7 Numerische Differentiation

Problemstellung: Gegeben sei die skalare Funktion $f(x)$, $x \in \mathbb{R}$, genügend oft differenzierbar. Gesucht ist $f^{(\nu)}(z)$, $\nu \geq 1$, d.h. die ν-te Ableitung von f an der festen Stelle z.

Während bei der Integration von Funktionen bereits relativ einfache Beispiele wie $f(x) = x^{-1} \cos x$ nicht explizit integriert werden können, ist dies bei der Differentiation anders. Alle explizit gegebenen Funktionen können im Prinzip nach den Regeln der Kunst differenziert werden. Wozu braucht man denn die numerische Differentiation? Es seien hier einige Situationen angegeben, in denen es sinnvoll ist, numerisch zu differenzieren.

a) Die Funktion ist nicht explizit, sondern nur durch eine Wertetabelle bekannt.

b) Die Funktion ist nicht explizit durch Formeln bekannt, aber zu jedem x lässt sich $f(x)$ bestimmen. Diese Berechnung von $f(x)$ kann sehr umfangreich sein. Zum Beispiel kann $f(x)$ das Lösen einer Anfangswertaufgabe gewöhnlicher Differentialgleichungen oder das Lösen partieller Differentialgleichungen beinhalten.

c) Die Funktion ist explizit durch Formeln bekannt, so dass im Prinzip explizit differenziert werden kann, aber die Differentiation ist zu mühsam oder zu umfangreich, z.B. die Berechnung eine Jacobi-Matrix höherer Dimension.

d) Herleitung numerischer Verfahren für gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen.

Grundidee: Entwickle f um z nach der *Taylor'schen Formel*:

$$\begin{aligned} f(z+h) &= f(z) + \frac{h}{1!} f'(z) + \frac{h^2}{2!} f''(z) + \ldots + \frac{h^k}{k!} f^(k)(z) \\ &\quad + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} f^{k+1}(\xi_+), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \end{aligned}$$

wobei $h > 0$, $\xi_+ \in (z, z+h)$.

Analog hat man

$$f(z-h) = f(z) - \frac{h}{1!} f'(z) + \frac{h^2}{2!} f''(z) - \ldots$$

Aus den beiden Entwicklungen erhält man die folgenden drei Approximationen für $f'(z)$:

Vorwärts-Differenzenquotient:

$$\frac{f(z+h) - f(z)}{h} = f'(z) + \frac{h}{2} f''(z) + O(h^2) \tag{7.1}$$

Rückwärts-Differenzenquotient:

$$\frac{f(z) - f(z-h)}{h} = f'(z) - \frac{h}{2} f''(z) + O(h^2)$$

Symmetrischer Differenzenquotient 1. Ordnung:

$$\Delta_h^1(z) := \frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h} = f'(z) + \frac{h^2}{6} f'''(z) + O(h^3)$$

Für den symmetrischen Differenzenquotienten 1. Ordnung gilt genauer folgende Fehler-Entwicklung nach h^2:

$$\Delta_h^1(z) = f'(z) + c_1 h^2 + c_2 h^4 + \ldots + c_{m-1} h^{2m-2} + O(h^{2m}),\ m = 2, 3, \ldots$$

Analog zu vorhin folgt aus der Taylor'schen Formel der *symmetrische Differenzenquotient 2. Ordnung*

$$\Delta_h^2(z) := \frac{f(z+h) - 2f(z) + f(z-h)}{h^2} = f''(z) + O(h^2)$$

mit der Fehler-Entwicklung nach h^2:

$$\Delta_h^2(z) = f''(z) + d_1 h^2 + d_2 h^4 + \ldots + d_{m-1} h^{2m-2} + O(h^{2m}),\ m = 2, 3, \ldots$$

Allgemein definieren wir:

Symmetrischer Differenzenquotient der Ordnung ν:

$$\Delta_h^\nu(z) := \frac{1}{(2h)^\nu} \sum_{j=0}^{\nu} (-1)^j a_j f(z + b_j h)\,, \quad \nu = 1, 2, \ldots\,, \tag{7.2}$$

wobei die a_j die Binomialkoeffizienten $\binom{\nu}{j}$ sind und $b_j := \nu - 2j$.

Bemerkung: Die Formel (7.2) für den symmetrischen Differenzenquotienten der Ordnung ν ergibt sich auch durch das Ableiten des entsprechenden Interpolationspolynoms durch die Stützpunkte (z_k, f_k), $z_k = z + kh$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$; $f_k = f(z_k)$. Z.B. gilt:

$$P_2'(z) = \frac{1}{2h}\left[f(z+h) - f(z-h)\right] = \Delta_h^1(z)\,.$$

Leider ist die Approximation der Ableitungen mittels Differenzenquotienten numerisch heikel, da man für kleine h im Allgemeinen grosse Auslöschung hat. Wir machen ein Beispiel für den für die Praxis wichtigsten Fall der 1. Ableitung.

Beispiel: Wir approximieren $f'(1)$ für $f(x) = \cos x$ mit dem Vorwärts-Differenzenquotienten. Wir verwenden dazu einen Rechner mit 10-stelliger Genauigkeit (9-stellige Anzeige). Das exakte Resultat ist $-\sin(1) = -0.841470985$. Wir listen die Werte der numerischen Approximation von $f'(1)$ und den absoluten Fehler für verschiedene h-Werte auf:

h	Approximation	Absoluter Fehler	
1	-0.956449142	0.114978158	
10^{-1}	-0.867961845	0.025590860	
10^{-2}	-0.844158450	0.002687465	
10^{-3}	-0.841741000	0.000270015	
10^{-4}	-0.841498000	0.000027015	
10^{-5}	-0.841480000	0.000009015	$\leftarrow$ 'optimal'
10^{-6}	-0.841500000	0.000029015	
10^{-7}	-0.842000000	0.000529015	
10^{-8}	-0.840000000	-0.001470985	
10^{-9}	-0.900000000	0.058529015	
10^{-10}	0.000000000	-0.841470985	
10^{-11}	0.000000000	-0.841470985	

Aus obiger Tabelle sieht man sehr schön, dass für grosse h, das heisst $10^{-5} \leq h \leq 10^{-1}$, der absolute Fehler proportional zu h ist, wie es nach (7.1) sein sollte. Bei weiterer Verkleinerung von h wird die Approximation wieder schlechter. Der Grund ist die *Auslöschung* (Subtraktion von zwei fast gleich grossen Zahlen). Die optimale Approximation ist bei $h = 10^{-5}$.

Wahl von h

Im Prinzip muss h so gewählt werden, dass die Summe des Diskretisationsfehlers ($= O(h)$ nach (7.1)) und des Fehlers auf Grund der Auslöschung (Anzahl nichtsignifikanter Nullen in der Approximation) minimal wird. Das ist ungefähr der Fall, wenn beide Fehler die selbe Grössenordnung haben. Dies führt für ein allgemeines f auf die folgende Abschätzung für das optimale h:

$$h_{optimal} \cong \sqrt{10^{-n} \cdot 2 \frac{|f(z)|}{|f''(z)|}}\,.$$

Bemerkung: Die Existenz einer asymptotischen Entwicklung in h^2 des Fehlers bei symmetrischen Differenzenquotienten kann dazu benutzt werden, mit einem *Extrapolationsschema nach Romberg* (vergleiche numerische Integration) sukzessive die unbekannten Fehlerterme zu eliminieren. Wegen der Auslöschung sollte man hier das Schema mit einem nicht zu kleinen h starten und dann die h-Werte vergrössern.