

§56: NUMERISCHE DIFFERENTIATION

56.1 Motivation:

In vielen Anwendungen muss man Ableitungen annähern von Funktionen, die nur diskret (d.h. an vereinzelt Punkten) vorliegen. Beispiele:

- (a) Geschwindigkeitsmessung durch die Polizei
- (b) Temperaturmessung an einer Messstation
- (c) Scannen von Personen mit einem 3D-Scanner

Zur Bestimmung geeigneter numerischer Approximationsformeln und deren Genauigkeit benötigt man den Satz von Taylor.

56.2 Problembeschreibung: (zunächst für Funktionen einer Variablen)

Annahme: Von einer kontinuierlichen Funktion $u(x)$ sind nur die Funktionswerte auf einem äquidistanten Gitter $\Gamma := \{x_i | x_i = i \cdot h, i \in \mathbb{Z}\}$ bekannt. Dabei bezeichnet h die Gitterweite von Γ .

Ges.: Approximation an eine Ableitung $u^{(k)}$ an einer Stelle ξ (die nicht unbedingt auf dem Gitter liegen muss) mit Hilfe der Messwerte u_i : Finite-Differenzen-Approximation

56.3 Beispiel:

u'' soll im Punkt x_i mit Hilfe der 3 Messwerte u_{i-1}, u_i, u_{i+1} approximiert werden.

Wir suchen also Koeffizienten α, β, γ , sodass $u''_i \approx \alpha u_{i-1} + \beta u_i + \gamma u_{i+1}$.

Der Approximationsfehler soll dabei höchstens $\mathcal{O}(h)$ betragen.

Lösung:

Wir fordern: $u''_i = \alpha u_{i-1} + \beta u_i + \gamma u_{i+1} + \mathcal{O}(h)$.

Mit einer Taylorentwicklung um x_i folgt (für eine hinreichend oft differentierbare Funktion):

$$\begin{aligned} \alpha u_{i-1} + \beta u_i + \gamma u_{i+1} &= \alpha \left(u_i - h'_i + \frac{1}{2} h^2 u''_i + \mathcal{O}(h^3) \right) \\ &\quad + \beta u_i \\ &\quad + \gamma \left(u_i + h u'_i + \frac{1}{2} h^2 u''_i + \mathcal{O}(h^3) \right) \\ &= u_i (\alpha + \beta + \gamma) + u'_i (-h\alpha + h\gamma) + u''_i \left(\frac{h^2}{2} \alpha + \frac{h^2}{2} \gamma \right) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

Da dies mit $u''_i = 0 \cdot u_i + 0 \cdot u'_i + 1 \cdot u''_i$ übereinstimmen soll, liefert ein Koeffizien-

tenvergleich das lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} (i) \quad \alpha + \beta + \gamma &= 0 \\ (ii) \quad -h\alpha + h\gamma &= 0 \\ (iii) \quad \frac{h^2}{2}\alpha + \frac{h^2}{2}\gamma &= 1 \end{aligned}$$

Aus (ii) folgt: $\alpha = \gamma$

in (iii) $h^2\alpha = 1 \Rightarrow \alpha = \frac{1}{h^2} = \gamma$

in (i) $\beta = -\alpha - \gamma = \frac{2}{h^2}$

Also gilt:

$$u_i'' \approx \frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})$$

Wie genau ist diese Approximation?

Mit der ausführlicheren Taylorentwicklung

$$u_{i\pm 1} = u_i \pm hu_i' + \frac{1}{2}h^2u_i'' \pm \frac{h^3}{6}u_i''' + \frac{h^4}{24}u_i^{(4)} \pm \frac{h^5}{120}u_i^{(5)} + \frac{h^6}{720}u_i^{(6)} + \mathcal{O}(h^7)$$

folgt durch Einsetzen:

$$\frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) = u_i'' + \underbrace{\frac{1}{12}h^2u_i^{(4)}}_{\text{führender Fehlerterm}} + \mathcal{O}(h^4)$$

Der führende Fehlerterm hat also die Ordnung $\mathcal{O}(h^2)$. Man sagt daher, die Approximation $u_i'' \approx \frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})$ hat die Konsistenzordnung:

$$\mathcal{O}(h^2) : \quad u_i'' = \frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \mathcal{O}(h^2)$$

56.4 Anmerkungen:

(a) Höhere Konsistenzordnung bedeutet bessere Approximation (für $h \rightarrow 0$). Hat eine Approximation mindestens lineare Konsistenzordnung ($\mathcal{O}(h)$), so heißt sie konsistent. Dies ist die Minimalforderung, die eine Approximation erfüllen muss.

(b) Die Konsistenzordnung hängt vom Entwicklungspunkt ab!

Beispiel:

Approximiert man mit u_i, u_{i+1} den Wert u_i' , so folgt aus der Taylorentwicklung um x_i :

$$u_{i+1} = u_i + hu_i' + \frac{h^2}{2}u_i'' + \mathcal{O}(h^3)$$

die Approximation der Ordnung $\mathcal{O}(h)$

$$u'_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + \frac{1}{2} h u''_i + \mathcal{O}(h^2)$$

Entwickelt man u_i, u_{i+1} um $u_{i+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_{i+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} u'_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{h}{2}\right)^2 u''_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{6} \left(\frac{h}{2}\right)^3 u^{(3)}_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(h^4) \\ u_i &= u_{i+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} u'_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(-\frac{h}{2}\right)^2 u''_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{6} \left(-\frac{h}{2}\right)^3 u^{(3)}_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned}$$

ergibt sich eine $\mathcal{O}(h^4)$ -Approximation:

$$u'_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + \frac{1}{24} h^2 u''_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(h^4)$$

- (c) Durch Hinzunahme weiterer Gitterpunkte gelingt es oft, die Konsistenzordnung zu verbessern:

$$\begin{aligned} u'_i &= \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \\ u'_i &= \frac{-u_{i+2} + 8u_{i+1} - 8u_{i-1} + u_{i-2}}{12h} + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned}$$

- (d) Wichtige Approximationen:
erste Ableitung:

$$\begin{aligned} u'_i &= \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + \mathcal{O}(h) && \text{Vorwärtsdifferenz} \\ u'_i &= \frac{u_i - u_{i-1}}{h} + \mathcal{O}(h) && \text{Rückwärtsdifferenz} \\ u'_i &= \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) && \text{zentrale Differenz} \end{aligned}$$

zweite Ableitung:

$$u''_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

- (e) Will man partielle Ableitungen einer Funktion mehrerer Variablen approximieren, benötigt man oft Taylorentwicklungen in mehreren Variablen (vgl. Satz 55.6).

Beispiel:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right|_{i,j} = \frac{1}{4hk} (u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j-1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1}) + \mathcal{O}(h^2 + k^2)$$

mit $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ und $x_i = ih$, $y_j = jk$.

Manchmal reichen auch 1-dim. Taylorentwicklungen:

Beispiel:

$$\begin{aligned}\Delta u|_{i,j} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{i,j} \\ &= \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2} + \mathcal{O}(h^2 + k^2)\end{aligned}$$

56.5 Anwendung auf die Diskretisierung von Differentialgleichungen

Ersetzt man die Ableitungen durch Differenzenapproximation, entstehen so genannte Finite-Differenzen-Verfahren.

Beispiel:

Die eindimensionale Diffusionsgleichung (vgl. 52.13 (c)) $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ soll mit einem einfachen Finite-Differenzen-Verfahren approximiert werden.

Bezeichnet u_i^k eine Approximation an $u(x, t)$ im Punkt $(ih, k\tau)$, verwendet man beispielsweise

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^k &= \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} + \mathcal{O}(\tau) \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i^k &= \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)\end{aligned}$$

lautet die Approximation

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} = \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{h^2}$$

Kennt man die Funktionswerte zur Zeitschicht $k = 0$, kann man damit die neuen Werte der Schichten $k = 1, 2, 3, \dots$ iterativ berechnen:

Für $k = 0, 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned}u_i^{k+1} &= u_i^k + \frac{\tau}{h^2}(u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k) \\ &= \frac{\tau}{h^2}u_{i+1}^k + \left(1 - 2\frac{\tau}{h^2}\right)u_i^k + \frac{\tau}{h^2}u_{i-1}^k\end{aligned}$$

u_i^{k+1} entsteht also durch gewichtete Mittelung aus $u_{i+1}^k, u_i^k, u_{i-1}^k$.