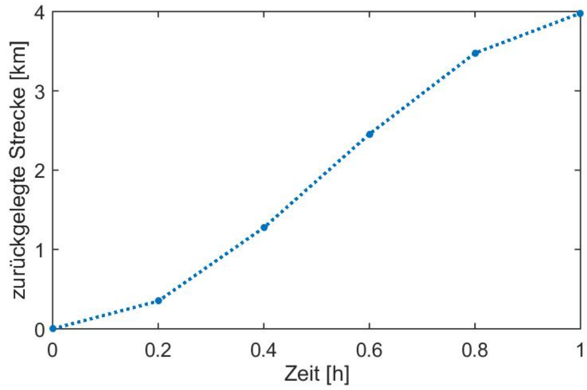
Tutorial: Numerisch Differenzieren

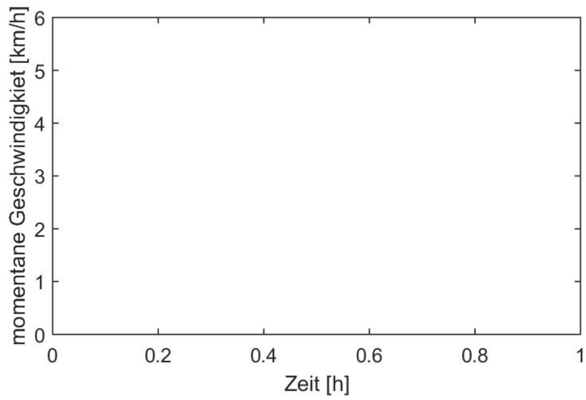
(basierend auf dem Skript Numerik für Ingenieure von R. Axthelm)

Aufgabenstellung: Von ihrem GPS-Gerät bekommen sie alle 12 Sekunden ihre aktuelle Position zugeschickt. Daraus können sie das unten dargestellte Weg-Zeit-Diagramm erstellen. Bei den Punkten hat ihr GPS-Gerät seine aktuelle Positiion bekommen. Ihr GPS-Gerät berechnet aber auch ihre momentane Geschwindigkeit aus dem Diagramm mit Hilfe numerischer Differentiation. Das wollen wir weiter untersuchen. Oder anders formuliert: Wir leiten eine Funktion f, die nur zu gewissen Zeitpunkten x_i, also $f_h(x_i)$ gegeben ist, numerisch ab.



Schritt A: Graphische Anschauung

1. Zeichnen sie die erste Ableitung des Weg-Zeit-Diagramms in das abgebildete Achsenkreuz (qualitativ).



Wie gehen sie dabei vor? Um die Ableitung an der Stelle x_i zu bestimmen, legen sie gedanklich eine Tangente durch den Punkt $f_h(x_i)$ und bestimmen deren Steigung.

Schritt B: Beschreiben des Algorithmus

Es sei $I = [0,1]$ und $f \in C^2(I)$ mit $f : I \to \mathbb{R}$.

Unsere diskrete Funtkion f_h approximiere f und sei folgendermaßen gegeben:

$$f_h(x_i) = f(x_i)$$
$$f_h\big|_{[x_i,x_{i+1}]} \in \mathbb{P}_1 \, .$$

wobei $I = \bigcup_{i=0}^{N-1} [x_i, x_{i+1}]$.

Bei x_i ist dieses f_h gar nicht differenzierbar. Da aber $f_h \approx f$ und f sehr wohl differenzierbar ist, will man ja f_h auch irgendwie ableiten können.

Die Ableitung kann angenähert werden durch den Differenzenquotient.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \qquad \text{Vorwärtsdifferenzenquotient}$$
$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \qquad \text{Rückwärtsdifferenzenquotient}$$

Oder man wählt das das arithmetische Mittel der beiden:

$$\boxed{f'(x) \approx \frac{1}{2}\left(\frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \frac{f(x) - f(x-h)}{h}\right) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h}}$$

2. Schreiben sie die drei Differenzenquotienten für die diskrete Version f_h von f um. Wählen sie $h_i := x_{i+1} - x_i$. Nehmen sie für das arithmetische Mittel an, dass das Gitter äquidistant ist, also $h = h_i$.

Schritt C: Implementierung in Matlab

3. Erzeugen Sie das Skript `MyDiff.m`.

4. Definieren sie darin ein Interval `I` von 0 bis 1 und geben sie mit `DIM` die Anzahl diskreter Funktionsauswertungen an (z.B. `DIM` $= 11$). Berechnen sie daraus den Abstand `h` zwischen den Gitterpunkten und daraus das Gitter `x`. Vervollständigen sie dazu den untenstehenden Code.

```
I = [0 1];
DIM = 11;
h = ...
x = I(1): ...;
```

5. Laden sie die Funtion GPS.p herunter. Verwenden sie sie gleich wie eine herkömmliche M-Datei. Sie liefert ihnen für jedes x_i den entsprechenden Funktionswert $f_h(x_i)$.

```
[fh]=GPS(x);
```

6. Implementieren sie den Vorwärts-, Rückwärts- und gemittelten Differenzenquotienten in ihrer Datei. Überlegen sie sich dazu genau, was an den Randpunkten passiert.

7. Plotten sie die drei Ableitungen. Welcher Differenzenquotient gibt die Steigung am besten wieder?

8. Vergleichen sie ihre Ableitungen mit der korrekten Lösung.

```
[fh,dfh]=GPS(x);
plot(x,dfh);
```

Schritt D: Anwendung: Verbesserte Geschwindigkeitsangabe des GPS

Sie möchten ihre momentane Geschwidigkeit noch genauer wissen und stellen ihr GPS-Gerät so ein, dass es ihnen öfters ihre aktuelle Position sendet. Wir nehmen an, dass dies technisch unbeschränkt möglich ist. Realistisch sind Werte um eine Sekunde.

9. Legen sie um ihren Code eine `for`-Schleife. In der Schleife verdoppeln sie dann jeweils den Wert von `DIM`. Dabei sollen die Intervalle eine vernüftige Länge behalten. Wiederholen sie das 10 Mal. Verwenden sie dazu folgende Elemente:

```
for i=1:1:10
....
DIM=(DIM-1)*2+1;
end
```

10. Plotten sie die drei Ableitungen für das feinste Gitter. Was hat sich verändert?

Schritt E: Verifikation

Sie haben festgestellt, dass die Näherung an die Lösung mit einem feineren Gitter immer besser wird. Doch lässt sich das beliebig weit fortführen? Dazu betrachten wir den Fehler der numerischen Lösung. Wir definieren den Fehler folgendermassen:

$$\|f_h - f\|_2 = (\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}|f_h - f|^2)^{\frac{1}{2}} \tag{1}$$

11. Berechnen sie den Fehler für jedes `h` in ihrem Matlab-Code für den gemittelten Differenzenquotienten. Vernachlässigen sie dabei die Randpunkte.

12. Speichern sie das jeweilige Gitter in `grid(i)` und den Fehler in `error(i)` ab.

13. Iterieren sie nun 20 Mal durch ihre `for`-Schleife. Plotten sie mit Hilfe von `loglog` das Gitter gegen den Fehler.

Dazu untersuchen wir den Fehler ein bisschen genauer: Der Fehler setzt sich aus zwei Komponenten zusammen:

1. Verfahrensfehler   2. Rundungsfehler

Der Verfahrensfehler ist der Fehler zwischen dem exakten Wert der Ableitung und dem exakten Wert des Differenzenqotienten, denn der Differenzenquotient ist das Verfahren zur Berechnung der Ableitung

$$\left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h} \right|$$

Zur Berechnung dieses Fehlers stellen wir die Funktionsausdrücke im Differenzenquotienten durch Taylorentwicklungen dar:

Taylorentwicklung von f um x_0, ausgewertet bei x lautet $T_{f,x_0}(x) = f(x)$, genauer

$$T_{f,x_0}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k \,.$$

Dann ist für $x_0 = x$ und $x = x \pm h$:

$$f(x+h) = T_{f,x}(x+h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} h^k = f + h\,f' + \frac{1}{2}\,h^2\,f'' + \frac{1}{6}\,h^3\,f^{(3)} + \cdots$$

und $$f(x-h) = T_{f,x}(x-h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} (-h)^k = f - h\,f' + \frac{1}{2}\,h^2\,f'' - \frac{1}{6}\,h^3\,f^{(3)} + \cdots$$

Damit gilt weiter

$$
\begin{aligned}
& & f(x+h) - f(x-h) &= 2\,h\,f' + \frac{1}{3}\,h^3\,f^{(3)} + \frac{2}{5!}\,h^5\,f^{(5)}\cdots \\
\Rightarrow & & \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h} &= f' + \frac{1}{6}\,h^2\,f^{(3)} + \frac{1}{5!}\,h^4\,f^{(5)}\cdots \\
\Rightarrow & & \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h} \right| &= \left| \frac{1}{6}\,h^2\,f^{(3)} + \frac{1}{5!}\,h^4\,f^{(5)}\cdots \right| \\
& & &= h^2 \left| \frac{1}{6}\,f^{(3)} + \underbrace{\frac{1}{5!}\,h^2\,f^{(5)}\cdots}_{\to 0\,,\;h\to 0} \right| \\
& & &\le C\,h^2 = \mathcal{O}(h^2)
\end{aligned}
$$

Wir erhalten also insgesamt für dne Verfahrensfehler:

$$
\boxed{\left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h} \right| = \mathcal{O}(h^2)}
$$

14. Zeichnet man den Fehler gegen `h` in einem `loglog`-Plot, so sollte man eine Gerade mit Steigung p sehen. Testen sie dies visuell, indem man eine Vergleichsgerade der entsprechenden Ordnung in denselben `loglog`-Plot zeichnen. Stimmt die Ordnung so erhält man zwei parallele Geraden.

Zusätzlich zum Verfahrensfehler produzieren wir aber auch Rundungsfehler. Bei der Auswertung von Funktionen auf dem Computer sind wir natürlich nicht infinitesimal genau. Wie ungenau unsere Rechnungen sind hängt speziell vom verwendetetn Prozessor ab. Es sei $f_\epsilon := f(x) \pm \epsilon$. Wir betrachten:

$$
|D_\epsilon - D| := \left| \underbrace{\frac{f_\epsilon(x+h) - f_\epsilon(x-h)}{2\,h}}_{\text{Das rechnen wir}} - \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h}}_{\text{Das wollen wir rechnen}} \right|
$$

$$
\le \frac{1}{2\,h}\,\left(|f_\epsilon(x+h) - f(x+h)| + |f_\epsilon(x-h) - f(x-h)|\right)
$$

$$
\le \frac{\epsilon}{h}
$$

Der Fehler, den wir insgesamt machen ist dann

$$\begin{aligned}\left|f'(x) - \frac{f_\epsilon(x+h) - f_\epsilon(x-h)}{2\,h}\right| &= |f'(x) - D_\epsilon| \\ &= |f'(x) - D + D - D_\epsilon| \\ &\leq \underbrace{|f'(x) - D|}_{\text{Verfahrensfehler}} + \underbrace{|D - D_\epsilon|}_{\text{Rundungsfehler}} \\ &\leq C\,h^2 + \frac{\epsilon}{h}\end{aligned}$$

Je nach Prozessor ist so ein ϵ von der Größenordnung 10^{-7} oder 10^{-16}.

15. Bestimmen sie ϵ für ihren Computer. Ermitteln sie dazu das ϵ, das folgende Gleichung erfüllt: $1 + \epsilon > 1$. Vergleichen sie ihre berechnete Lösung mit `eps` von Matlab.

16. Schauen sie sich den `loglog`-Plot nochmals an. Wo ist der Fehler am kleinsten? Wie lässt sich das optimale h finden, dass uns den kleinsten Fehler liefert?

Wahl einer optimalen Gitterweite h:

$$\left|f'(x) - \frac{f_\epsilon(x+h) - f_\epsilon(x-h)}{2\,h}\right| \leq C\,h^2 + \frac{\epsilon}{h} =: E(h)$$

Wähle h so, dass $E(h)$ minimal wird:

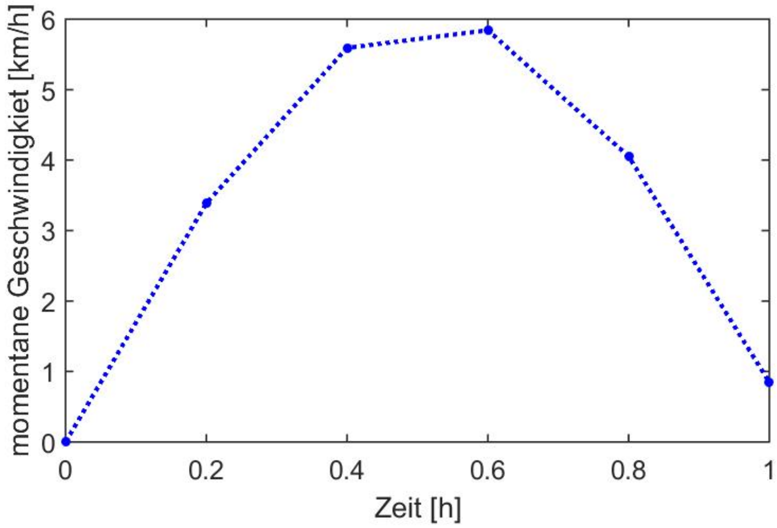
$$0 = E'(h) = C\,h - \frac{\epsilon}{h^2} \quad \Leftrightarrow \quad h = (\frac{\epsilon}{2C})^{\frac{1}{3}}$$

Genau kriegen wir das nicht; wir kennen ja C auch gar nicht, aber es gibt uns eine Idee von einer Größenordnung für h, die nicht unterschritten werden soll. So lange $h >> \epsilon^{\frac{1}{3}}$ ist, wird der Rundungsfehler nicht sichtbar werden.

17. Berechnen sie das optimale h und vergleichen sie es mit ihrem Plot.

18. * Plotten sie nun den Fehler gegenüber dem Gitter für den Vorwärtsdifferenzenquotienten.

1



2

Für unsere diskrete Funktion f_h sieht das dann so aus: Es sei $h_i := x_{i+1} - x_i$

$$f_h'(x_i) \approx \frac{f_h(x_{i+1}) - f_h(x_i)}{h_i} \qquad \text{Vorwärtsdifferenzenquotient}$$
$$f_h'(x_i) \approx \frac{f_h(x_i) - f_h(x_{i-1})}{h_{i-1}} \qquad \text{Rückwärtsdifferenzenquotient}$$

Und das arithmetische Mittel:

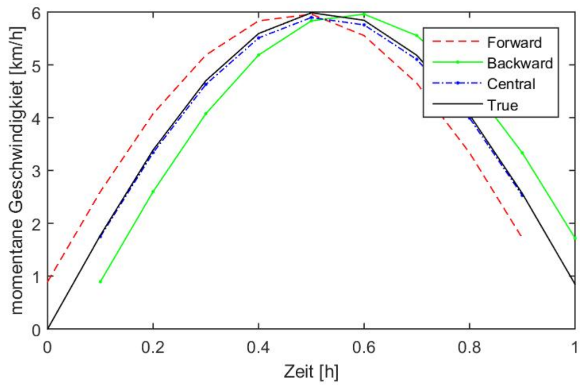
$$\boxed{f_h'(x_i) \approx \frac{1}{2}\left(\frac{f_h(x_{i+1}) - f_h(x_i)}{h_i} + \frac{f_h(x_i) - f_h(x_{i-1})}{h_{i-1}}\right) = \underbrace{\frac{f_h(x_{i+1}) - f_h(x_{i-1})}{2\,h}}_{\text{für äquidistante Gitter mit } h = h_i}}$$

3-7

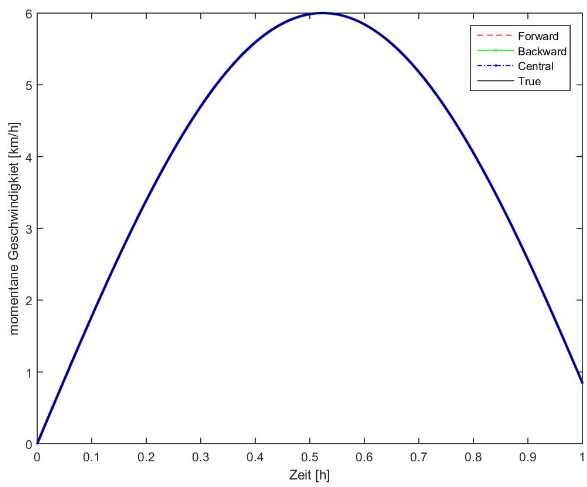
```
clear all
close all

I   = [0 1];
DIM = 11;
h   = (I(2)-I(1))/(DIM-1);
x   = I(1):h:I(2);

[fh,dfh]  = GPS(x);      % Werte von f an x(i)(x);
% Werte von f' an x(i)
```

```
% Vorwaertsdifferenzenquotient
dfhv = (fh(2:DIM)-fh(1:DIM-1))/h;  % Naeherungen an f'(x(i))=dfh(i)
% Rueckwaertsdifferenzenquotient
dfhr(2:DIM) = (fh(2:DIM)-fh(1:DIM-1))/h;  % Naeherungen an f'(x(i))=dfh(i)
% gemittelter Differenzenquotient
dfhm(2:DIM-1) = (fh(3:DIM)-fh(1:DIM-2))/2/h;

figure
plot(x(1:DIM-1),dfhv,'r--',x(2:DIM),dfhr(2:DIM),'g.-',x(2:DIM-1),dfhm(2:DIM-1),'b.
hold
plot(x,dfh,'k-')
legend('Forward', 'Backward', 'Central', 'True')
```

6-8



9-10

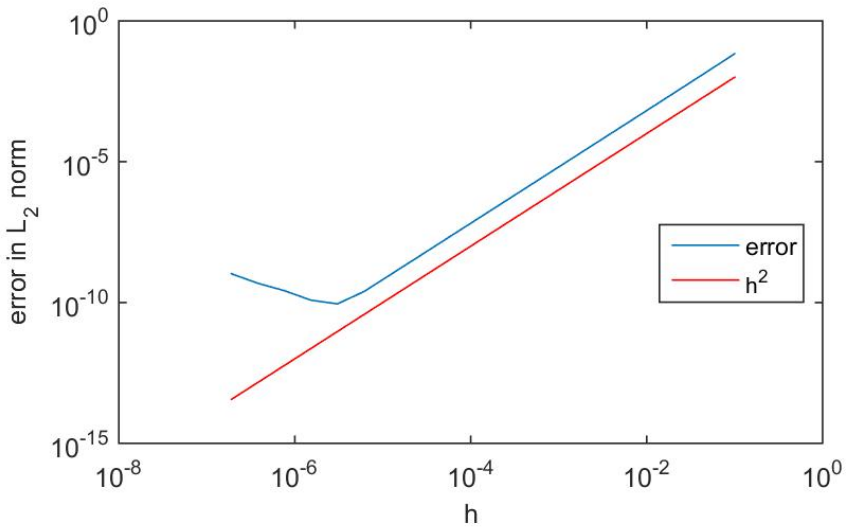


11-12

```
clear all
close all
```

```
I   = [0 1];
DIM = 11;
for i=1:1:20
h   = (I(2)-I(1))/(DIM-1);
x   = I(1):h:I(2);

[fh,dfh]  = GPS(x);      % Werte von f an x(i)(x);
% Werte von f' an x(i)

% Vorwaertsdifferenzenquotient
dfhv = (fh(2:DIM)-fh(1:DIM-1))/h;  % Naeherungen an f'(x(i))=dfh(i)
% Rueckwaertsdifferenzenquotient
dfhr(2:DIM)  = (fh(2:DIM)-fh(1:DIM-1))/h;  % Naeherungen an f'(x(i))=dfh(i)
% gemittelter Differenzenquotient
dfhm(2:DIM-1)  = (fh(3:DIM)-fh(1:DIM-2))/2/h;

error(i)  = norm(dfh(2:DIM-1)-dfhm(2:DIM-1),2)/sqrt(DIM-2); %Fehler der Lsg.
grid(i)   = h;   %Gitterweite

DIM=(DIM-1)*2+1; %Anzahl Punkte wird vergroessert

end

figure(1)
loglog(grid,error)
```

13-14



15-17

```
epsilon=1
sum=2;
```

```
while sum>1
    epsilon=epsilon/2;
    sum=1+epsilon;
end
epsilon
```

```
>> (eps)^(1/3)

ans =

   6.0555e-06
```