

MA 2302: Numerik

Technische Universität München, SS 2011

Vorlesung: Caroline Lasser

Tutorien: Ilja Klebanov, Thomas Satzger, David Sattlegger

(aktualisiert am 22. Juli 2011)

Inhaltsverzeichnis

1	Symmetrische Eigenwertprobleme	2
1.1	Eigenwertprobleme (3.5.) [S2, Lecture 12]	2
1.2	Störungstheorie (6.5.) [S2, Lecture 13 & 14]	2
1.3	Vektoriteration (11.5.) [S2, Lecture 14 & 15]	2
1.4	Inverse Iteration (13.5.) [S2, Lecture 15]	2
1.5	Mehr Iterationen (17.5.) [TB, Lecture 26 & 27]	3
1.6	QR-Iteration (20.5.) [S2, Lecture 15]	3
2	Numerische Quadratur	3
2.1	Einfache Regeln (24.5.) [S1, Lecture 21]	3
2.2	Gauß-Quadratur (27.5.) [S1, Lecture 23]	3
2.3	Mehr zur Gauß-Quadratur (31.5.) [DR, §2.7.5]	4
2.4	Clenshaw-Curtis-Quadratur (3.6.) [I], [T, Chapter 12]	4
2.5	Gauß-Legendre versus Clenshaw-Curtis (8.6.) [T08]	4
2.6	Adaptivität & MC-Quadratur (10.6.) [QSS2, Kap. 9]	4
3	Iterative Verfahren der linearen Algebra	5
3.1	Stationäre Iterationsverfahren (15.6.) [K, Ch. 1]	5
3.2	Matrix-Splitting (17.6.) [S2, Lecture 25],[H, Ch. 17]	5
3.3	CG (22.6.) [K, Ch. 2]	5
3.4	CG & GMRES (24.6.) [K, Ch. 3], [TB, Lect. 35]	5
3.5	Arnoldi (29.7.) [TB, Lect. 33], [S2, Lect. 16 & 19]	6
3.6	Lanczos (1.7.) [TB, Lect. 34], [S2, Lect. 20]	6
4	Gewöhnliche Differentialgleichungen	6
4.1	Konditionszahlen (6.7.) [DB, Kap. 3.1]	6
4.2	Einschrittverfahren (8.7.) [DB, Kap. 4.1]	6
4.3	Runge-Kutta-Verfahren (13.7.) [DB, Kap. 4.2.1]	7
4.4	Ein Runge-Kutta-Verfahren (15.7.) [DB, Kap. 4.2.2]	7

4.5	Schrittweitensteuerung (20.7.) [DB, Kap. 5.1 & 5.3]	7
4.6	Diskrete Kondition (22.7.) [DB, Kap. 4.1 & 4.2]	7
4.7	Wiederholung (27.7.)	8
4.8	Klausur (29.7.)	8

1 Symmetrische Eigenwertprobleme

1.1 Eigenwertprobleme (3.5.) [S2, Lecture 12]

- a) Erinnerung an die lineare Algebra von Eigenwertproblemen
- b) Beispiel dafür, dass eine ε -Störung der Matrix zu einer $\sqrt{\varepsilon}$ -Abweichung bei Eigenwerten und -vektoren führen kann; entartete Eigenwerte können sich aufspalten.
- c) Das Residuum kann den Approximationsfehler unterschätzen.

1.2 Störungstheorie (6.5.) [S2, Lecture 13 & 14]

- a) Erinnerung an den Spektralsatz der linearen Algebra
- b) Bei einfachen Eigenwerten und -vektoren pflanzen sich Störungen der Matrix in der gleichen Größenordnung fort.
- c) Beweis, dass einfache Eigenwerte einer hermiteschen Matrix absolute Konditionszahl 1 haben.

1.3 Vektoriteration (11.5.) [S2, Lecture 14 & 15]

- a) (y, μ) ist Eigenpaar von $A + E$ mit $\|E\|_2 = \|Ay - \mu y\|_2 / \|y\|_2$.
- b) Aus dem Satz von Abel folgt, dass Methoden zum Lösen allgemeiner Eigenwertprobleme iterativ sind.
- c) Beweis, dass für diagonalisierbare Matrizen mit dominantem Eigenpaar (λ_1, x_1) die Vektoriteration $\|u_k - \sigma_k x_1\|_2 = O(|\lambda_2/\lambda_1|^k)$ mit $|\sigma_k| = 1$ erfüllt.

1.4 Inverse Iteration (13.5.) [S2, Lecture 15]

- a) Ist (x, λ) ein Eigenpaar von A und $y \in \mathbb{C}^n$, so erfüllt der Rayleigh-Quotient $R(x + ty) = \lambda + O(t)$, für $A = A^*$ sogar $R(x + ty) = \lambda + O(t^2)$.
- b) Für $\mu \notin \sigma(A)$ ist (x, λ) genau dann Eigenpaar von A wenn $(x, (\lambda - \mu)^{-1})$ Eigenpaar von $(A - \mu)^{-1}$ ist.
- c) Die inverse Iteration mit Shift μ approximiert das Eigenpaar, dessen Eigenwert μ am nächsten liegt.

1.5 Mehr Iterationen (17.5.) [TB, Lecture 26 & 27]

- a) Die Rayleigh-Quotienten-Iteration ist im hermiteschen Fall kubisch konvergent.
- b) Begründung, weshalb die schlecht-konditionierten linearen Gleichungssysteme der inversen und der Rayleigh-Quotienten-Iteration nicht zu Instabilität führen.
- c) Unitäre Ähnlichkeitstransformation in $O(n^3)$ flops auf obere Hessenberg- oder Tridiagonalform vor dem iterativen Eigenwertlöser.

1.6 QR-Iteration (20.5.) [S2, Lecture 15]

- a) Der Q -Faktor der QR -Zerlegung trägt in der letzten Spalte den ersten Schritt einer inversen Iteration mit Startwert e_n .
- b) Beweis, dass der QR-Algorithmus mit Rayleigh-Quotienten-Shift kubisch konvergieren kann.
- c) Beweis der Invarianz von oberer Hessenberg- oder Tridiagonalform im QR-Algorithmus.

2 Numerische Quadratur

2.1 Einfache Regeln (24.5.) [S1, Lecture 21]

- a) Die Integration und Quadratur oszillierender Funktionen kann schlecht konditioniert sein.
- b) Für positive Quadraturgewichte sind die absolute Kondition der Integration und Quadratur gleich.
- c) Der Fehler der summierten Trapezregel ist $O(h^2)$ für $f \in C^2[a, b]$.

2.2 Gauß-Quadratur (27.5.) [S1, Lecture 23]

- a) Der Fehler der summierten Trapezregel ist $O(h^s)$ für $(b - a)$ -periodisches $f \in C^s[a, b]$.
- b) Eine Quadraturformel integriert Polynome vom Grad $\leq n$ genau dann exakt, wenn $w_j = I(\ell_j)$ für alle $j = 0, \dots, n$ gilt.
- c) Orthogonale Polynome erfüllen eine Dreiterm-Rekursion.

2.3 Mehr zur Gauß-Quadratur (31.5.) [DR, §2.7.5]

- a) Die Knoten einer Gauß-Quadraturformel sind die Nullstellen eines orthogonalen Polynoms.
- b) Eine Gauß-Quadraturformel $Q(f) = \sum_{j=0}^n w_j f(x_j)$ integriert Polynome vom Grad $\leq 2n + 1$ exakt.
- c) Die Knoten und Gewichte der Gauß-Quadratur lassen sich über ein Eigenwertproblem einer symmetrischen Tridiagonalmatrix berechnen, deren Einträge die Koeffizienten einer Dreiterm-Rekursion sind.

2.4 Clenshaw-Curtis-Quadratur (3.6.) [I], [T, Chapter 12]

- a) Über gut gestartete Newton-Iterationen lassen sich die Knoten der Gauss-Quadratur mit $O(n)$ flops berechnen: [GLR].
- b) Clenshaw-Curtis-Quadratur ist die interpolatorische Quadratur über die Extrema des n -ten Chebyshev Polynoms.
- c) Die Gewichte der Clenshaw-Curtis-Quadratur sind positiv.

2.5 Gauß-Legendre versus Clenshaw-Curtis (8.6.) [T08]

- a) Mittels FFT lässt sich die Clenshaw-Curtis-Quadratur in $O(n \log n)$ flops auswerten.
- b) Gauss-Quadraturformeln mit $n + 1$ Knoten integrieren Polynome vom Grad $\leq 2n + 1$ exakt, während die Clenshaw-Curtis-Formel mit $n + 1$ Knoten Polynome vom Grad $\leq n$ exakt integriert.
- c) Für die meisten Integranden erreichen Gauß-Legendre und Clenshaw-Curtis vergleichbare Genauigkeit.

2.6 Adaptivität & MC-Quadratur (10.6.) [QSS2, Kap. 9]

- a) Die adaptive Simpson-Quadratur basiert auf $Q_1(\alpha, \beta) = \frac{(\beta-\alpha)}{6}(f(\alpha) + 4f(\frac{\alpha+\beta}{2}) + f(\beta))$ und $Q_2(\alpha, \beta) = Q_1(\alpha, \frac{\alpha+\beta}{2}) + Q_1(\frac{\alpha+\beta}{2}, \beta)$.
- b) Monte-Carlo-Quadratur approximiert $\text{vol}(B)^{-1} \int_B f(x) dx$ mit $Q_n(f) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f(x_j)$, wobei x_1, \dots, x_n unabhängig gezogene, auf B gleichverteilte Samples sind.
- c) Der mittlere quadratische Fehler der Monte-Carlo-Quadratur ist $O(n^{-1/2})$.

3 Iterative Verfahren der linearen Algebra

3.1 Stationäre Iterationsverfahren (15.6.) [K, Ch. 1]

(Vertretung durch Thomas Satzger)

- Die Richardson-Iteration $x_{n+1} = (\text{Id} - A)x_n + b$ ist stationär mit Iterationsmatrix $\text{Id} - A$.
- Ist $\|\cdot\|$ eine submultiplikative Matrixnorm, so ist $\|M\| < 1$ hinreichend für die Konvergenz von $x_{n+1} = Mx_n + c$ für alle x_0, c gegen $x = (\text{Id} - M)^{-1}c$.
- Genau dann wenn $\rho(M) < 1$ gilt, konvergiert $x_{n+1} = Mx_n + c$ für alle x_0, c gegen $x = (\text{Id} - M)^{-1}c$.

3.2 Matrix-Splitting (17.6.) [S2, Lecture 25],[H, Ch. 17]

- Die Jacobi- und Gauß-Seidel-Iteration zerlegen $A = M - N$ mit $M = \text{diag}(\text{diag}(A))$ und $M = \text{tril}(A)$.
- Ist A strikt diagonal dominant per Zeile und erfüllt $A = M - N$ sowohl $\text{diag}(N) = 0$ als auch $|A| = |M| + |N|$, so sind A und M invertierbar und es gilt $\rho(M^{-1}N) < 1$. (M erbt die Diagonaldominanz von A .)
- Stationäre iterative Verfahren können instabil sein.

3.3 CG (22.6.) [K, Ch. 2]

- Die k -te Iterierte des konjugierten Gradienten-Verfahrens minimiert das Energiefunktional auf dem affin verschobenen Krylovraum $\mathcal{K}_k(A, r_0) + x_0$.
- $x_n = x_*$, wobei x_* die Lösung von $Ax = b$ ist mit $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit und $b \in \mathbb{R}^n$.
- Die Richtung des $(k + 1)$ -ten Updates ist A -orthogonal auf $\mathcal{K}_k(A, r_0)$.

3.4 CG & GMRES (24.6.) [K, Ch. 3], [TB, Lect. 35]

- Das CG-Verfahren berechnet pro Iteration eine Matrix-Vektorprodukt und zwei Skalarprodukte.
- Die k -te Iterierte des GMRES-Verfahrens minimiert das Residuum auf dem affin verschobenen Krylovraum $\mathcal{K}_k(A, r_0) + x_0$.
- $x_n = x_*$, wobei x_* die Lösung von $Ax = b$ ist mit $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ invertierbar und $b \in \mathbb{C}^n$.

3.5 Arnoldi (29.7.) [TB, Lect. 33], [S2, Lect. 16 & 19]

- a) Gilt $A = QHQ^*$ für ein unitäres Q und eine obere Hessenberg-Matrix H mit $h_{i+1,i} > 0$ für alle i , so sind Q und H durch $q_1 = Q(:, 1)$ eindeutig festgelegt.
- b) Im k -ten Schritt der Arnoldi-Iteration wird eine Orthonormalbasis des k -ten Krylovraum von A bezüglich des Startvektors q_1 konstruiert.
- c) Eigenpaare der oberen Hessenberg-Matrix einer Arnoldi-Zerlegung liefern approximative Eigenpaare von A .

3.6 Lanczos (1.7.) [TB, Lect. 34], [S2, Lect. 20]

- a) Das charakteristische Polynom der oberen Hessenbergmatrix einer Arnoldi-Zerlegung der Länge k minimiert $\|p(A)b\|$ über den monischen Polynomen vom Grad $\leq k - 1$.
- b) Die Arnoldi-Iteration einer symmetrischen Matrix ist die Lanczos-Iteration.
- c) Die Tridiagonalmatrix einer Lanczos-Iteration ist die Jacobi-Matrix einer Familie orthonormaler Polynome.

4 Gewöhnliche Differentialgleichungen

4.1 Konditionszahlen (6.7.) [DB, Kap. 3.1]

- a) Die Wronski-Matrix $W(t, s)$ eines Anfangswertproblems kodiert die Sensitivität der Lösungskurve gegenüber punktweisen Störungen zum Zeitpunkt s .
- b) $\kappa_0(t) = \|W(t, t_0)\|$ und $\kappa[t_0, t] = \max_{s \in [t_0, t]} \kappa_0(s)$ heißen die punktweise und intervallweise Kondition eines Anfangswertproblems
- c) Die Konditionszahlen eines Anfangswertproblems $x' = f(t, x), x(t_0) = x_0$ lassen sich durch $\partial_x f$ kontrollieren.

4.2 Einschrittverfahren (8.7.) [DB, Kap. 4.1]

- a) Das explizite Eulerverfahren $x_\Delta(t_{j+1}) = x_\Delta(t_j) + \tau_j f(t_j, x_\Delta(t_j))$ hat die Konvergenzordnung $p = 1$.
- b) Für eine konsistente diskrete Evolution $\Psi^{t+\tau, t}$ gilt für den Konsistenzfehler $\Phi^{t+\tau, t} x - \Psi^{t+\tau, t} x = o(\tau), \tau \rightarrow 0$.
- c) Gilt für eine diskrete Evolution $\Psi^{t+\tau, t} x = x + \psi(t, x, \tau)$, dass ihr Konsistenzfehler entlang der Lösungskurve $O(\tau^{p+1})$ und ihre Inkrementfunktion $\psi(t, x, \tau)$ bezüglich x lokal Lipschitz-stetig ist, so hat das zugehörige Einschrittverfahren die Konvergenzordnung p .

4.3 Runge-Kutta-Verfahren (13.7.) [DB, Kap. 4.2.1]

- a) Ein s -stufiges Runge-Kutta-Verfahren basiert auf s Funktionsauswertungen und wird von zwei Vektoren $b, c \in \mathbb{R}^s$ sowie einer unteren Dreiecksmatrix $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$ definiert.
- b) Hat ein s -stufiges Verfahren für alle glatten rechten Seiten die Konvergenzordnung p , so gilt $p \leq s$.
- c) Ist ein Runge-Kutta-Verfahren invariant unter Autonomisierung, so gilt $c = \sum_j A(:, j)$.

4.4 Ein Runge-Kutta-Verfahren (15.7.) [DB, Kap. 4.2.2]

- a) Die Evolution Φ^τ einer autonomen Differentialgleichung $x' = f(x)$ lässt sich durch ein Polynom in τ mit Koeffizienten, die von f -Ableitungen abhängen, approximieren.
- b) Die Evolution Ψ^τ eines gegen Autonomisierung invarianten Runge-Kutta-Verfahrens lässt sich durch ein Polynom in τ mit Koeffizienten, die von f -Ableitungen abhängen, approximieren.
- c) Die Approximation von Φ^τ und Ψ^τ bis auf $O(\tau^5)$ liefert ein Verfahren vierter Ordnung.

4.5 Schrittweitensteuerung (20.7.) [DB, Kap. 5.1 & 5.3]

- a) Ein adaptives Verfahren berechnet pro Zeitschritt einen lokalen Fehlerschätzer $[\varepsilon]$ und einen Schrittweitemvorschlag τ^* . Gilt $\|[\varepsilon]\| \leq \text{tol}$, so setzt man die nächste Schrittweite auf τ^* . Andernfalls wiederholt man den Schritt mit Schrittweite τ^* .
- b) Für ein Verfahren der Ordnung p ist $\tau^* = \sqrt[p+1]{\rho \cdot \text{tol} / \|[\varepsilon]\|} \cdot \tau$ ein möglicher Schrittweitemvorschlag.
- c) Für die Fehlerschätzung vergleicht man zwei diskrete Evolutions unterschiedlicher Ordnung.

4.6 Diskrete Kondition (22.7.) [DB, Kap. 4.1 & 4.2]

- a) Die diskrete Kondition κ_Δ misst die Sensitivität einer Gitterfunktion bezüglich Schwankungen des Anfangswertes.
- b) Für ein explizites Runge-Kutta Verfahren (b, A) gilt $\kappa_\Delta \leq e^{\gamma LT}$, wobei $L > 0$ die Lipschitz-Konstante der rechten Seite des Anfangswertproblems ist, $T > 0$ der Endzeitpunkt der Diskretisierung und die Konstante $\gamma > 0$ nur von (b, A) abhängt.
- c) Das explizite Euler-Verfahren, das Verfahren von Runge sowie „das“ Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung haben $\gamma = 1$.

4.7 Wiederholung (27.7.)

4.8 Klausur (29.7.)

Literatur

- [DB] P. Deuffhard, F. Bornemann, Numerische Mathematik 2 (3. Auflage), de Gruyter, 2008.
- [DR] P. Davis, P. Rabinowitz, Methods of numerical integration (2nd ed.), Dover Publications, 2007.
- [GLR] A. Glaser, X. Liu, V. Rokhlin: A Fast Algorithm for the Calculation of the Roots of Special Functions, SIAM J. Sci. Comp. 29(4): 1420-1-438, 2007.
- [H] N. Higham, Accuracy and Stability of Numerical Algorithms (2nd ed.), SIAM, 2002.
- [K] C. Kelley, Iterative methods for linear and nonlinear equations, SIAM, 1995.
- [I] J. Imhof, On the Method for Numerical Integration of Clenshaw and Curtis, Num. Math. 5: 138–141, 1963.
- [QSS1] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, Numerische Mathematik 1, Springer-Verlag, 2001.
- [QSS2] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, Numerische Mathematik 2, Springer-Verlag, 2004.
- [S1] G. Stewart, Afternotes on Numerical Analysis, SIAM, 1996.
- [S2] G. Stewart, Afternotes goes to Graduate School, SIAM, 1998.
- [T] L. Trefethen, Spectral Methods in MATLAB, SIAM, 2000.
- [T08] L. Trefethen, Is Gauss quadrature better than Clenshaw-Curtis?, SIAM Review 50(1): 67–87, 2008.
- [TB] L. Trefethen, D. Bau, Numerical Linear Algebra, SIAM, 1997.