101.405 Einführung in Scientific Computing Montag, 12.03.2012
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, wobei N die Anzahl der Freiheitsgrade, die Gitterweite, der Polynomgrad usw. sein kann. Man nennt α die (algebraische) 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[1]. Dabei soll `nodes` $\in \mathbb{R}^{n\times 1}$ ein Spaltenvektor und `weights` $\in \mathbb{R}^{1\times n}$ 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 $v^{(i)}$ 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

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

[1] Im Gegensatz zur Vorlesung ist hier `n` die Anzahl der Knoten!

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 (siehe Beweis von Satz 10)

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

Welche maximale Konvergenzrate in N können Sie für fixe Ordnung n erwarten? Welche Konvergenzrate bedeutet das bezüglich der Anzahl der Funktionsauswertungen? Welche Konvergenzraten erwarten Sie für f_1 und f_2?
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.

Plotten Sie für jeweils fixes n den absoluten Fehler doppelt logarithmisch gegen die Anzahl der Funktionsauswertungen. Welche Konvergenzraten stellen sich ein? Stimmt die experimentelle Beobachtung mit ihrer Erwartung überein? Beweisen Sie ihre experimentell beobachteten Konvergenzraten mit Hilfe obiger Formel.

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 Quadraturen zu $N = 2^i$, $i = 0, \ldots, 9$. Wenden Sie das Aitkin Verfahren auf x an und plotten Sie den neuen absoluten Quadraturfehler logarithmisch gegen die Anzahl Funktionsauswertungen. Was ist die richtige Anzahl an Funktionsauswertungen für den Vektor y?