Technische Universität Hamburg-Harburg
Institut für Numerische Simulation, E-10
Dr. Jens-Peter M. Zemke

Sommersemester 2008

Numerische Verfahren

Übungen und Lösungen, Blatt 4

Aufgabe 1: (Thema: Fehlerordnung von Kronrod-Formeln.)

Nach Skript gibt es zu einer n-Punkt Gauß-Formel stets die $(2n+1)$-Punkt Kronrod-Formel mit einer minimalen Fehlerordnung von $3n+2$. Zeigen Sie, dass die Fehlerordnung für ungerades n sogar $3n+3$ beträgt (Hinweis: Nutzen Sie aus, dass die Kronrod-Formeln symmetrisch sind—d.h. $\alpha_j = \alpha_{n-j+1}$, $\beta_l = \beta_{n-l}$, $x_j = -x_{n-j+1}$ und $y_l = -y_{n-l}$, $j = 1, \ldots, n$, $l = 0, \ldots, n$, nach der Notation im Skript. Argumentieren Sie nicht unter expliziter Benutzung der angegebenen Gewichte und Knoten bzw. greifen Sie in ihren Überlegungen ggf. nur für kleine n explizit auf diese zu).

Lösung zu Aufgabe 1: Aufgrund der Symmetrie der Kronrod-Formeln werden ungerade Funktionen exakt integriert. Dies schließt insbesondere alle Monome mit ungeradem Grad ein (vgl. Skript, S. 41 oben). Ist nun n ungerade, also darstellbar als $n = 2k+1$, $k \in \mathbb{N}$, dann ist entsprechend der Information in der Aufgabenstellung die Ordnung mindestens

$$3n+2 = 3(2k+1)+2 = 6k+3+2 = 6k+5 = 2(3k+2)+1,$$

also durch eine ungerade Zahl gegeben. Dies würde aber zu einem Monom mit ungeradem Exponenten korrespondieren, welches nach obigen Symmetriebetrachtungen jedoch exakt integriert wird. Ergo steigt die Fehlerordnung um 1 auf $3n+3$.

Aufgabe 2: (Thema: Numerische Differentiation.)

Bestimmen Sie analog zu Beispiel 3.30, Seite 44 des Skriptes, für

$$h_j = 10^{-j}, \qquad j = 0, 1, \ldots, 8$$

für die beiden folgenden Formeln zur Differenzenapproximation

- Zentrale Differenzenapproximation der zweiten Ableitung, drei äquidistante Knoten:

$$f''(x_j) \approx \frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} =: \tilde{D}_2 f(x_j; h)$$

- Zentrale Differenzenapproximation der zweiten Ableitung, fünf äquidistante Knoten:

$$f''(x_j) \approx \frac{-y_{j+2} + 16y_{j+1} - 30y_j + 16y_{j-1} - y_{j-2}}{12h^2} =: \hat{D}_2 f(x_j; h)$$

die Approximationsfehler

$$\tilde{D}_2 f(x_j; h) - \frac{d}{dx^2} \cos(x)_{|x=x_j}$$
$$\hat{D}_2 f(x_j; h) - \frac{d}{dx^2} \cos(x)_{|x=x_j}$$

mit $x_j = 1$ zu verschiedenen Schrittweiten

$$h_j = 10^{-j}, \qquad j = 0, 1, \ldots, 8.$$

Plotten Sie die Ergebnisse analog zu Abbildung 3.4 und 3.5 (Seite 45) des Skriptes. Ermitteln Sie mit Hilfe des Taylorschen Satzes die Fehlerordnung $\tilde{m}$ der ersten Formel und verifizieren Sie diese am Plot. Schätzen Sie die Fehlerordnung $\hat{m}$ der zweiten Formel nur anhand des Plots.

Lösung zu Aufgabe 2:

Die erste Differenzenapproximation ist von der Ordnung 2, die zweite von der Ordnung 4. Bzgl. der ersten sieht man dies rechnerisch folgendermaßen ein: Mit $\xi_+ \in (x_j, x_j + h)$ und $\xi_- \in (x_j - h, x_j)$ ergibt sich nach Taylor (in der Notation $y_j = f(x_j)$, $f_j^\ell = f^\ell(x_j)$, $\ell \in \{', '', '''\}$)

$$y_{j\pm1} = y_j \pm f_j' h + \frac{1}{2} f_j'' h^2 \pm \frac{1}{6} f_j''' h^3 + \frac{1}{24} f^{(4)}(\xi_\pm) h^4.$$

Die Differenzenapproximation $\tilde{D}_2 f(x_j; h)$ ein wenig umgeschrieben und die Taylorterme nutzend liefert

$$\begin{aligned}
\tilde{D}_2 f(x_j; h) &= \frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} = \frac{\frac{y_{j+1}-y_j}{h} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h}}{h} \\
&= \frac{f_j' + \frac{1}{2} f_j'' h + \frac{1}{6} f_j''' h^2 + \frac{1}{24} f^{(4)}(\xi_+) h^3 - \left(f_j' - \frac{1}{2} f_j'' h + \frac{1}{6} f_j''' h^2 - \frac{1}{24} f^{(4)}(\xi_-) h^3\right)}{h} \\
&= f_j'' + \frac{1}{24}\left(f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)\right) h^2 = f_j'' + O(h^2).
\end{aligned} \tag{1}$$

Folglich besitzt die Differenzenapproximation $\tilde{D}_2 f(x_j; h)$ die Ordnung 2.

Wenn Sie sich nicht irgendwo vertippt haben, sollte Ihr Plot so ähnlich aussehen wie die Plots in Abbildung 1. Diese Plots wurden von einer leicht geänderten Version des M-Files

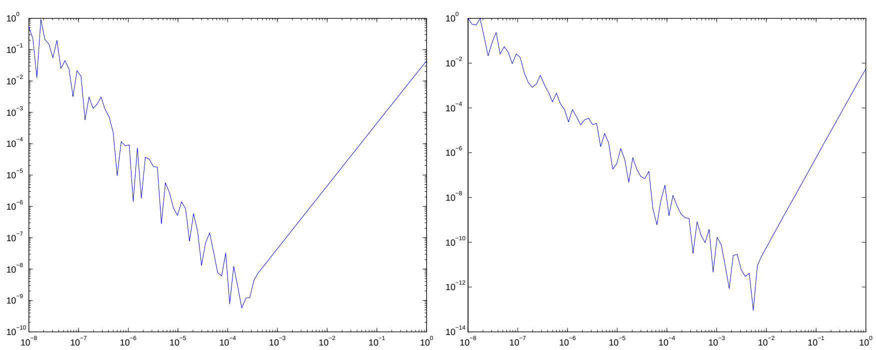

Abbildung 1: Differenzenformel Ordnung 2 / Ordnung 4

`aufg04f01_08.m` erstellt. In dem Plot, der von dem M-File `aufg04f01_08.m` geliefert wird, sind zusätzlich noch zwei rote Geraden eingezeichnet. Diese geben den in der logarithmischen Skala annähernd linearen Teil der Fehlerfunktion hinreichend gut wieder. Die Steigung dieser Geraden dient somit als Approximation für die Ordnung des jeweiligen Verfahrens. Wir bilden in beiden Fällen das Steigungsdreieck zu den Schrittweiten 10^{-1} und 10^{-2} und erhalten

$$\frac{\log(\tilde{D}_2 f(1; 10^{-1})) - \log(\tilde{D}_2 f(1; 10^{-2}))}{\log(10^{-1}) - \log(10^{-2})} \approx 1.999856815073546 \approx 2 = \tilde{m},$$

$$\frac{\log(\hat{D}_2 f(1; 10^{-1})) - \log(\hat{D}_2 f(1; 10^{-2}))}{\log(10^{-1}) - \log(10^{-2})} \approx 4.009401787257897 \approx 4 = \hat{m}.$$

Aufgabe 3: (Thema: LR-Zerlegung in endlicher Genauigkeit.) Lösen Sie das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 110 & 1 \\ 100 & 11 \end{pmatrix} \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 110 \\ 110 \end{pmatrix}$$

in zweistelliger dezimaler Fließkommazahlenarithmetik, also unter

$$\mathrm{fl}(x \circ y) := \text{Rundung des Ergebnisses von } x \circ y \text{ auf zwei Stellen}$$

für jede Operation $\circ \in \{+,-,\cdot,/\}$, es gilt also z. B.

$$\mathrm{fl}(100+10) = 110, \quad \mathrm{fl}(120+3) = 120, \quad \mathrm{fl}(120+5) = 130,$$

mittels der LR-Zerlegung.

Lösung zu Aufgabe 2:

Die LR-Zerlegung kann hier ohne Pivotisierung erfolgen, das größte Element ist bereits in der Position $(1,1)$. Da die rechte Seite bereits gegeben ist, transformieren wir die Elemente gleich mit, arbeiten also mit der Matrix $\begin{pmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{b}\end{pmatrix}$,

$$\left(\begin{array}{rr|r} 110 & 1 & 110 \\ 100 & 11 & 110 \end{array}\right).$$

Zur Berechnung des ersten und einzigen interessanten Wertes in L wird 100 durch 110 in Fließkommazahlenarithmetik geteilt,

$$\mathrm{fl}(100/110) = \mathrm{fl}(0.\overline{90}) = 0.91.$$

Nun wird, wiederum in Fließkommazahlenarithmetik, die erste Zeile mit 0.91 malgenommen,

$$\begin{aligned} \mathrm{fl}\left(0.91 \cdot \left(110 \quad 1 \mid 110\right)\right) &= \left(\mathrm{fl}(0.91 \cdot 110) \quad \mathrm{fl}(0.91 \cdot 1) \mid \mathrm{fl}(0.91 \cdot 110)\right) \\ &= \left(\mathrm{fl}(100.1) \quad \mathrm{fl}(0.91) \mid \mathrm{fl}(100.1)\right) \\ &= \left(100 \quad 0.91 \mid 100\right). \end{aligned}$$

Jetzt wird, selbstverständlich auch in Fließkommazahlenarithmetik, die so erhaltene Zeile von der zweiten Zeile abgezogen,

$$\begin{aligned} &\mathrm{fl}\left(\left(100 \quad 11 \mid 110\right) - \left(100 \quad 0.91 \mid 100\right)\right) \\ &\qquad = \left(\mathrm{fl}(100-100) \quad \mathrm{fl}(11-0.91) \mid \mathrm{fl}(110-100)\right) \\ &\qquad\qquad = \left(\mathrm{fl}(0) \quad \mathrm{fl}(10.01) \mid \mathrm{fl}(10)\right) = \left(0 \quad 10 \mid 10\right). \end{aligned}$$

Die resultierende in Fließkommazahlenarithmetik berechnete LR-Zerlegung hat demnach in Kompaktschreibweise die Form

$$\left(\begin{array}{rr|r} 110 & 1 & 110 \\ \hline 0.91 & \multicolumn{1}{|r|}{10} & 10 \end{array}\right),$$

womit wir bereits Approximationen für $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{R}$ aus $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{R}$ und $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{b}$ haben, nämlich

$$\tilde{\boldsymbol{L}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.91 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{R}} = \begin{pmatrix} 110 & 1 \\ 0 & 10 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \tilde{\boldsymbol{y}} = \begin{pmatrix} 110 \\ 10 \end{pmatrix}.$$

Um das Gleichungssystem in Fließkommazahlenarithmetik zu lösen, lösen wir das Gleichungssystem

$$\tilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 110 & 1 \\ 0 & 10 \end{pmatrix} \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 110 \\ 10 \end{pmatrix} = \tilde{\boldsymbol{y}}$$

mittels Rückwärtsauflösen in Fließkommazahlenarithmetik. Die letzte Komponente der genäherten Lösung ist durch

$$\tilde{x}_2 = \mathrm{fl}(10/10) = \mathrm{fl}(1) = 1$$

gegeben, die erste Komponente erhält man aus

$$\tilde{x}_1 = \mathrm{fl}\left(\mathrm{fl}(110-1)/110\right) = \mathrm{fl}\left(\mathrm{fl}(109)/110\right) = \mathrm{fl}\left(110/110\right) = \mathrm{fl}(1) = 1.$$

Die in Fließkommazahlenarithmetik berechntete (approximative) Lösung ist demnach

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Wen es interessiert: Genaues Hinsehen ergibt, dass die exakte Lösung $\boldsymbol{x}_{true}$ gegeben ist durch

$$\boldsymbol{x}_{true} = \frac{110}{111} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$