Übungsblatt 03

Diese Übungsaufgaben sind zum Einen dafür gedacht, den eigenen, aktuellen Matlab-Kenntnisstand zu überprüfen. Zum Anderen, sollen ausgewählte Operationen zur Lösung der Aufgaben selbstständig recherchiert und angewendet werden.

Theorie: Numerisches Differenzieren

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

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

Der Grenzübergang von Sekanten- zu Tangentensteigung $h \to 0$ kann aufgrund des damit einhergehenden Exponentenüberlaufs der Gleitkommaarithmetik* (auch: overfolw) 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.

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

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

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].

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

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.

---

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

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

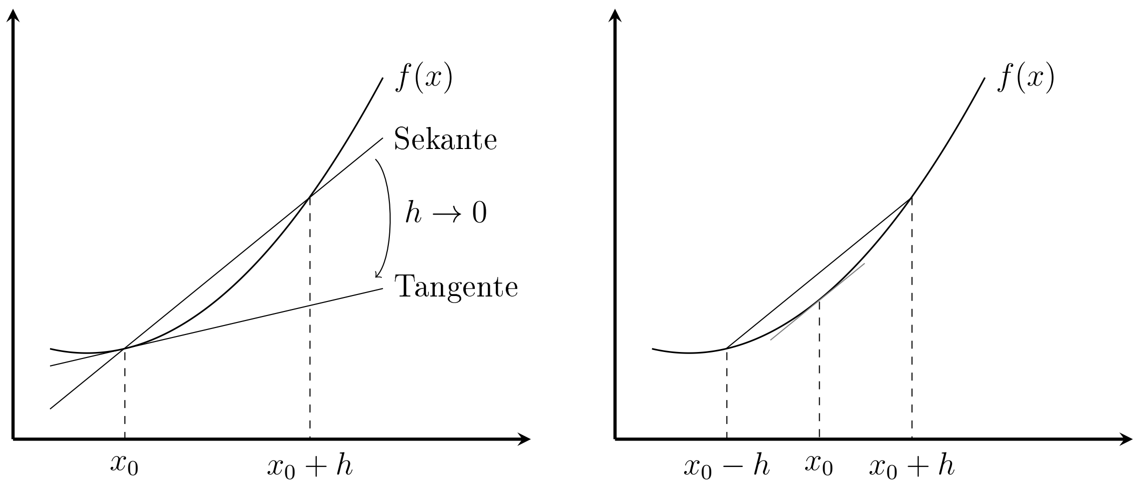

Abbildung 1: Links: Visualisierung des Grenzübergangs $h \to 0$, rechts: Exemplarische Darstellung der Zentraldifferenz.

$$\boxed{Df\left(x\right) \approx \frac{f\left(x_0 + h\right) - f\left(x_0 - h\right)}{2h}} \tag{5}$$

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

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

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

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

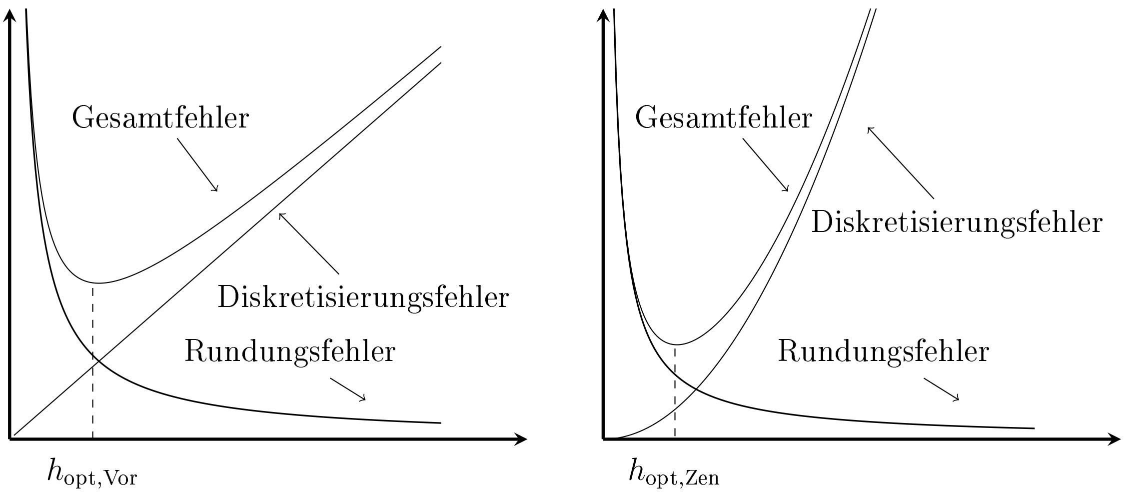

Abbildung 2: Visualisierung von Diskretisierungs-, Rundungs- und Gesamtfehler für Vorwärtsdifferenzen (links) und Zentraldifferenzen (rechts).

und für Zentraldifferenzen:

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

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

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

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

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

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

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

Dabei sind c_1, c_2 in der Praxis nicht ohne Weiteres bestimmbar und skalieren bei Vorwärtsdifferenzen mit der zweiten Ableitung (bei Zentraldifferenzen mit der dritten Ableitung) an der Stelle x_0. Der Einfluss der Konstanten auf h_{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 $h_{\text{opt,Zen}} \approx 10^{-6}$.

Aufgabe 1: Vorwärtsdifferenzen

Ziel ist es den Newton-Aufruf mit lediglich dem Übergabeparameter *'Function'* zu ermöglichen. Gehen Sie dabei wie folgt vor:

- Schreiben Sie eine Funktion `numDiff(func,x)`, welche von einer übergebenen Funktion `func` die numerische Ableitung an einer Stelle `x` mittels Vorwärtsdifferenzen approximiert.
- Implementieren Sie in Ihrer Newton-Funktion eine Routine, welche erkennt, wenn beim Aufruf **keine** Funktion *'Derivative'* als analytische Ableitung der zu untersuchenden Funktion *'Function'* übergeben wurde.
- Verwenden Sie dann die geschriebene Funktion `numDiff(func,x)` zur Berechnung der Ableitung in Ihrem Newton-Algorithmus.

Aufgabe 2: Weitere Differenzierungsverfahren & User Input

Ziel ist es dem user eine Auswahl von verschiedenen numerischen Verfahren für die Approximation der Ableitung zur Verfügung zu stellen. Gehen Sie dabei wie folgt vor:

- Erweitern Sie Ihre `numDiff(func,x,Method)`-Funktion um einen zusätzlichen Parameter Method. In Abhängigkeit dieses Parameters soll intern die Berechnung der Ableitung mittels:
  1. Vorwärtsdifferenzen (h $= 10^{-8}$)
  2. Rückwärtsdifferenzen (h $= 10^{-8}$)
  3. Zentraldifferenzen (h $= 10^{-6}$)

  erfolgen.
- Implementieren Sie in der Newton-Funktion eine user Abfrage, welche das zu verwendende Differenzierungsverfahren determiniert, um die Ableitung zu approximieren, wenn die Newton-Funktion ohne Parameter *'Derivative'* aufgerufen wird. Schlagen Sie dazu den Befehl `questdlg` nach und verwenden Sie diesen.

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=d8MfBAAAQBAJ.

[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. URL: 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=3bYoBAAAQBAJ.