1 \cdot h \quad (9a)$$

$$h_{\text{opt,Vor}} = \sqrt{\frac{2\epsilon}{c_1}} \quad (9b)$$

Für Zentralkifferenzen ergibt sich ein Gesamtfehler nach Gleichung 10a mit dem Minimum nach Gleichung 10b.

$$F_{\text{Zen}}(h) \leq \frac{1}{h}\epsilon + c_2 \cdot h^2 \quad (10a)$$

$$h_{\text{opt,Zen}} = \sqrt[3]{\frac{\epsilon}{2c_2}} \quad (10b)$$

Dabei sind  $c_1, c_2$  in der Praxis nicht ohne Weiteres bestimmbar und skalieren bei Vorwärtsdifferenzen mit der zweiten Ableitung (bei Zentralkifferenzen mit der dritten Ableitung) an der Stelle  $x_0$ . Der Einfluss der Konstanten auf  $h_{\text{opt}}$  wird jeweils mit der zweiten und dritten Wurzel abgeschwächt. Für eine erste Abschätzung der optimalen Schrittweite sei  $c_1 \approx c_2 \approx 10^0$  gewählt. Bei einer vorliegenden Maschinengenauigkeit von  $\epsilon \approx 10^{-16}$  ergeben sich dann für die optimalen Schrittweiten  $h_{\text{opt,Vor}} \approx 10^{-8}$  und  $h_{\text{opt,Zen}} \approx 10^{-6}$ .

## Literatur

- [1] W. Dahmen und A. Reusken. *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Springer-Lehrbuch. Springer Berlin Heidelberg, 2008. ISBN: 9783540764939. URL: <https://books.google.de/books?id=d8MfBAAQBAJ>.
- [2] Thomas Richter und Thomas Wick. “Einleitung”. In: *Einführung in die Numerische Mathematik: Begriffe, Konzepte und zahlreiche Anwendungsbeispiele*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2017, S. 1–32. ISBN: 978-3-662-54178-4. DOI: [10.1007/978-3-662-54178-4\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-662-54178-4_1). URL: [https://doi.org/10.1007/978-3-662-54178-4\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-662-54178-4_1).
- [3] T. Westermann. *Mathematik für Ingenieure: Ein anwendungsorientiertes Lehrbuch*. Springer-Lehrbuch. Springer Berlin Heidelberg, 2011. ISBN: 9783642127601. URL: <https://books.google.de/books?id=3bYoBAAQBAJ>.