Practicum Numerieke Wiskunde

2e Bachelor Informatica-Wiskunde

Academiejaar 2013-2014

Dit practicum bestaat uit twee delen. In het eerste deel schrijf je verschillende routines voor numerieke integratie en onderzoek je de integratiefout, meet je de uitvoeringstijd en vergelijk je met de routine `quad` van MATLAB. In het tweede deel benader je een functie met een veelterm volgens een kleinste kwadraten criterium. Hierbij komen zaken als de convergentiesnelheid en de conditie van het probleem aan bod.

Het doel van dit practicum is aanleren en evalueren van MATLAB voor toepassingen van numerieke wiskunde. De nadruk ligt daarom in de eerst plaats op de geschreven code.

De theorie van dit practicum die niet in de les gezien is, zoals het deel over een kleinste kwadraten benadering van een functie, is geen leerstof voor het examen.

1 Deel 1: numerieke integratie

In dit deel schrijf je vier verschillende functies voor numerieke integratie, gebaseerd op de trapeziumregel en de regel van Simpson. Twee functies gebruiken een vaste grootte van het deelinterval, de andere twee functies zijn adaptief. Alle opdrachten in MATLAB van dit deel bundel je in het script `deel1.m`, waarbij je de verschillende opdrachten van elkaar kan scheiden in 'cells' m.b.v. `%%`.

1.1 Vast deelinterval

Eerst maak je twee functies `trapezium.m` en `simpson.m` die deze integratieregels toepassen op een functie $f(x)$ in een interval $[a, b]$ met n het aantal deelintervallen, elk van dezelfde lengte h. De signatuur van beide functies is

```
I = functie(f,a,b,n)
```

waarbij `f` een function handle is voor de integrand.

(a) Gebruik beide functies om de volgende integralen te benaderen:

$$\int_{-1}^{1} e^x dx \quad \text{en} \quad \int_{-5}^{5} \frac{1}{1+x^2} dx$$

Gebruik verschillende waarden van de parameter n, maak voor beide integralen een plot van de absolute waarde van de integratiefout in functie van $h = (b-a)/n$ en bespreek de plots.[1] Maak een goede keuze voor de waarden van n en voor de schaal van de assen. Waarom gebruik je de gekozen schaal?

(b) De integratiefout gedraagt zich voor beide functies als $O(h^k)$, met een verschillende k waarde voor elk van de integratieregels. Wat zijn de waardes van deze k? Voeg in elke figuur de grafieken van h^k toe. Verklaar dit gedrag vanuit de theorie in het handboek.

1.2 Adaptieve routine

Een adaptieve integrator kan eenvoudig in een recursieve definitie gevat worden. Zij gevraagd om $\int_a^b f(x)dx$ te berekenen met een absolute nauwkeurigheid ϵ. Zij verder I_1 de waarde die door één of andere kwadratuurformule geleverd wordt als benadering voor die integraal en I_2 de waarde die door een andere nauwkeurigere kwadratuurformule geleverd wordt. Het verschil $|I_1 - I_2|$ is dan een schatting van de integratiefout voor I_1. Een recursieve definitie van de functie **integraal**$(f(x), a, b, \epsilon)$ zou dan kunnen zijn

integraal$(f(x), a, b, \epsilon) :=$
  als $|I_1 - I_2| < \epsilon$ **dan** I_2
  anders[2] integraal$(f(x), a, \frac{a+b}{2}, \epsilon)$ + integraal$(f(x), \frac{a+b}{2}, b, \epsilon)$

Schrijf twee functies die deze recursieve definitie toepassen. De functie `trapezium_adaptief.m` gebruikt de trapeziumregel met 2 punten voor I_1 en met 3 punten voor I_2. De functie `simpson_adaptief.m` gebruikt de regel van Simpson met 3 punten voor I_1 en met 5 punten voor I_2. De signatuur van beide functies is

```
I = functie(f,a,b,e)
```

waarbij `e` de absolute nauwkeurigheid is waarmee de integraal benaderd moet worden.
Voer de volgende opdrachten uit met `e=1e-8`:

(a) Controleer of de functies werken voor $\int_{-1}^{1} e^x dx$ en $\int_{-5}^{5} \frac{1}{1+x^2} dx$.

(b) Wat loopt er mis bij $\int_{-1}^{1} \sin(2\pi x)^2 dx$? De (ondertussen verouderde) methode `quad` in MATLAB doet adaptieve integratie volgens hetzelfde principe, maar met een iets betere kwadratuurregel. Hoe wordt dit soort probleem vermeden in `quad`. Bekijk de code met `edit quad`.

(c) Wat loopt er mis bij $\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx$? Hoe wordt dit soort probleem opgelost in `quad`? Pas beide functies aan zodat ze deze integraal kunnen oplossen.

---

[1] De correcte waarde van de integraal kan je analytisch berekenen.

[2] In principe zou in deze regel ϵ vervangen moeten worden door $\epsilon/2$. Voor veel praktische gevallen mag dit echter verzwakt worden tot wat er nu staat. Zie Sectie 1.3.

Doe een tijdsmeting voor de methodes `trapezium_adaptief`, `simpson_adaptief` en `quad`. Gebruik `tic` en `toc`, en neem het gemiddelde van minstens 10 metingen. Doe dit voor de integraal $\int_{-5}^{5} \frac{1}{1+x^2} dx$, en voor verschillende waarden van de absolute nauwkeurigheid `e`.

(d) Zet in een figuur de uitvoeringstijd uit in functie van `e`. Maak een goede keuze voor de waarden van `e` en voor de schaal van de assen.

(e) Hoe gedraagt de uitvoeringstijd zich in functie van `e` voor de routines die je geschreven hebt? Maak gebruik van de volgende gegevens:

- In elk deelinterval is de benaderde fout ongeveer gelijk aan `e`.
- In elk deelinterval gedraagt de benaderde fout $I_1 - I_2$ zich als $C_1 h^k$, met C_1 een constante.
- Neem aan dat er i recursiestappen gedaan zijn, dan is het totaal aantal subintervallen kleiner of gelijk aan 2^i. Veronderstel hier gelijkheid.
- De uitvoeringstijd voor elk subinterval is constant.

(f) Voeg aan je figuur de grafieken toe van de theoretische uitvoeringstijd. Neem de waarde van de constanten zodat deze zo goed mogelijk de echte uitvoeringstijden benaderen.

1.3 Enkele opmerkingen

- Merk op dat bij het opsplitsen van het interval de tolerantie eigenlijk gelijk zou moeten zijn aan $\frac{\epsilon}{2}$. Op die manier weet je dat voor beide deelintervallen de fout kleiner is dan $\frac{\epsilon}{2}$, waardoor de totale fout zeker kleiner is dan ϵ. Voor vele praktische gevallen is dit echter te conservatief. We benaderen immers de fout op I_1, terwijl de waarde die wordt teruggegeven de nauwkeurigere benadering I_2 is. Nog belangrijker is het feit dat de deelintervallen waar de echte fout dicht bij de benaderde fout $I_1 - I_2$ ligt, zeldzaam zijn. Meestal is de echte fout veel kleiner. Daarom zal het voor veel integralen volstaan om dezelfde waarde van ϵ te gebruiken in elke recursiestap.

- Er zijn veel betere integratieroutines beschikbaar dan `quad`. Dit is eigenlijk een eenvoudige methode die voor veel eenvoudige functies goed en snel werkt. Voor verschillende moeilijkere functies zal `quad` echter falen. De methode werd dan ook vervangen in de laatste versies MATLAB.

- Enkele zaken die een goede integratieroutine zou moeten doen, en wat `quad` niet doet:
  - globaal adaptief werken: steeds dat interval opdelen waar de fout maximaal is.
  - een open kwadratuurregel gebruiken: een regel die de eindpunten niet gebruikt, waardoor het probleem in vraag (c) al vermeden wordt.
  - een minimaal aantal recursiestappen eisen. Dit zou het probleem in vraag (b) vermijden.

– de gebruiker laten opgeven waar de functie (of een van haar afgeleide) discontinu is. Dit zou de convergentie versnellen.

2 Deel 2: Kleinste kwadraten benadering van een functie

2.1 Theorie

We willen een gegeven functie $f(x)$ benaderen op het interval $[-1, 1]$ als een lineaire combinatie van gegeven basisfuncties $h_i,\ i = 1, \ldots, n$

$$f(x) \approx g(x) := \sum_{i=1}^{n} a_i h_i(x).$$

We zoeken de coëfficiënten a_i zodat de benadering zo goed mogelijk is. Een mogelijk criterium voor een zo goed mogelijke benadering is het **kleinste kwadraten criterium**:

$$\text{zoek } g(x) \text{ zodat } \int_{-1}^{1} (f(x) - g(x))^2 dx \text{ minimaal is.} \tag{1}$$

Indien we een inwendig product definiëren als

$$\langle p, q \rangle = \int_{-1}^{1} p(x)q(x)dx$$

en de bijhorende norm als $\|p\| = \sqrt{\langle p, p \rangle}$, dan komt het criterium neer op het minimaliseren van de norm $\|f - g\|$ (of equivalent, het kwadraat van deze norm).

Stelling. *Stel $\mathcal{H}$ de vectorruimte met basisfuncties $h_i,\ i = 1, \ldots, n$. Stel $f_{\mathcal{H}}$ de loodrechte projectie van f op $\mathcal{H}$, d.w.z., $f_{\mathcal{H}} \in \mathcal{H}$ en $\langle f - f_{\mathcal{H}}, h \rangle = 0$ voor alle $h \in \mathcal{H}$. Dan geldt er dat de norm $\|f - h\|$ minimaal voor $h \in \mathcal{H}$ als $h = f_{\mathcal{H}}$.*

Bewijs. Voor eender welk inwendig product geldt er

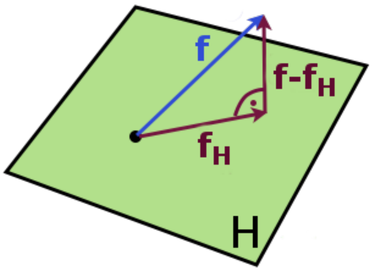
$$\langle p - q, p - q \rangle = \langle p, p \rangle - 2\langle p, q \rangle + \langle q, q \rangle.$$

Als $\langle p, q \rangle = 0$, p en q staan loodrecht op elkaar, dan geldt er bijgevolg dat

$$\|p - q\|^2 = \|p\|^2 + \|q\|^2 \qquad \textit{(Pythagoras).}$$

Stel nu dat $f_{\mathcal{H}}$ de loodrechte projectie is van f op $\mathcal{H}$, dus $f_{\mathcal{H}} \in \mathcal{H}$ en $\langle f - f_{\mathcal{H}}, h \rangle = 0$ voor alle $h \in \mathcal{H}$. Er geldt dan dat $\langle f - f_{\mathcal{H}}, h - f_{\mathcal{H}} \rangle = 0$ voor alle $h \in \mathcal{H}$. Toepassen van Pythagoras geeft

$$\|f - h\|^2 = \|f - f_{\mathcal{H}}\|^2 + \|h - f_{\mathcal{H}}\|^2$$



en dus geldt voor alle $h \in \mathcal{H}$ dat

$$\|f - h\| \geq \|f - f_{\mathcal{H}}\|$$

met gelijkheid voor $h = f_{\mathcal{H}}$. $\square$

De gezochte benadering $g(x)$ is dus gelijk aan de projectie $f_{\mathcal{H}}$ van f op de ruimte $\mathcal{H}$. Bijgevolg

$$\begin{aligned}
& \langle f - g, h \rangle = 0, \quad \text{voor alle} \;\; h \in \mathcal{H} \\
\Leftrightarrow\ & \langle f - g, h_i \rangle = 0, \quad i = 1, \ldots, n \\
\Leftrightarrow\ & \langle f, h_i \rangle = \langle g, h_i \rangle = \langle h_i, g \rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j \langle h_i, h_j \rangle \quad i = 1, \ldots, n
\end{aligned}$$

De coëfficiënten a_j kunnen dus gevonden worden als oplossing van het stelsel

$$\begin{bmatrix} \langle h_1, h_1 \rangle & \langle h_1, h_2 \rangle & \cdots & \langle h_1, h_n \rangle \\ \langle h_2, h_1 \rangle & \langle h_2, h_2 \rangle & \cdots & \langle h_2, h_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle h_n, h_1 \rangle & \langle h_n, h_2 \rangle & \cdots & \langle h_n, h_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f, h_1 \rangle \\ \langle f, h_2 \rangle \\ \vdots \\ \langle f, h_n \rangle \end{bmatrix} \tag{2}$$

2.2 Veeltermbenadering in de monomiaalbasis

Je gaat nu de functie $f(x) = e^x$ benaderen op $[-1, 1]$ met een veelterm van graad n volgens het criterium (1). De veelterm wordt voorgesteld in de monomiaalbasis $h_i = x^{i-1}$:

$$g(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i.$$

Schrijf eerst de volgende functies:

(a) `e = evalfout(f,a,x)` waarin je de fout $f(x) - g(x)$ evalueert in een vector `x` met evaluatiepunten en met `f` een function handle. (Hint: maak gebruik van `polyval`.)

(Ter controle: met `evalfout(@exp,1:5,1/pi)` bereken je $\exp(\frac{1}{\pi}) - \sum_{i=0}^{4}(i+1)(\frac{1}{\pi})^i = -0.746117144861456$.)

(b) `[A,b] = stelsel_monomiaal(f,n)` waarin je het stelsel (2) opstelt voor de monomiaalbasis tot en met graad `n`, met `f` een function handle. Maak gebruik van `quad` met tolerantie `tol=1e-8`.

Voer de volgende opdrachten (c) t/m (i) uit in een script `deel2_monomiaal.m`, waarbij je gebruik maakt van bovenstaande functies. Je berekent de fout $\|f-g\|$ m.b.v. `quad` met `tol=1e-8`.

(c) Bereken de coëfficiënten a_i van de veelterm voor toenemende graad $n = 1, \ldots, 20$ en bereken telkens de fout $\|f-g\|$. (Hint: je hoeft het stelsel (2) slechts eenmaal op te stellen.)

(d) Plot deze fout in functie van de graad. Maak een goede keuze voor de schaal van de assen en argumenteer deze keuze.

(e) Welk deel van de grafiek is te wijten aan benaderingsfouten en welk deel aan afrondingsfouten?

(f) Geef numeriek een schatting van de convergentiesnelheid van de benadering als de graad n toeneemt. Dit is $O(n^{-\nu})$ of $O(\rho^{-n})$, waarbij je de waarde van de parameter numeriek bepaalt. Voeg een grafiek van de theoretische convergentie toe aan je figuur.

Het grote effect van afrondingsfouten heeft te maken met de conditie van de matrix A. Onderzoek dit door het volgende te doen:

(g) De functie

```
[ Aster,bster ] = stelsel_monomiaal_exp(n)
```

berekend de elementen van de matrix A^* en het rechterlid b^* van het stelsel (2) tot op machineprecisie. Bereken de coëfficiënten a_i^* van de veelterm voor toenemende graad $n = 1, \ldots, 20$ gebruik makend van dit stelsel $A^* a^* = b^*$. Bereken voor elke graad

$$\delta a = \frac{\|a - a^*\|_2}{\|a^*\|_2}, \quad \delta b = \frac{\|b - b^*\|_2}{\|b^*\|_2} \quad \text{end} \quad \delta A = \frac{\|A - A^*\|_2}{\|A^*\|_2}.$$

waarbij $Aa = b$ het stelsel is dat je gebruikt hebt in (c).

(h) Maak een nieuwe figuur waarin je δb en δA plot in functie van de graad. Verifieer dat de perturbaties op A en b van de grootte-orde zijn van de tolerantie `tol` die je gebruikt hebt voor `quad`.

(i) Voeg aan je eerdere figuur een grafiek toe van δa en van `tol` vermenigvuldigd met het conditiegetal van A in functie van de graad. Bespreek het verband tussen deze twee grafieken.

Het blijkt inderdaad dat de afrondingsfouten beginnen domineren omwille van de conditie van de matrix A. Uit de voorgaande analyse kan je echter besluiten dat de benaderingsfout van de benaderende veelterm $\|f - g\|$ veel kleiner is dan de fout die er zit op de coëfficiënten van $g(x)$ door de slechte conditie van het stelsel. Een precieze verklaring voor dit fenomeen is niet zo eenvoudig.

3 Praktisch

Groepen

Je werkt in groepjes van twee personen. Ten laatste op **woensdag 26 maart** stuur je per groepje een email naar *matthias.humet@cs.kuleuven.be* met hierin de namen en de studentennummers van de leden van je groepje. Zet het woord 'practicum' in het onderwerp van de email. We raden aan om samen te werken met iemand van een andere studierichting en voordeel te halen uit elkaars expertise.

Tijdsbesteding

Dit practicum heeft een belasting van 1 studiepunt. Dit komt neer op ongeveer 30 uren. Beschouw dit getal als een richtlijn voor je tijdsbesteding. Het is niet de bedoeling om hier ver over te gaan, maar we willen er wel op wijzen dat deze richtlijn ervan uitgaat dat je bij bent met de oefenzittingen (vooral die in MATLAB) en met de nodige leerstof.

Begeleide oefenzitting

In oefenzitting 10 zal je aan het practicum kunnen werken en kan je ook vragen stellen aan de assistent. Deze oefenzitting hoort niet bij de belasting van 1 studiepunt.

Evaluatie

Het practicum telt mee voor 3 van de 20 punten van het eindexamen. De evaluatie van het practicum is gebaseerd op de ingediende code, het verslag en een demo die je zal moeten geven van je programma's. Tijdens de demo zullen er ook extra vragen gesteld worden en is er ruimte voor feedback. De demo's zullen doorgaan tijdens de week van 5 mei.

Er zal vanaf maandag 28 april om 12h aan het prikbord naast het secretariaat een blad hangen waar je je moet inschrijven voor de demo. Dit moet ten laatste gebeuren op **vrijdag 2 mei om 14h**.

Code

De code moet geupload worden op Toledo door iemand van het groepje ten laatste op **donderdag 1 mei**. Zet al de code in één zip-bestand met jullie achternamen in de bestandsnaam, bv. `codeDeSmetVanIeper.zip`. Het zip-bestand moet minstens de volgende bestanden bevatten:

- `deel1.m`
- `trapezium.m`
- `simpson.m`
- `trapezium_adaptief.m`
- `simpson_adaptief.m`
- `deel2_monomiaal.m`
- `evalfout.m`
- `stelsel_monomiaal.m`

Vergeet mogelijke hulpfuncties niet toe te voegen die jullie geschreven hebben.

Verslag

Schrijf een duidelijk gestructureerd en bondig verslag van maximaal 6 pagina's waarin zeker het volgende staat:

- Alle figuren en tabellen. Benoem steeds de assen en zorg ervoor dat de grafieken leesbaar zijn. Voeg legendes toe indien nodig. Je hoeft geen uitgebreid onderschrift te voorzien, als je in de tekst duidelijk naar de figuur verwijst.
- Antwoorden op alle opgaves en vragen die gesteld worden.
- Tijdsbesteding aan de verschillende onderdelen van het practicum:
  - Code deel 1
  - Code deel 2
  - Schrijven verslag
  - ...

  Indien jullie het werk verdeeld hebben en de tijdsschattingen voor beide groepsleden verschillen, geef dit dan ook duidelijk aan.

Je uploadt je verslag op Toledo als één pdf-bestand ten laatste op **donderdag 1 mei**. Geef het pdf-bestand een analoge naam als je code, bv. `verslagDeSmetVanIeper.pdf`. Geef ook een afgedrukte versie van je verslag af. Je kan je verslag deponeren in de studentenbrievenbus, ten laatste op **vrijdag 2 mei om 14h**. De studentenbrievenbus hangt in het printerlokaal op het gelijkvloers van gebouw 200A.

Overzicht deadlines

Wat	Waar	Deadline
Verdelen in groepjes	e-mail	Woensdag 26 maart
Uploaden code	Toledo	Donderdag 1 mei
Uploaden verslag	Toledo	Donderdag 1 mei
Indienen afgedrukt verslag	Studentenbrievenbus 200A	Vrijdag 2 mei om 14h
Inschrijven demo	Prikbord 200A	Vrijdag 2 mei om 14h

Veel succes!

Dirk, Matthias en Marc