Numerische Ableitung

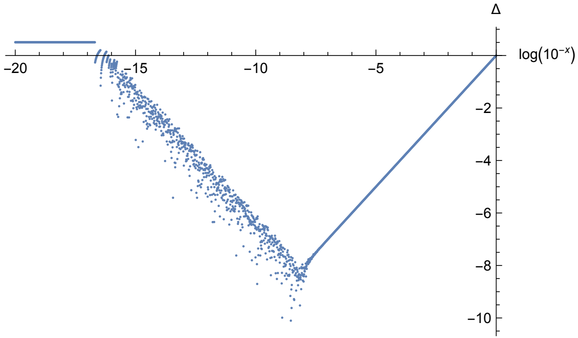
Definition der Ableitung über

$$\begin{aligned} f'(x) &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x+\epsilon) - f(x)}{\epsilon} && \text{Vorwärtsableitung} \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x) - f(x-\epsilon)}{\epsilon} && \text{Rückwärtsableitung} \end{aligned}$$

Naive Approximation

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\epsilon) - f(x)}{\epsilon} \tag{1}$$

Je kleiner ϵ umso besser die Aproximation.
Wie gut ist die Näherung?



Rundungsfehler spielen eine Rolle!
Geplottet ist absolute Differenz zw. Näherung und Ableitung, im log-log Plot.

Taylorreihe

Sei $f(x)$ eine ∞-fach stetig differenzierbare Funtkion, dann heißt die unendliche Reihe

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n \tag{2}$$

Taylorreihe.
Formale Definition ohne Betrachtung der Reihenkonvergenz.
Die Partialsumme

$$T_n(f, x_0) = \sum_{i=0}^{n} \frac{f^{(i)}(x_0)}{i!}(x - x_0)^i \tag{3}$$

heißt Taylorpolynom

Taylorreihe

Sie $f(x)$ eine $(n+1)$-fach stetig differenzierbare Funktion, dann gilt

$$f(x) = T_n(f, x_0) + R_n(f, x_0) \tag{4}$$

wobei

$$R_n(f, x_0) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{(n+1)} \tag{5}$$

mit $\xi \in [x_0, x]$.
Für die Näherung zur Ableitung schreiben wir

$$\begin{aligned} f(x+\epsilon) &= T_1(f, x) + R_1(f, x) && (6) \\ &= f(x) + f'(x)\epsilon + \frac{f''(\xi)}{2!}\epsilon^2 && (7) \end{aligned}$$

$$\left| \frac{f(x+\epsilon) - f(x)}{\epsilon} - f'(x) \right| = \left| \frac{f''(\xi)}{2!}\epsilon \right| \tag{8}$$

Taylorreihe

Abschätzung über $f(\xi) \leq \max\limits_{x \in [x, x+\epsilon]} f(x)$

$$\left| \frac{f(x+\epsilon) - f(x)}{\epsilon} - f'(x) \right| \leq \left| \frac{\epsilon}{2} \max_{x \in [x, x+\epsilon]} f''(x) \right| \tag{9}$$

Die Näherung ist $\mathcal{O}(\epsilon^1)$.
Kann man das verbesseren?

$$f(x+\epsilon) = f(x) + f'(x)\epsilon + \frac{f''(x)}{2}\epsilon^2 + \frac{f'''(\xi_+)}{3!}\epsilon^3 \tag{10}$$

$$f(x-\epsilon) = f(x) - f'(x)\epsilon + \frac{f''(x)}{2}\epsilon^2 - \frac{f'''(\xi_-)}{3!}\epsilon^3 \tag{11}$$

$$f(x+\epsilon) - f(x-\epsilon) = 2f'(x)\epsilon + \left(\frac{f'''(\xi_+)}{6} + \frac{f'''(\xi_-)}{6} \right) \epsilon^3 \tag{12}$$

wobei $\xi_+ \in [x, x+\epsilon]$ und $\xi_- \in [x-\epsilon, x]$.

$$\frac{f(x+\epsilon)-f(x-\epsilon)}{2\epsilon} - f'(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{f'''(\xi_+)}{6} + \frac{f'''(\xi_-)}{6}\right)\epsilon^2 \qquad (13)$$

Wenn $f'''(x)$ stetig auf $[x-\epsilon, x+\epsilon]$ dann gilt (Zwischenwertsatz)

$$f'''(\xi) = \frac{1}{2}\left(f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)\right) \qquad (14)$$

Damit ist

$$\frac{f(x+\epsilon)-f(x-\epsilon)}{2\epsilon} - f'(x) = \frac{1}{6}f'''(\xi_+)\epsilon^2 \qquad (15)$$

Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon^2)$. Weitere Verbesserung mittels weiterer Entwicklungspunkte.

Rundungsfehler

Berechnung zur Präzision ϵ_0, d.h

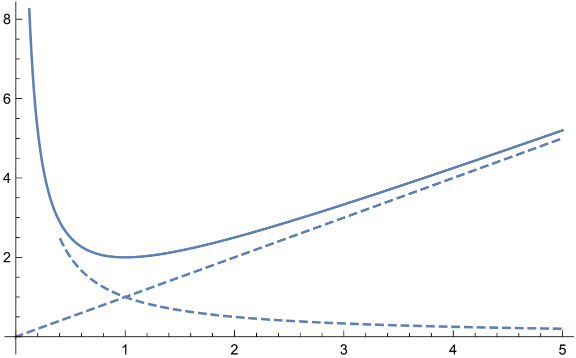
$$\overline{f(x)} = f(x)(1+\epsilon) = f(x) \quad \forall \epsilon < \epsilon_0 \tag{16}$$

Aus der Taylorabschätzung folgt

$$\frac{\overline{f(x+\delta)} - \overline{f(x)}}{\delta} - f'(x) = \frac{f''(\xi)}{2}\delta \tag{17}$$

$$\frac{f(x+\delta)(1+\epsilon_1) - f(x)(1+\epsilon_2)}{\delta} - f'(x) = \frac{f''(\xi)}{2}\delta \tag{18}$$

$$\frac{f(x+\delta) - f(x)}{\delta} - f'(x) = \frac{f''(\xi)}{2}\delta - \frac{\epsilon_1 f(x+\delta) - \epsilon_2 f(x)}{\delta} \tag{19}$$


8
6
4
2
1
2
3
4
5

Eulerverfahren

Lösung von AWP

$$f'(x) = \frac{df}{dx} = g(x, f(x)) \quad , \quad f(x_0) = f_0 \tag{20}$$

für $x > x_0$
Vergleich Richutngsfeld. Schreibe die Taylorreihe von $f(x+h)$ um x

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \mathcal{O}(h^2) \tag{21}$$
$$\text{Benutze erste Gleichung} \tag{22}$$
$$\Rightarrow f(x+h) = f(x) + hg(x, f(x)) + \mathcal{O}(h^2) \tag{23}$$

Vernachlässige Diskretisierungsfehler der Ordnung $\mathcal{O}(h^2)$

Eulerverfahren

$$f_{n+1} = f_n + hg(x_n, f_n) + \mathcal{O}(h^2)$$

- Explizites Einschritt-Verfahren, d.h. f_{n+1} hängt nur von f_n ab.
- Einfachstes Verfahren hat den Diskretisieurngsfehler Fehler $\mathcal{O}(h^2)$. Teile das Intervall in N Schritte der Breite h auf.

$$N \cdot h = \Delta$$
$$N = \frac{\Delta}{h}$$

  Damit ist der globale Fehler nach N Schritten (grobe Abschätzung)

$$N\mathcal{O}(h^2) = \frac{\Delta}{h}\mathcal{O}(h^2) \approx \mathcal{O}(h)$$

- Implizites Eulerverfahren

$$f_{n+1} = f_n + hg(x_{n+1}, f_{n+1}) \tag{24}$$

  Erfordert lösen einer Gleichung

Was meinen wir mit lokalem und globalem Fehler?

- Lokaler Fehler ist der Fehler des Verfahrens nach einem Schritt

$$\epsilon_n(h) = y_n - f_n^*$$

  mit y der exakten Lösung und f^* wenn von der exakten Lösung ein Schritt addiert wird

- Globaler Fehler beinhaltet den Fehler der vorherigen Diskretisierungschritte

$$\epsilon(h) = \max_{n=0,\ldots,N_h} |\epsilon_n(h)|$$

- Ein Verfahren heisst konsistent von der Ordnung, wenn für ein $p \geq 1$

$$\epsilon_n(h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$$

Globale Konvergenz Eulerverfahren

$$e_n = f_n - y_n \tag{25}$$
$$= f_n - f_n^* - (y_n - f_n^*) \tag{26}$$

wobei

$$f_n^* = y_{n-1} + hg(x_{n-1}, y_{n-1}) \tag{27}$$

Fehler in einem Schritt:

$$\begin{aligned} f_n^* - f_n &= y_{n-1} + hg(x_{n-1}, y_{n-1}) - f_{n-1} + hg(x_{n-1}, f_{n-1}) \\ &= e_{n-1} + h\left(g(x_{n-1}, y_{n-1}) - g(x_{n-1}, f_{n-1})\right) \end{aligned}$$

Annahme $g(x, f(x))$ Lipschitzstetig in 2. Argument, d.h.

$$|g(x_n, f(x_n)) - g(x_n, h(x_n))| \le L|f(x_n) - h(x_n)|$$

Einsetzen

$$|f_n^* - f_n| \le |e_{n-1}|(1 + hL)$$

Damit gilt als Abschätzung

$$
\begin{aligned}
|e_n| &\leq |f_n - f_n^*| + |y_n - f_n^*| & (28)\\
&\leq |e_{n-1}|(1 + hL) + \epsilon_n & (29)
\end{aligned}
$$

wobei der lokale Fehler für Euler $\epsilon_n = Ch^2$ mit $C = \max f''(x)/2$
Benutze

$$
\begin{aligned}
a_{n+1} &\leq a_n(1 + hL) + Ch^2 & (30)\\
\Rightarrow a_n &\leq \frac{C}{L} h\left((1 + hL)^n - 1\right) & (31)
\end{aligned}
$$

Benutze $(1 + x)^n < e^{nx}$

$$
\begin{aligned}
|e_n| &\leq \frac{C}{L} h(e^{nhL} - 1) & (32)\\
&\leq \frac{C}{L} h(e^{TL} - 1) & (33)
\end{aligned}
$$

mit $T = Nh$

Rundungsfehler, d.h. $f_n(1+\varepsilon) = \bar{f} = f$

$$|e_n| \leq \frac{\varepsilon}{h} \frac{C}{L} (e^{TL} - 1) \tag{34}$$

- h zu groß, dann wird Fehler $\mathcal{O}(h^p)$ zu gross
- h zu klein, Rundungsfehler wird wichtig

Runge-Kutta-Verfahren

Verbesserung des Eulerverfahren $\rightarrow$ Nutze mehrere Stützpunkte
Allgmeiner Ansatz:

$$f_1 = f_0 + ak_1 + bk_2 \tag{35}$$

$$\text{mit} \tag{36}$$

$$k_1 = hg(x_0, f_0) \tag{37}$$

$$k_2 = hg(x_0 + \alpha h, f_0 + \beta k_1) \tag{38}$$

Ansatz mit 4 Parametern: a, b, α, β.
Ziel wähle Parameter so, dass möglichst viele Terme der Taylorreihe von $f(x)$ mit dem Ansatz übereinstimmen.

Runge-Kutta-Verfahren

Schreibe Taylorreihe der exakten Lösung $f(x)$

$$f_1 = f(x_1) = f_0 + hf_0' + \frac{h^2}{2} f_0'' + \frac{h^3}{6} f_0''' + \mathcal{O}(h^4) \tag{39}$$

$$\text{mit} \tag{40}$$

$$f_0' = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_0} = g(x_0, f_0) \equiv g_0 \tag{41}$$

$$f_0'' = \left.\frac{dg}{dx}\right|_{x_0} = \left.\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial f}\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_0} \tag{42}$$

Einsetzen in Taylorreihe der exakten Lösung

$$\Rightarrow f_1 = f(x_1) = f_0 + hg(x_0, f_0) + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial f} g_0\right) \mathcal{O}(h^3) \tag{43}$$

Runge-Kutta-Verfahren

Schreibe Taylorreihe des Ansatzes

$$f_1 = f_0 + ahg(x_0, f_0) + bhg(x_0 + \alpha h, f_0 + \beta h f_0) \qquad (44)$$

Allgemein Taylorreihe in mehreren Dimensionen

$$g(x_0 + \delta x, f_0 + \delta f) = g(x_0, f_0) + \delta x \left.\frac{\partial g}{\partial x}\right|_{x_0, f_0} + \delta f \left.\frac{\partial g}{\partial f}\right|_{x_0, f_0} \qquad (45)$$

$$g(\vec{r} + \vec{h}) = \sum_m \left(\vec{h}\vec{\nabla}\right)^m g(\vec{r}) \cdot \frac{1}{m!} \qquad (46)$$

Damit folgt für den Ansatz

$$f_1 = f_0 + ahg_0 + bh\left[g_0 + \alpha h \frac{\partial g}{x}|_{x_0} + \beta h g_0 \frac{\partial g}{\partial f_0}\right] + \mathcal{O}(h^3) \qquad (47)$$

$$f_1 = f_0 + h\left(ag_0 + bg_0\right) + h^2\left(\alpha b \frac{\partial g}{x}|_{x_0} + \beta b \frac{\partial g}{\partial f_0} g_0\right) \qquad (48)$$

Runge-Kutta-Verfahren

Koeffizientenvergleich

$$\mathcal{O}(h) : f_0 = (a+b) f_0 \tag{49}$$

$$\mathcal{O}(h^2) : \frac{1}{2}\left(\frac{\partial g}{\partial x_0} + \frac{\partial g}{\partial f_0} g_0\right) = \alpha b \frac{\partial f}{\partial x_0} + \beta b \frac{\partial g}{\partial f_0} g_0 \tag{50}$$

$$\tag{51}$$

Hieraus folgt

$$a + b = 1 \tag{52}$$

$$\alpha b = \frac{1}{2} \tag{53}$$

$$\beta b = \frac{1}{2} \tag{54}$$

3 Gleichungen mit 4 Unbekannten.

Runge-Kutta-Verfahren

Weitere Bedingung notwendig:
Steigung wird im Intervall-Mittelpunkt bestimmt

$$a = 0, \quad b = 1 \rightarrow \alpha = \beta = \frac{1}{2} \tag{55}$$

$$f_1 = f_0 + hg(x_0 + \frac{h}{2}, f_0 + \frac{h}{2}g(x_0, f_0)) + \mathcal{O}(h^3) \tag{56}$$

Es wird die mittlere Steigung genommen

$$a = b = \frac{1}{2} \rightarrow \alpha = \beta = 1 \tag{57}$$

$$f_1 = f_0 + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) + \mathcal{O}(h^3) \tag{58}$$

$$k_1 = hg(x_0, f_0) \tag{59}$$

$$k_2 = hg(x_0 + h, f_0 + k1) \tag{60}$$

Runge-Kutta

Lokaler Fehler $\mathcal{O}(h^3)$, globaler Fehler $\mathcal{O}(h^2)$.
Allgemein s-stufiges Verfahren

$$f_{n+1} = f_n + h \sum_{j=1}^{s} b_j k_j$$

mit k_j Zwischenschritten.

$s = 1$ Eulerverfahren

$s = 2$ Heunverfahren oder modifiziertes Eulerverfahren

$s = 4$ klassisches Runge-Kutta

RUKU-4

$$f_{n+1} = f_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + \mathcal{O}(h^5) \tag{61}$$

$$k_1 = hg(x_0, f_0) \quad , \quad k_2 = hg(x_0 + \frac{h}{2}, f_0 + \frac{k_1}{2}) \tag{62}$$

$$k_3 = hg(x_0 + \frac{h}{2}, f_0 + \frac{k_2}{2}) \quad , \quad k_4 = hg(x_0 + h, f_0 + k_3) \tag{63}$$

Systeme gekoppelter DGL 1. Ordnung

Z.B.

$$
\begin{aligned}
y'(x) &= g(x, y, z) \quad , \quad y(x_0) = y_0 \\
z'(x) &= f(x, y, z) \quad , \quad z(x_0) = x_0
\end{aligned}
$$

Euler Schreibe Linearisierung zu

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + hg(x_n, y_n, z_n) \\
z_{n+1} &= z_n + hf(x_n, y_n, z_n)
\end{aligned}
$$

RUKU2

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hg(x_n, y_n, z_n) \quad , k_2 = hg(x_n + h, y_n + k_1, z_n + l_1) \\
l_1 &= hf(x_n, y_n, z_n) \quad , l_2 = hf(x_n + h, y_n + k_1, z_n + l_1) \\
y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \quad , \quad z_{n+1} = z_n + \frac{1}{2}(l_1 + l_2)
\end{aligned}
$$

DGL n-ter Ordnung $\rightarrow$ n DGL 1. Ordnung

Z.B.

$$y''(x) = f(x, y, y') \quad , \quad y(x_0) = y_0 \quad , \quad y'(x_0) = y'_0$$

zurückführen auf 2 gekoppelte DGL 1. O.

$$\begin{aligned} y'(x) &= g(x, y, z) = z \quad , \quad y(x_0) = y_0 \\ z'(x) &= f(x, y, z) \quad , \quad z(x_0) = y'_0 \\ \Rightarrow y''(x) = z'(x) &= f(x, y, z) \end{aligned}$$

usw

Schrittweitensteuerung

Einfache Methode
Bestimme f_{n+1} und $\widehat{f}_{n+1}$ mit halber Schrittweite (dafür zwei Schritte)

$$f_{n+1} = f_n + hg \tag{64}$$

$$\widehat{f}_{n+1} = \underbrace{f_n + \frac{h}{2} g(x_n, f_n)}_{f_{n+1/2}} + \frac{h}{2} g(x_n + h/2, f_{n+1/2}) \tag{65}$$

Vergleich die Werte mit vorgegebener Toleranz T

$$\epsilon = \left| \widehat{f}_{n+1} - f_{n+1} \right| \tag{66}$$

1. $\epsilon < 0.1T$ dann weiter mit 2h im nächsten Schritt
2. $0.1T < \epsilon < T$ dann weiter mit h
3. $\epsilon > T$ dannn weiter mit h/2

Schrittweitensteuerung

Allgemein Methode
Bestimme f_{n+1} und $\widehat{f}_{n+1}$ auf zwei Arten. Allgemein ist der Fehler maximal

$$\epsilon = \left| \widehat{f}_{n+1} - f_{n+1} \right| = Ch^p \tag{67}$$

bei einem Verfahren der Ordnung p.
Bestimme h, so das

$$C\tilde{h}^p = T \tag{68}$$

$$\Rightarrow \frac{e}{h^p}\tilde{h}^p = T \tag{69}$$

$$\Rightarrow \tilde{h}^p = h\left(\frac{T}{\epsilon}\right)^{1/p} \tag{70}$$

Nehme im nächsten Schritt neues h.
Verfeinerung durch Maximale/Minimale Schrittweitenänderungen

Schreibe Lösung des AWP in Integraldarstellung

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} g(t, y(t))$$

Allgemein schreibt man das s-stufige Verfahren

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{s} b_j k_j$$

s-stufiges Einschrittverfahren wobei b_j als Gewichte der Quadraturformel von $\int_{t_n}^{t_{n+1}} g(t, y(t))$ angesehen werden können.