101.405 Einführung in Scientific Computing Dienstag, 16.03.2010
Dirk Praetorius
Michael Karkulik

Übung 1

Aufgabe 1. Überlegen Sie sich folgendes: Sie haben ein Gesetz der Form

$$e(N) = C \cdot N^{-\alpha} \quad \text{mit } \alpha > 0,$$

wobei $C > 0$ unabhängig von N und α ist.
Die Funktion e beschreibt zum Beispiel den Fehler in einem numerischen Verfahren, in diesem Fall nennt man α die Konvergenzrate. Angenommen, sie können Experimente mit verschiedenen Werten von N machen, wie können sie α experimentell bestimmen?
Konvergenzraten werden in der Numerik üblicherweise mit Hilfe von Konvergenzgraphen visualisiert. Dazu macht man Experimente mit verschiedenen N und plottet die Resultate auf einer doppelt logarithmischen Skala (in Matlab mit dem Befehl `loglog`). Wie können sie in einem solchen Plot α erkennen?

Aufgabe 2. Die Gaussquadratur auf $(-1, 1)$ mit dem Gewicht $w = 1$ nennt man *Gauss-Legendre-Quadratur*. Schreiben Sie eine Funktion `[nodes,weights] = gauss(n,varargin)`, die für `n`$\in \mathbb{N}$ die Knoten und Gewichte der `n`-Punkt Gauss-Legendre-Quadratur berechnet. Dabei soll `nodes` ein Spaltenvektor und `weights` ein Zeilenvektor sein.
Optional können Parameter `a`$\in \mathbb{R}$ und `b`$\in \mathbb{R}$ übergeben werden, d.h.: `[nodes,weights]=gauss(n)` liefert die Knoten auf dem Intervall $[-1, 1]$, `[nodes,weights]=gauss(n,a,b)` liefert die Knoten auf dem Intervall $[a, b]$.

Zur Bestimmung der Knoten und Gewichte verwenden Sie den Satz von *Golub-Welsh*:

Satz 1. *Die Eigenwerte der Matrix*

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -\beta_1 & 0 & \dots & 0 \\ -\beta_1 & 0 & -\beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & -\beta_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\beta_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & -\beta_{n-1} & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

mit $\beta_k := \frac{k}{\sqrt{4k^2-1}}$, *sind die Knoten der* n*-Punkt Gauss-Legendre Quadratur. Sei* $v^{(i)}$ *der normierter Eigenvektor zum Eigenwert* λ_i. *Die Gewichte* w_i *sind gegeben durch*

$$w_i = 2\frac{(v_1^{(i)})^2}{\|v^{(i)}\|_2^2}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Aufgabe 3. Es sei

$$x_i = a + i \cdot h, \quad i = 0, \dots, N, \quad h = \frac{b-a}{N}$$

ein äquidistantes Gitter auf dem Intervall $[a, b]$, und $n \in \mathbb{N}$. Es bezeichne $Q_{N,n}^{[a,b]}$ die summierte n-Punkt Gauss-Legendre-Quadratur auf $[a, b]$.

Implementieren Sie mit Hilfe von Aufgabe 2 diese Quadraturregel. Schreiben sie dazu eine Funktion `hGauss`, welche als Parameter einen Funktionspointer `f`, die Intervallendpunkte a und b, die Ordnung n und die Anzahl der Teilintervalle N bekommt.
Die Funktion soll den berechneten Integralwert sowie die Anzahl der Funktionsauswertungen zurückliefern. Berechnen Sie die Gausspunkte nur einmal auf dem Intervall $[-1, 1]$, und transformieren sie entsprechend.

Aufgabe 4. Machen Sie nun numerische Experimente. Dazu betrachten Sie die beiden Funktionen $f_1(x) = \exp(x)$ und $f_2(x) = x^{0.1}$ auf dem Intervall $(0, 1)$.

4.1 Sei $Q(f)$ das Integral von f. Dann gilt

$$|Q_{N,n}^{[a,b]}(f) - Q(f)| \leq Ch \sum_{i=0}^{N-1} \inf_{p \in \mathcal{P}_{2n-1}} \|f - p\|_{C([x_i, x_{i+1}])}$$

Proof. Auf jedem Teilintervall $I_j = [x_j, x_{j+1}]$ gilt

$$|Q_n^j(f) - \int_{I_j} f| \leq 2h_j \inf_{2n-1} \|f - p\|_{C(I_j)},$$

dies folgt aus dem Lemma auf Seite 2A unten, und der Tatsache das n-Punkt Gaussquadratur exakt auf $\mathcal{P}_{2n-1}$ ist. Summation und Dreiecksungleichung liefern die Abschätzung. □

Welche maximale Konvergenzrate in N können Sie für fixe Ordnung n erwarten?
Berechnen Sie für $n = 1, 2, 3$ und $N = 2^i$, $i = 0, \ldots, 9$, die Integrale von f_1 und f_2 mit der summierten Gaussregel aus Aufgabe 3, wobei N die Anzahl der Teilintervalle angibt und n die Ordnung.

Welche Konvergenzraten erwarten Sie für f_1 und f_2?
Plotten Sie die absoluten Fehler doppelt logarithmisch gegen die Anzahl der Funktionsauswertungen. Was beobachten Sie? Stimmt die experimentelle Beobachtung mit ihrer Erwartung überein?

4.2 Berechnen Sie für $n = 1, \ldots, 5$ die Integrale von f_1 und f_2 mit der einfachen Gaussregel aus Aufgabe 2, wobei n die Ordnung angibt. Plotten Sie die absoluten Fehler wieder doppelt logarithmisch gegen die Anzahl der Funktionsauswertungen. Was beobachten Sie?

Aufgabe 5. Das Aitkinsche Δ^2-Verfahren ist ein Verfahren zur Konvergenzbeschleunigung. von Folgen. Es sei $(x_j)_{j\in\mathbb{N}}$ eine konvergente Folge mit Grenzwert $x \in \mathbb{R}$. Ziel ist die Konstruktion einer Folge $(y_j)_{j\in\mathbb{N}}$, sodass gilt

$$\lim_{j\to\infty} \frac{y_j - x}{x_j - x} = 0,$$

also $(y_j)_{j\in\mathbb{N}}$ konvergiert schneller als $(x_j)_{j\in\mathbb{N}}$. Es gilt folgender Satz:

Satz 2. *Die Folge $(x_j)_{j\in\mathbb{N}}$ erfülle $x_j \neq x$ und $x_{j+1} - x = (k + \delta_j)(x_j - x)$ mit einer Nullfolge $(\delta_j)_{j\in\mathbb{N}}$ und $|k| < 1$. Dann gilt $\lim_{j\to\infty} x_j = x$. Ferner existiert ein Index $j_0 \in \mathbb{N}$, sodass*

$$y_j := x_j - \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{x_{j+2} - 2x_{j+1} + x_j}$$

für alle $j > j_0$ wohldefiniert ist. Es gilt dann

$$\lim_{j\to\infty} \frac{y_j - x}{x_j - x} = 0.$$

Programmieren Sie das Aitkinsche Verfahren. Dazu schreiben Sie eine Funktion `y = aitkin(x)`, welche aus dem Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ den Vektor $y \in \mathbb{R}^{n-2}$ laut Satz 2 erzeugt.
Wiederholen Sie die Experimente aus Aufgabe 4.1: die Einträge des Vektors x seien die absoluten Fehler zu $N = 2^i$, $i = 0, \ldots, 9$. Wenden Sie das Aitkin Verfahren auf x an und plotten Sie das Resultat wieder doppelt logarithmisch gegen die Anzahl Funktionsauswertungen.