§56: NUMERISCHE DIFFERENTIATION

56.1. Motivation

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

Beispiele:

a) Geschwindigkeitsmessung durch die Polizei

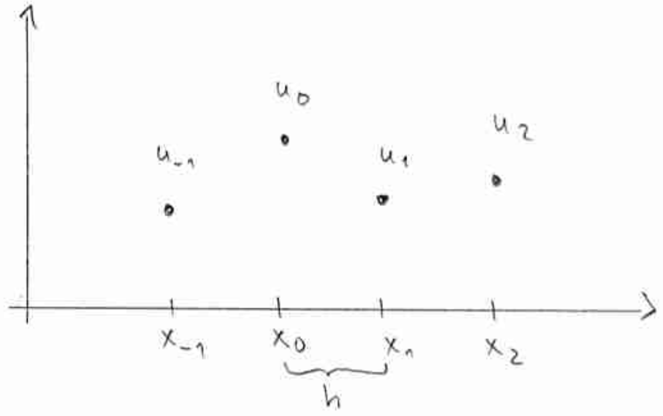
b) Temperaturänderungen an einer Meßstation

c) Scannen von Personen mit einem 3D-Scanner

Zur Bestimmung von geeigneten numerischen Approximationsformeln und deren Genauigkeit wird der Satz von Taylor angewandt

56.2. Problembeschreibung (zunächst für Funktionen einer Variablen)

Ann.: Von einer kontinuierlichen Funktion $u(x)$ sind nur die Funktionswerte auf einem äquidistanten Gitter $\Gamma := \{ x_i \mid x_i = ih,\ i \in \mathbb{Z} \}$ bekannt



$u_i = u(x_i) \qquad i \in \mathbb{Z}$

h heißt die <u>Gitterweite</u> von Γ.

Ges.: Approximation an eine Ableitung $u^{(k)}$ an einer Stelle ξ (die nicht unbedingt auf dem Gitter liegen muss) mit Hilfe der 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, so dass

$$u_i'' \approx \alpha u_{i-1} + \beta u_i + \gamma u_{i+1}$$

Der Approximationsfehler soll dabei höchstens $O(h)$ betragen.

Lösung:

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

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

$$\begin{aligned}
&\alpha u_{i-1} + \beta u_i + \gamma u_{i+1} \\
= \;& \alpha \left(u_i - h u_i' + \tfrac{1}{2} h^2 u_i'' + O(h^3) \right) \\
& + \beta \; u_i \\
& + \gamma \left(u_i + h u_i' + \tfrac{1}{2} h^2 u_i'' + O(h^3) \right) \\
= \;& u_i \, (\alpha + \beta + \gamma) + u_i' (-h\alpha + h\gamma) + u_i'' \left(\tfrac{h^2}{2}\alpha + \tfrac{h^2}{2}\gamma \right) + O(h^3)
\end{aligned}$$

Da dies mit $u_i'' = 0 \cdot u_i + 0 \cdot u_i' + 1 \cdot u_i''$ übereinstimmen soll, liefert ein Koeffizientenvergleich das lineare Gleichungssystem

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

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

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

$\Rightarrow \quad \gamma = \frac{1}{h^2}$

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

Also gilt: $\boxed{u_i'' \approx \frac{1}{h^2}\left(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}\right)}$

Wie genau ist dies Approximation?

Mit der ausführlicheren Taylorentwicklung

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

folgt durch Einsetzen:

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

Der führende Fehlerterm hat also die Ordnung $O(h^2)$.

Man sagt, die Approximation

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

hat die Konsistenzordnung $O(h^2)$:

$$
u_i'' = \frac{1}{h^2}\left(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}\right) + O(h^2)
$$

56.4. Anmerkungen

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

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:

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

die Approximation der Ordnung $O(h)$:

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

Entwickelt man u_i, u_{i+1} um $x_{i+1/2}$:

$$u_{i+1} = u_{i+1/2} + \frac{h}{2} u'_{i+1/2} + \frac{1}{2} \frac{h^2}{4} u''_{i+1/2} + \frac{1}{6} \frac{h^3}{8} u'''_{i+1/2} + O(h^4)$$

$$u_i = u_{i+1/2} - \frac{h}{2} u'_{i+1/2} - \frac{1}{2} \frac{h^2}{4} u''_{i+1/2} - \frac{1}{6} \frac{h^3}{8} u'''_{i+1/2} + O(h^4)$$

ergibt sich eine $O(h^2)$-Approximation:

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

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

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

$$u_i' = \frac{-u_{i+2} + 8 u_{i+1} - 8 u_{i-1} + u_{i-2}}{12h} + O(h^4)$$

d) Wichtige Approximationen:

erste Ableitung:

$$u_i' = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + O(h)$$ Vorwärtsdifferenz

$$u_i' = \frac{u_i - u_{i-1}}{h} + O(h)$$ Rückwärtsdifferenz

$$u_i' = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + O(h^2)$$ zentrale Differenz

zweite Ableitung

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

e) Will man partielle Ableitungen einer Funktion mehrerer Variablen approximieren, benötigt man oft eine Taylorentwicklung in mehreren Variablen (d.h. Satz 55.6):

Beispiel:

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

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

Manchmal hat man aber das Glück, dass eindim. Taylorentwicklungen längs der Koordinatenachsen ausreichen:

Beispiel:

$$\Delta u|_{i,j} = \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right|_{i,j}$$

$$= \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2}$$

$$+ O(h^2 + k^2).$$

56.5. Anwendung auf die Diskretisierung von Differentialgleichungen

Ersetzt man die Ableitungen durch Differenzenapproximationen, 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 numerisch approximiert werden.

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

$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_i^k = \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} + O(\tau)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i^k = \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{h^2} + O(h^2)$$

verwenden. Damit 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 unbekannten Werte der Schichten $k = 1, 2, \ldots$ iterativ berechnen:

Für $k = 0, 1, 2, \ldots$

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

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