Projekt II/3: Extrapolation

Dieses Projekt hat zum Ziel, die Zusammenhänge zwischen dem Verfahrensfehler und dem Rechenfehler bei der Approximation der ersten Ableitung und bei der Berechnung des Integrals einer skalaren Funktion zu beleuchten. Dabei soll gelernt werden, wie man stabile Verfahren hoher Ordnung mit Hilfe der Extrapolation entwickelt und implementiert.

Beispiel 1

Die erste Ableitung $y'(t)$ kann durch den einseitigen oder den zentralen Differenzenquotienten

$$D_e(h) = \frac{y(t+h) - y(t)}{h}, \quad D_z(h) = \frac{y(t+h) - y(t-h)}{2h} \tag{1}$$

approximiert werden.

(1a) Konstruieren Sie ein Beispiel das zeigt, dass die Kondition der Aufgabe extrem schlecht ist, d. h., dass der Wert der Ableitung an der Stelle t sehr empfindlich auf kleine additive Störungen in der Datenfunktion y reagiert. Genauer gesagt: Betrachtet man den Wert der ersten Ableitung an der Stelle t der exakten Funktion $y(t) \in C^1[a,b]$ und der gestörten Funktion $\tilde{y}(t) := y(t) + \epsilon(t)$, wobei $\|\epsilon(t)\|_\infty$ als klein angenommen wird, so kann trotzdem $|\tilde{y}'(t) - y'(t)|$ beliebig groß werden. Machen Sie eine Skizze, die die Problematik illustriert.

(1b) Für beide der obigen Näherungsformeln leite man den Ausdruck für den Verfahrensfehler her, indem man entsprechende Glattheit (Differenzierbarkeit) von y voraussetze.

(1c) Für beide Formeln gebe man eine möglichst gute Abschätzung für den Rechenfehler an. Sie können dabei die „$(1+\epsilon)$“ Technik verwenden. Für den Gesamtfehler erhält man daraus eine Schranke,

$$|\text{Gesamtfehler}| \leq |\text{Verfahrensfehler}| + |\text{Rechenfehler}| \leq S(\delta, eps; h),$$

die von der Schranke δ für die Auswertefehler von y, von der Maschinengenauigkeit epsund der Schrittweite h abhängt. S hängt noch von der Schranke M_0 für die Werte von y und von der Schranke M_k für eine bestimmte höhere Ableitung $y^{(k)}$ ab.

Bestimmen Sie jene Schrittweite $h^* = h(\delta, eps)$, für die S minimal wird. Welches Fehlerniveau kann daher mit $D_e(h)$ bzw. $D_z(h)$ für $\delta = eps = 10^{-8}$ und $M_0 = M_k = 1$ garantiert werden?

Setzt man voraus, dass $y \in C^7[a,b]$ gilt, so ergibt die Taylorreihenentwicklung von $y(t-h)$ und $y(t+h)$ um die Stelle t in D_z eine sogenannte asymptotische Fehlerentwicklung für den Verfahrensfehler

$$D_z(h) - y'(t) = h^2 \cdot \frac{y^{(3)}(t)}{3!} + h^4 \cdot \frac{y^{(5)}(t)}{5!} + R_6, \tag{2}$$

wobei $|R_6| \leq h^6 \cdot \frac{M_7}{7!}$, $M_7 = \max_{a \leq t \leq b} |y^{(7)}(t)|$. Diese strukturelle Information über den Fehler kann man wie folgt ausnützen:
Nehmen wir an, dass wir drei Werte von D_z für drei verschiedene Schrittweiten z.B. $h, h/2, h/4$ berechnet haben. Dann gilt nach (2)

$$\begin{aligned} D_z(h) - y'(t) &= h^2 \cdot \frac{y^{(3)}(t)}{3!} + h^4 \cdot \frac{y^{(5)}(t)}{5!} + R_6, && \text{(3a)} \\ D_z\left(\frac{h}{2}\right) - y'(t) &= \left(\frac{h}{2}\right)^2 \cdot \frac{y^{(3)}(t)}{3!} + \left(\frac{h}{2}\right)^4 \cdot \frac{y^{(5)}(t)}{5!} + R_6, && \text{(3b)} \\ D_z\left(\frac{h}{4}\right) - y'(t) &= \left(\frac{h}{4}\right)^2 \cdot \frac{y^{(3)}(t)}{3!} + \left(\frac{h}{4}\right)^4 \cdot \frac{y^{(5)}(t)}{5!} + R_6 && \text{(3c)} \end{aligned}$$

und wir können durch Bildung geeigneter Linearkombinationen dieser Gleichungen, was auf die Elimination der h^2- und h^4-Terme auf der rechten Seite hinausläuft, eine Näherung $D_{excel}(h)$ für $y'(t)$ herleiten, für die

$$D_{excel}(h) - y'(t) = \mathrm{O}(h^6)$$

gilt.

2a) Leiten Sie die Formel (2) her.

2b) Bestimmen Sie $D_{excel}(h)$ und ihren Verfahrensfehler.

2c) Welchen Vorteil hat diese Näherungsformel gegenüber $D_z(h)$?

2d) Versuchen Sie für das obige Vorgehen eine Interpretation zu finden. Machen Sie sich dazu bewusst, dass die rechte Seite in

$$D_z(h) \approx y'(t) + h^2 \cdot \frac{y^{(3)}(t)}{3!} + h^4 \cdot \frac{y^{(5)}(t)}{5!}$$

als ein spezielles Polynom 2. Grades in h^2 aufgefasst werden kann.

Beispiel 2

Implementieren Sie die Näherungsformeln $D_e(h)$, $D_z(h)$ und $D_{excel}(h)$ und vergleichen Sie an selbstgewählten Beispielen ihre Qualität. Dazu kann man für eine Reihe von Schrittweiten h vergleichen, welche Genauigkeit mit den einzelnen Formeln zu erreichen ist. Versuchen Sie in diesem Vergleich auch den Aufwand (Anzahl der Funktionsauswertungen in $D_e(h)$, $D_z(h)$ und $D_{excel}(h)$) einzubeziehen.

Basierend auf der Formel $D_{excel}(h)$, entwickeln Sie ein Matlab-Programm zur Berechnung der ersten Ableitung einer skalaren Funktion $f(t)$ and der Stelle $t^\star$. Der Benützer übergibt als Eingangsdaten $f, t^\star$ und die Genauigkeitsforderung für den absoluten Fehler, TOL, das Programm liefert eine Näherung $D_h(t^\star)$ für $f'(t^\star)$ und eine Fehlerschätzung für den absoluten (und den relativen) Fehler von $D_h(t^\star)$, falls

$$|D_h(t^\star) - f'(t^\star)| \leq TOL$$

gilt, oder eine Fehlermeldung, falls die Genauigkeitsforderung nicht erfüllt werden konnte. Überlegen Sie wie Sie den absoluten Fehler schätzen und die Schrittweite anpassen wollen. Testen Sie Ihr Programm an mehreren Funktionen verschiedener Schwierigkeit.

Beispiel 3

Die Schranken für den Verfahrensfehler der Näherungformel $D_e(h)$, $D_z(h)$ und $D_{excel}(h)$ haben eine gewisse Struktur, die man grob wie folgt darstellen kann:

$$|D(h) - y'(t)| \leq \text{ Kenngrößen des Problems} \cdot h^p, \;\; p \geq 1, \tag{4}$$

wobei sich hinter den "Kenngrößen" des Problems Schranken für höhere Ableitungen von y verbergen. Beobachten Sie die Ordnung p des Verfahrens anhand der Ableitungswerte der Funktion $y(x) = e^x$. Dazu werte man die obigen Näherungsformel für eine Reihe feiner werdendender Schrittweiten h aus und berechne für jede dieser Schrittweiten den Verfahrensfehler $|D(h) - y'(t)|$. Aus dem Ansatz

$$|D(h) - y'(t)| \approx c \cdot h^p, \;\; h \to 0,$$

kann man für jeweils zwei aufeinanderfolgende Schrittweiten eine Schätzung für die, von h unabhängige, Fehlerkonstante c und die Ordnung p ausrechnen. Experimentieren Sie mit Funktionen y die weniger glatt sind als e^x (Werte der höheren Ableitungen sind groß, es treten Unstetigkeiten höherer Ableitungen auf). Was beobachten Sie insbesondere in jenen Fällen, wo die Ableitungen, die in (4) auftreten, in der Nähe von t groß oder unstetig sind?