Gruppe 2:

Veresa Eybl – 0306011
Christoph Saulder - 0400944

Vorübungen

1. Teil

Tabellen siehe Anhang 1 und 2

2. Teil

Mathematischer Hintergrund

Häufig ist es notwendig die Ableitung einer Funktion auf numerischen Weg zu berechnen. Dafür bietet sich der aus der Herleitung der analytischen Differentiation wohlbekannte Differenzenquotient an. Die einfachste Form ist der Vorwärtsdifferenzenquotient (einseitige numerische Differentiation):

(1) $f'_{num}(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$

Ein genaueres Verfahren bietet die Verwendung des zentralen Differenzenquotienten:

(2) $f'_{num} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$

Um die Genauigkeit des verwendeten numerischen Verfahrens festzustellen berechnet man den relativen Fehler:

(3) $r = \frac{|f'_{ex}(x) - f'_{num}(x)|}{|f'_{ex}(x)|}$

Dieser liefert ein Maß für die Abweichung des numerisch errechneten Werts vom analytisch exakten Funktionswert. Da er auf den exakten Wert normiert ist, ist der relative Fehler unabhängig vom für die Berechnung verwendeten Wert und somit vergleichbar.

Programmierung

Quellcode siehe Anhang 3 bis 6

Auswertung

Ziel der Übung war der Vergleich von verschiedenen Methoden der numerischen Differentiation bei Verwendung unterschiedlicher Datentypen. Dazu wurde die numerische

Ableitung der Funktion $f(x) \equiv \sin(x)$ an der Stelle $x = 5.0$ bestimmt und mit dem Wert der analytischen Ableitung $f'(x) = \cos(x)$ mittels Berechnung des relativen Fehlers verglichen.

Zuerst wurden die Berechnungen mit der einfachsten Methode des Vorwärtsdifferenzenquotienten durchgeführt und eine Tabelle mit dem relativen Fehler r als Funktion der Schrittweite h erstellt. Die Schrittweite variierte dabei in einem Intervall von $[10^{-6}, 2\times10^{-6}, 4\times10^{-6}, \ldots, \sim1]$.

Bei kleiner werdender Schrittweite nimmt die Genauigkeit stetig zu bis sie eine maximalen Wert erreicht. Dies entspricht einer Abnahme des relativen Fehlers bis auf ein Minimum (siehe Abb. 1). Ab dort macht sich der Einfluss der begrenzten Maschinengenauigkeit bemerkbar und die Genauigkeit nimmt hin zu noch kleineren Schrittweiten ab. In diesem Bereich können die für die Berechnung benötigten Werte nicht mehr in ausreichender Nachkommagenauigkeit dargestellt werden, wodurch es zu Rundungsfehlern in schon relevanten Stellen kommt.
Die maximale Genauigkeit bei der Verwendung von Variablen des REAL-Typs liegt dabei bei einem relativen Fehler von $5{,}5830\times10^{-4}$. Dieser tritt bei einer Schrittweite von $2{,}56\times10^{-4}$ auf.

Bei der Verwendung derselben Methode und Schrittweite und einer Erhöhung der Genauigkeit auf DOUBLE PRECISION ist die maximale Genauigkeit deutlich höher, sodass sie bei den für die Berechnung verwendeten Schrittweiten noch kein Maximum erreicht (Abb.1). Nach einer Erweiterung des Schrittweitenbereiches auf einen Bereich bis zu 10^{-14} (Schrittweiten in einem Intervall von $[10^{-14}, 10^{-13}, \ldots, 0.1, 1.0]$) finden wir die maximale Genauigkeit für DOUBLE PRECISION Variablen bei einem relativen Fehler von $5{,}5556\times10^{-9}$, welcher einer Schrittweite von 10^{-8} entspricht (siehe Abb. 2).
Qualitativ zeigt sich der gleiche Effekt wie schon bei REAL Variablen, nur dass diesmal die maximal erzielbare Genauigkeit bei kleineren Schrittweiten liegt und größer ist.

Wenig überraschend zeigt sich dass die Methode des zentralen Differenzenquotienten (Formel 2) genauer ist, wobei die maximal erreichbare Genauigkeit schon bei größeren Schrittweiten als beim ersten Verfahren auftritt (siehe Abb.2). Die Genauigkeit nimmt danach wieder ab und diese Abnahme verläuft dann parallel zu der des einseitigen Verfahrens. Hierbei ist anzumerken, dass die Genauigkeit des zentralen Differenzenquotienten bei der Schrittweite, bei der das Verfahren des Vorwärtsdifferenzenquotienten seine maximale Genauigkeit hat, fast denselben relativen Fehler und somit dieselbe Genauigkeit hat.

Die optimale Schrittweite für die numerische Differentiation hängt vom gewählten Verfahren ab. Die optimale Schrittweite für den Vorwärtsdifferenzenquotienten liegt bei etwa 10^{-8}, während sie beim zentralen Differenzenquotienten schon bei 10^{-5} liegt. Es ist daher zu empfehlen, die Methode des zentralen Differenzenquotienten zu bevorzugen, da sie eine höhere Genauigkeit bietet und diese bereits bei größeren Schrittweiten erreicht wird.

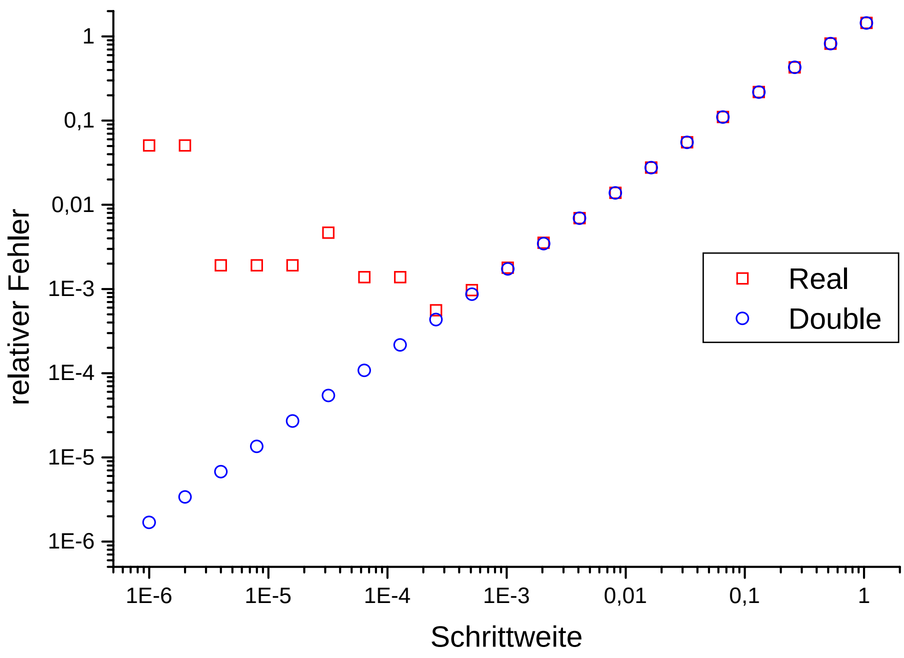

Abb.1: Vergleich des relativen Fehlers in Abhängigkeit der Schrittweite für REAL und DOUBLE PRECISION Variablen.

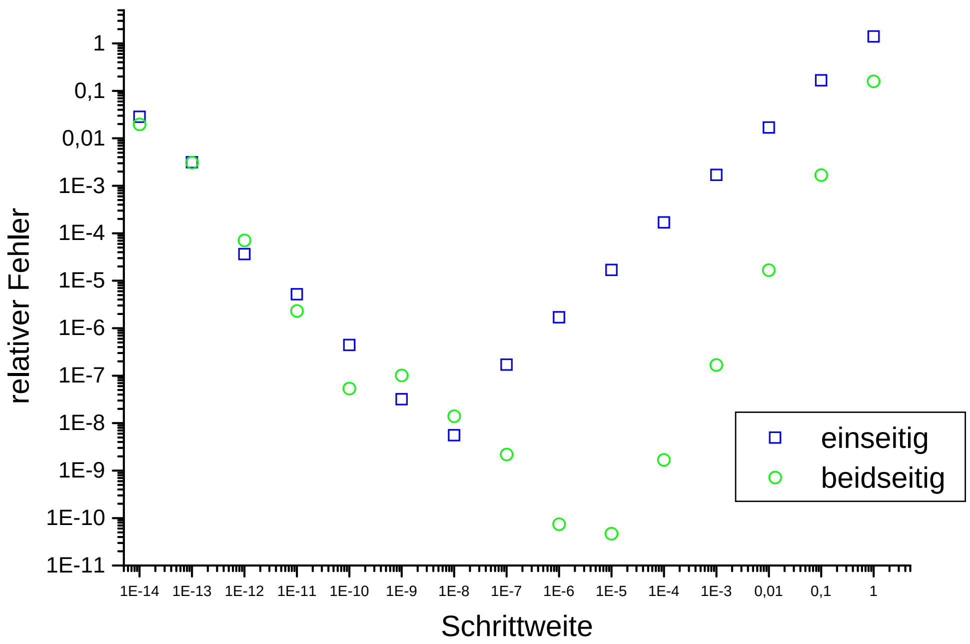

Abb.2: Vergleich des relativen Fehlers in Abhängigkeit der Schrittweite für einseitige und beidseitige numerische Differentiation.