Institute for Analysis and Scientific Computing
Lothar Nannen, Markus Wess

Numerische Mathematik - Projektteil 1

: 19.11.2019

20. November 2019

Aufgabe 1:
Ziel dieses Projekts ist es asymptotisch exponentiell abfallende Funktionen auf dem unbeschränkten Intervall $[0, +\infty)$ numerisch zu integrieren. Dazu untersuchen wir zwei mögliche Strategien:

(a) Abschneiden des unbeschränkten Intervalls und Anwendung einer Quadraturformel für ein beschränktes Intervall $[0, T]$ für $T > 0$

(b) Anwendung einer Gauß-Quadratur für die Gewichtsfunktion $w(x) = \exp(-x)$

a) Sei $f : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ eine beschränkte Funktion. Desweiteren definieren wir für eine Menge $M \subset [0, \infty)$ das gewichtete Integral von f mit

$$Q_M(f) := \int_M f(x) \exp(-x)\, dx.$$

Approximieren Sie das Integral $Q_{[0,\infty)}(f)$ indem Sie für ein $T > 0$ das Integral auf dem beschränkten Intervall $Q_{[0,T)}(f)$ durch die summierte Trapezregel $Q_{h,T}(f)$ approximieren. Leiten Sie eine Fehlerabschätzung der Form

$$|Q_{([0,\infty)}(f) - Q_{T,h}(f)| \leq C_1 \varepsilon_T + C_2 T \varepsilon_h$$

her, wobei die Terme $\varepsilon_T, \varepsilon_h$ lediglich von T bzw. h abhängen und C_1, C_2 jeweils von T, h unabhängig sind.

b) Testen Sie die theoretischen Resultate aus Aufgabe a) durch geeignete numerische Beispiele. Untersuchen Sie dabei das Verhalten des Fehlers abhängig von den beiden Parametern T, h. Wie müssen Sie die Parameter wählen um bei einer vorgegeben Anzahl an Funktionsauswertungen einen möglichst geringen Fehler zu erhalten? Plotten Sie den Fehler abhängig von der Anzahl der Funktionsauswertungen.

c) In Übungsaufgabe 39 wurde gezeigt, dass die Polynome p_j gegeben durch die Dreitermrekursion

$$p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = x - 1, \quad p_{n+1}(x) = (x - 2n - 1)p_n(x) - n^2 p_{n-1}(x)$$

die Orthogonalpolynome zur Gewichtsfunktion $w(x) = \exp(-x)$ sind. Zeigen Sie Satz 4.23 aus dem Vorlesungsskript. Sie müssen also nachweisen, dass die Nullstellen von p_n genau die Eigenwerte der Matrix

$$T_n = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & \\ -1 & 3 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -n+1 \\ & & n+1 & 2n-1 \end{pmatrix}$$

sind und dass die zugehörigen Gauß-Gewichte durch durch die Quadrate der ersten Einträge der zugehörigen normierten Eigenvektoren sind.

Hinweis: Zeigen Sie zunächst, dass

$$v_{k,n} := (\tau_0, \tau_1 p_1(x_k), \ldots, \tau_{n-1} p_{n-1}(x_k))^\top$$

mit $\tau_j = \frac{(-1)^j}{j!}$ *ein Eigenvektor der Matrix* T_n *zum Eigenwert* x_k *ist. Betrachten Sie dazu die einzelnen Einträge von* $T_n v_{k,n}$*. Zeigen Sie weiters, dass die Quadraturgewichte durch* $w_{k,n} = \frac{1}{\|v_{k,n}\|^2}$ *gegeben sind. Betrachten Sie dazu den Ausdruck*

$$\sum_{j=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{n} w_{l,n} \tau_j^2 p_j(x_k) p_j(x_l) .$$

d) Implemetieren Sie die Gauß-Quadratur aus Aufgabe c) indem Sie das entsprechende Eigenwertproblem mithilfe eines geeigneten Pakets (z.b. numpy.eig) lösen. Testen Sie die Quadratur an geeigneten Beispielen. Plotten Sie Quadraturpunkte und Quadraturgewichte.

e) Vergleichen Sie die Effizienz der Gauß-Quadratur aus Aufgabe c) und d) mit der in Aufgabe a) und b) entwickelten Quadratur indem Sie Fehler und Funktionsauswertungen vergleichen. Was passiert wenn Sie als Gewichtsfunktion $\exp(-x^2)$ wählen?

Aufgabe 2:
Sei $f \in C([a,b])$ und $Q(f) := \int_a^b f(x)dx$. Zur numerischen Approximation von $Q(f)$ seien $x_0, \ldots, x_n$ äquidistant verteilte Quadraturknoten in $[a,b]$ mit $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$.
a) Zeigen Sie, wie sich die summierte Trapezregel

$$Q_h^{(1)}(f) := \frac{h}{2}f(a) + h\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{h}{2}f(b), \qquad h := \frac{b-a}{n},$$

aus einer stückweisen Interpolation von f ergibt.
b) Implementieren Sie die summierte Trapezregel und überprüfen Sie die Implementierung anhand der Funktionen

$$\begin{aligned} g_k(x) &:= \sqrt{x}^k, && k \in \mathbb{N}, \\ f(x) &:= \sin \pi x, \end{aligned}$$

für verschiedene Intervalle $[a,b]$. Wie verhält sich der Fehler abhängig von h? Erklären Sie die Ergebnisse. Achten Sie dabei insbesondere auf die Fälle $k = 1, 3$.

Im weiteren Verlauf des Projektes darf ohne Beweis folgende Aussage verwendet werden: Für $f \in C^{2r+2}([a,b])$ mit $r \in \mathbb{N}_0$ gilt die asymptotische Darstellung

$$Q_h^{(1)}(f) = Q(f) + \sum_{i=1}^{r} a_i h^{2i} + a_{r+1}(h) \qquad \text{mit } a_{r+1}(h) = \mathcal{O}\left(h^{2r+2}\right) \text{ für } h \to 0. \tag{1}$$

c) Berechnen Sie explizit die Quadraturformel, die man durch lineare Richardson-Extrapolation der summierten Trapezregel erhält. Verwenden Sie dazu ein beliebiges $h_0 > 0$ und $h_1 := h_0/2$. Überprüfen Sie, ob die Voraussetzungen aus Satz 3.44 erfüllt sind und geben Sie den zu erwartenden Fehler an. Welche Quadraturformel erwarten Sie für quadratische Extrapolation? Überprüfen Sie Ihre Vermutung.
d) Implementieren Sie die Quadraturformeln aus c) und überprüfen Sie die Übereinstimmung des Fehlers mit der Theorie.
e) Formulieren und implementieren Sie eine allgemeine Richardson-Extrapolation der summierten Trapezregel und überprüfen Sie wiederum die Ergebnisse anhand der Theorie. Vergleichen Sie die diversen Quadraturen bezüglich der Anzahl der benötigten Funktionsauswertungen.

Aufgabe 3:
Ziel dieses Projekts ist es Funktionen $f : \Omega \to \mathbb{R}$ für ein gegebenes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ zu approximieren. Eine mögliche Strategie besteht darin, das Gebiet in disjunkte einfache Teilgebiete $T_i, i \in I$ für eine Indexmenge I zu zerlegen, sodass

$$\Omega = \dot{\bigcup}_{i\in I} T_i$$

Nun konstruiert man Quadraturformeln für die einfacheren Teilgebiete T_i und summiert über die gebietweisen Integrale. Eine häufige Wahl für T_i sind Dreiecke, deshalb konstruieren wir zunächst Integrationsregeln für das Einheitsdreieck. Sei $\hat{Q} := (0,1) \times (0,1)$ und $\hat{T}$ das offene Dreieck mit den Eckpunkten $(0,0), (1,0), (0,1)$. Sei weiters

$$\Psi : \begin{cases} \mathbb{R}^2 & \to \mathbb{R}^2 \\ (x,y) & \mapsto (x, (1-x)y) \end{cases}$$

a) Zeigen Sie, dass die Abbildung Ψ ein Diffeomorphismus zwischen $\hat{Q}$ und $\hat{T}$ ist.
b) Seien für $N, M \in \mathbb{N}$ zwei Quadraturformeln Q_N, Q_M der Ordnung N bzw. M auf dem Einheitsntervall gegeben. Konstruieren Sie daraus eine Quadraturformel $Q_{\hat{Q}}$ auf $\hat{Q}$. Welche Funktionen werden durch $Q_{\hat{Q}}$ exakt integriert?
c) Verwenden Sie die Abbildung Ψ und die Quadratur aus b) um eine Quadratur $Q_{\hat{T}}$ auf $\hat{T}$ zu konstruieren. Welche Funktionen werden durch $Q_{\hat{T}}$ exakt integriert?
d) Implementieren und testen Sie die Quadraturformel auf dem Einheitsquadrat bzw. Einheitsdreieck welche aus dem Produkt von Gaußquadraturen entsteht.

Hinweis: Die Orthogonalpolynome zum Gewicht $w = 1$ auf dem Intervall $[-1,1]$ sind durch die Rekursion

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x, \quad L_{n+1}(x) = xL_n(x) - \frac{n^2}{4n^2-1} L_{n-1}(x), \quad n \in \mathbb{N}$$

gegeben.
e) Konstruieren und implementieren Sie alternativ Quadraturformeln erster und zweiter Ordnung auf dem Einheitsdreieck mithilfe der Lagrange Polynome aus Übungsaufgabe 22).
f) Sei T nun ein beliebiges Dreieck. Verallgemeinern Sie die Quadraturformeln aus d) und e) auf dem Einheitsdreieck zu einer auf T. Konstruieren Sie dazu eine affine Abbildung von $\hat{T}$ nach T. Implementieren und testen Sie Ihre Formel.
g) Sei eine Triangulierung eines Gebiets Ω mit $\{T_i, i \in I\}$ in folgender Form gegeben: Es sei $x_n \in \mathbb{R}^2, n = 0, \ldots, N$ eine Familie von Punkten. Dann ist jedes Dreieck T_i durch die Indezes der Eckpunkte j_i, k_i, l_i gegeben. Die Eckpunkte von T_i sind also $x_{j_i}, x_{k_i}, x_{l_i}$. Implementieren und testen Sie eine Funktion, die zu einer gegebenen Triangulierung eine Funktion f integriert.

Hinweis: Um eine Triangulierung zu generieren existieren diverse Pakete. Verwenden Sie für Python z.B. das Paket dmsh *(https://github.com/nschloe/dmsh).*