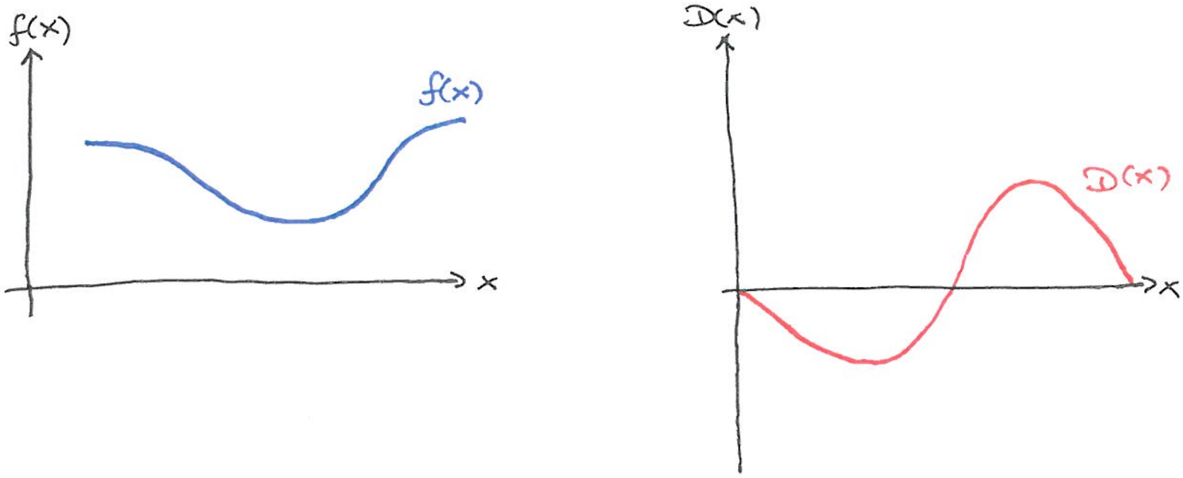
Numerisches Differenzieren

Gegeben sei eine Funktion $f(x)$ in analytischer Form oder tabelliert als $\{x_i, f(x_i)\}$ mit $i = 0, 1, 2, \ldots, N$.

Gesucht sei die Ableitung dieser Funktion

$$D(x) = \frac{df}{dx}$$



Die einfachste Form, eine derartige Ableitung zu berechnen ist der Differenzquotient:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)$$

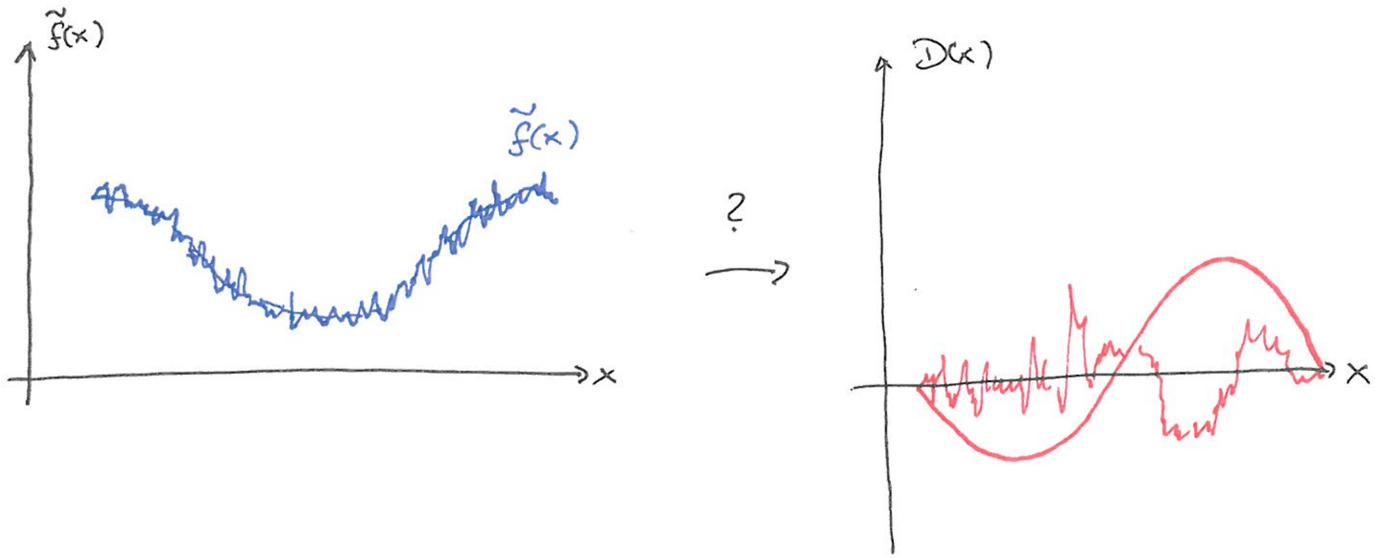
(Vorwärtsdifferenzquotient)

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

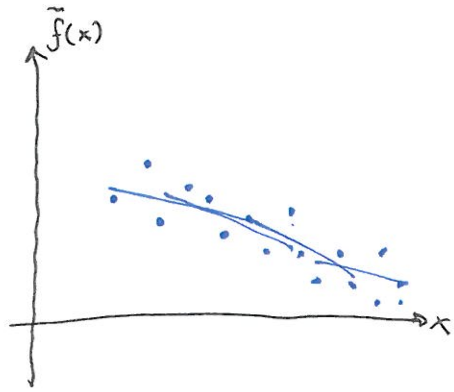
(zentraler Differenzquotient)

Noch bessere Approximationen erhält man, wenn man die Funktion lokal durch differenziobare Approximationen von Funktionen wie etwa Splines verwendet.

Spezielles Vorgehen erfordert auch der Fall von verrauschten Funktionen, deren Ableitungen sich durch obige Verfahren nur sehr bedingt annähern lassen.



Ein einfaches Verfahren für eine derartige Situation ist es, die verrauschte Funktion $\tilde{f}(x)$ lokal etwa durch eine Regression anzunähern:



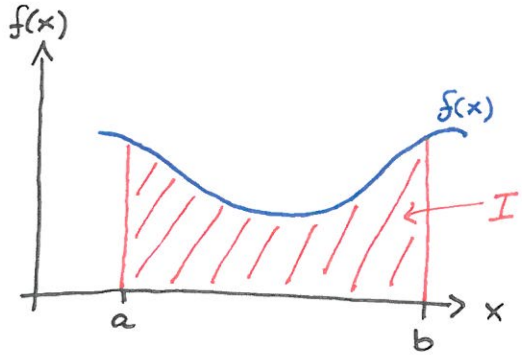
Die Ableitung ergibt sich dann aus der Steigung der jeweiligen Regressionsgraden.

Numerische Integration

Gegeben sei eine Funktion $f(x)$ in analytischer Form oder tabelliert als $\{x_i, f(x_i)\}$ mit $i = 0, 1, 2, \ldots, N$.

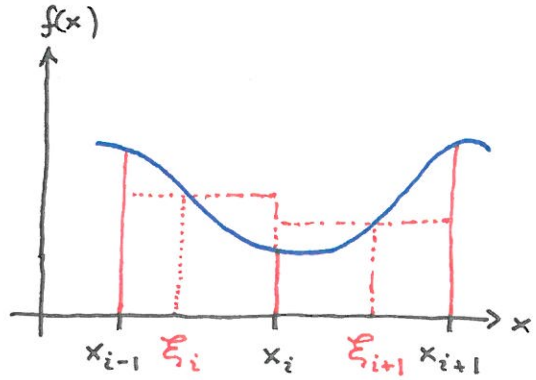
Gesucht ist das Integral

$$I = \int_a^b f(x)\,dx$$



Erinnern wir uns an die Definition des bestimmten Integrals als Riemann-Summe:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{z\to\infty} S(z) \qquad \text{wobei} \quad S(z) = \underbrace{\sum_{i=0}^{z} f(\xi_i)\,\Delta x_i}_{\text{Riemann-Summe}}$$



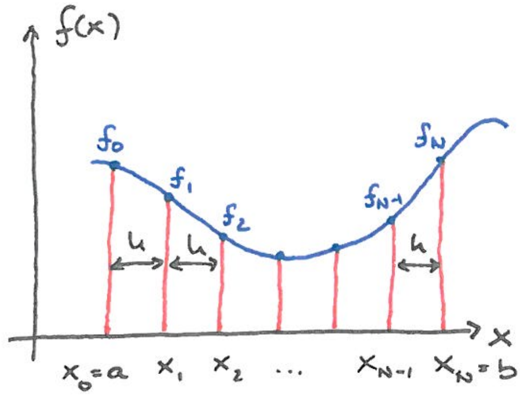
mit $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$

und $x_{i-1} \leq \xi_i \leq x_i$

$z \to \infty$: immer feinere Unterteilung.

Betrachten wir zunächst den Fall, daß wir das Intervall $[a,b]$ in <u>N gleiche Teile</u> zerlegen:

$$h = \frac{b-a}{N}$$



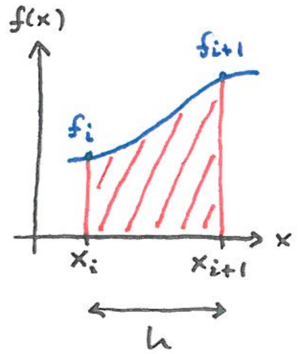
→ Verwende die Funktionswerte $f_i = f(x_i)$ zur numerischen Berechnung des Integrals:

$$I = \sum_{i=0}^{N} \omega_i \cdot f_i$$

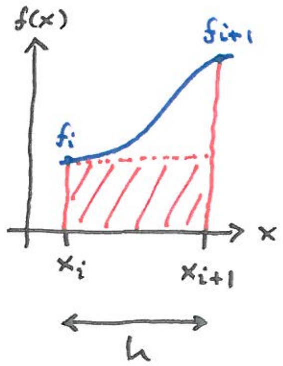
mit geeigneten Gewichten ω_i

Wie können wir nun die Gewichte ω_i geschickt wählen?

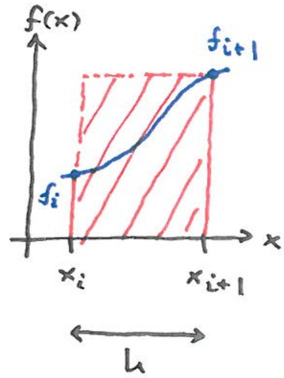
<u>Strategie</u>: Abschätzung der Teilflächen A_i



naiv:

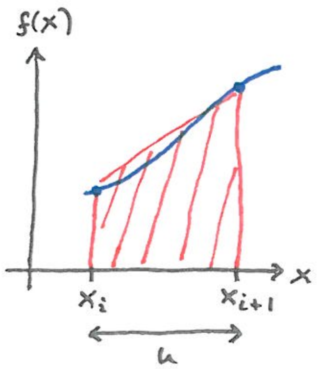


$A_i = h \cdot f_i$



$A_i = h \cdot f_{i+1}$

besser: Trapez-Regel



$$\rightarrow \quad A_i = \frac{1}{2} h \left(f_i + f_{i+1} \right)$$

$$\rightarrow \quad I = \sum_{i=0}^{N-1} A_i = \frac{h}{2} f_0 + h f_1 + h f_2 + \ldots + \frac{h}{2} f_N$$

$$\boxed{I = \frac{h}{2}\left(f_0 + f_N\right) + \sum_{i=1}^{N-1} h \cdot f_i}$$

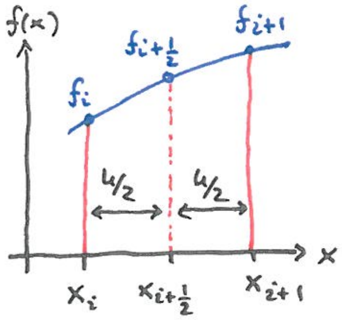
$\omega_0 = \omega_N = \frac{h}{2}$

$\omega_i = h$

Fehlerabschätzung der Trapez-Regel

Idee: Taylor-Entwicklung der Funktion um den Punkt

$$x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{h}{2} \quad \longrightarrow \quad f(x_{i+\frac{1}{2}}) = f_{i+\frac{1}{2}}$$



$$f(x_i + \tfrac{1}{2}h + \underset{\text{kleiner Parameter}}{x}) = f_{i+\frac{1}{2}} + x f'_{i+\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2} x^2 f''_{i+\frac{1}{2}} \dots$$

1) Integration der Taylor-Reihe

$$A_{i,\text{exact}} = \int_{-h/2}^{h/2} dx\, f(x_i + \tfrac{1}{2}h + x)$$

$$= h \cdot f_{i+\frac{1}{2}} + \underbrace{\left[\tfrac{1}{2} x^2\right]_{-h/2}^{h/2}}_{=0} f'_{i+\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\left[\tfrac{1}{3} x^3\right]_{-\frac{h}{2}}^{h/2} f''_{i+\frac{1}{2}} + \dots$$

$$= h \cdot f_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{3}\left(\frac{h}{2}\right)^3 f''_{i+\frac{1}{2}} + \dots \quad O(h^5)$$

2) Integration mit Trapez-Regel

$$A_{i,\text{estim}} = \tfrac{1}{2} h \left(f_i + f_{i+1}\right)$$

einsetzen der Taylor-Reihe

$$f_i = f(x_i + \tfrac{1}{2}h - \tfrac{1}{2}h) = f_{i+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} f'_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''_{i+\frac{1}{2}} + \dots$$

$$f_{i+1} = f(x_i + \tfrac{1}{2}h + \tfrac{1}{2}h) = f_{i+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} f'_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''_{i+\frac{1}{2}} + \dots$$

$$\rightarrow \quad A_{i,\text{estim}} = h \cdot f_{i+1/2} + \frac{1}{8} h^3 f''_{i+1/2} + O(h^5)$$

Für den Fehler folgt damit:

$$\Delta A_i = A_{i,\,\text{estim}} - A_{i,\,\text{exact}} = \left(\frac{1}{8} - \frac{1}{24}\right) h^3 f''_{i+1/2} + O(h^5)$$

$$= \frac{1}{12} h^3 f''_{i+1/2}$$

Fehlerabschätzung für das gesamte Integral:

$$I = \sum_{i=0}^{N-1} A_i \longrightarrow \Delta I = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta A_i \approx \frac{1}{12} h^3 \underbrace{\sum_{i=0}^{N-1} f''_{i+1/2}}_{= N \cdot \langle f'' \rangle}$$

$\langle f'' \rangle$: Mittelwert der zweiten Ableitungen

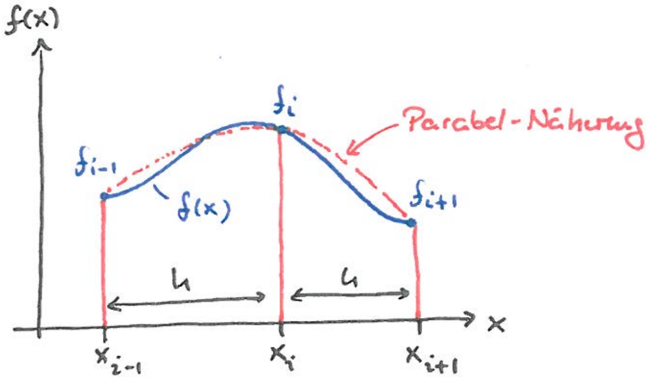
$$\longrightarrow \Delta I \approx \frac{1}{12} h^2 \cdot \underbrace{N \cdot h}_{=(b-a)} \cdot \langle f'' \rangle$$

$$\approx \frac{1}{12} (b-a) h^2 \langle f'' \rangle$$

→ Der Fehler der numerischen Integralberechnung mit (äquidistanter) Trapez-Regel ist somit

$\propto h^2$ und $\propto (b-a)^3$

Simpson - Regel



Idee: Approximation des Funktion $f(x)$ im Intervall $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ (= 3 Stützpunkte) durch eine Parabel

$$f(x_i + x) = f_i + \alpha x + \beta x^2 \qquad (*)$$

$$\rightarrow A_{i,\text{estim}} = \int_{-h}^{h} f(x_i + x)\,dx = \int_{-h}^{h} [f_i + \alpha x + \beta x^2]\,dx = 2h \cdot f_i + \frac{2}{3}h^3 \cdot \beta$$

Für die Approximation des Parabel soll gelten:

$$\left.\begin{aligned} f(x_i + h) &= f_{i+1} \overset{(*)}{=} f_i + \alpha h + \beta h^2 \\ f(x_i - h) &= f_{i-1} \overset{(*)}{=} f_i - \alpha h + \beta h^2 \end{aligned}\right\}$$

auflösen nach β, bzw $\frac{2}{3}h^3\beta$

$$\rightarrow \frac{2}{3}h^3\beta = \frac{h}{3}(f_{i+1} + f_{i-1} - 2f_i$$

$$\rightarrow A_{i,\text{estim}} = 2h f_i + \frac{h}{3}(f_{i+1} + f_{i-1} - 2f_i) = \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1})$$

Damit ergibt sich für das gesamte Integral:

$$I = \sum_{i=1,\text{ odd}}^{N-1} A_{i,\text{estim}} = \frac{h}{3}\Big(\underbrace{f_0 + 4f_1 + f_2}_{i=1} + \underbrace{f_2 + 4f_3 + f_4}_{i=3} + \ldots + \underbrace{f_{N-2} + 4f_{N-1} + f_N}_{i=N-1}$$

$$= \frac{h}{3}\Big(f_0 + f_N + 4\sum_{m\text{ odd}} f_m + 2\sum_{m\text{ even}} f_m\Big),$$

wobei wir uns auf den Fall N even beschränkt haben.