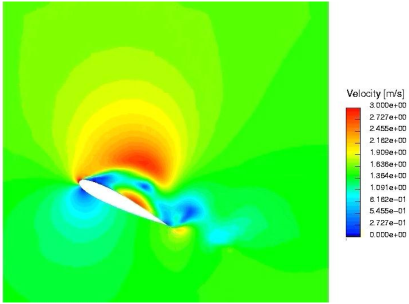


Angewandte Numerik

Vorlesung 1

Timo Tonn | WS 2024/25

Institut für Numerische Mathematik

1 Einleitung: Was ist Numerik?

Numerik ist (trotz des Namens) kein Teilgebiet der Reinen Mathematik
sondern der **Angewandten Mathematik**:

- mathematische Untersuchung von Berechnungsverfahren
- Algorithmen oder Methoden zur näherungsweisen Berechnung bestimmter Größen (z.B.) auf dem Computer

Zu berechnende Größen sind z.B.:

- **Auswertung von Funktionen** wie $\sin(1), e^2$
- **Lösung von Gleichungen**
  z.B. lineare $Ax = b$ oder nichtlineare Gleichungen: $f(x) = 0$
  - gesuchte Lösung $x^* \in \mathbb{R}^n$ mit $n > 1.000.000$
  - Differentialgleichungen: $u''(x) = f(x),\ x \in (0,1)$, gesucht: Funktion $u : [0,1] \to \mathbb{R}$ bei gegebenem $f : [0,1] \to \mathbb{R}$.
- **Näherung von Größen**, die nicht exakt berechnet werden können:
  - Ableitungen
  - Sensitivitäten
  - Integrale
  - Mittel- oder Erwartungswerte
  - Solche Größen werden nicht immer exakt bestimmt, oder die Berechnung würde zu lange dauern.
  - Andere Beispiele: optimale Steuerungen, optimale Strategien.

- Computer-gestützte **Simulationen** komplexer Vorgänge:
  (z.B. wenn Experimente teuer, aufwändig, gefährlich oder nicht möglich sind)
  - Wettervorhersage: Simulation der turbulenten Wolkenströmungen.
  - Strömungsmechanik: Aerodynamik, Flugzeug-, Automobil- oder Schiffsbau.
  - Bauingenieurwesen: Simulation der Statik oder der Eigenschwingung von Brücken und anderen Bauwerken.
  - Medizin: Simulation der Knochenheilung, Therapie von Gehirn–Tumoren.
  - Wirtschaftswissenschaften: Simulation von Aktienkursen, Bewertung von komplexen Finanz- oder Versicherungsprodukten, Bestimmung optimaler Anlage–Strategien.

Speziell beschäftigt sich die Numerik mit:

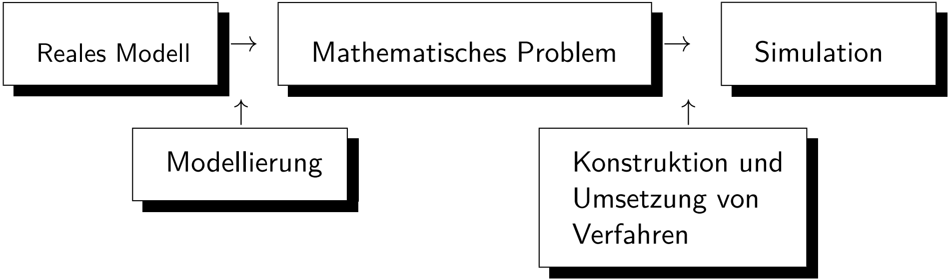
- Konstruktion **“geeigneter” Lösungsverfahren**, die
  - schnell (“**effizient**”) sind, teilweise in oder sogar schneller als in “Echtzeit”,
  - “**zuverlässig**”, mit *beweisbarer* Abschätzung z.B. der folgenden Form $\boxed{\|x_{\text{numerisch}} - x_{\text{exakt}}\| \leq \text{Toleranz}}$ (x_{exakt} unbekannt),
  - “**robust**” gegenüber Störungen wie z.B. Messfehlern, Modell–Unsicherheiten etc.

  sind;
- der **mathematischen Analyse** dieser Verfahren (Konvergenz, Geschwindigkeit, Aufwand, Robustheit etc.)
- deren effizienter **Realisierung** (Implementierung).

Die Numerik liegt an der Schnittstelle von Mathematik und Informatik. Teilgebiete:

- Numerische Lineare Algebra (Numerik 1),
- Numerische Analysis (Numerik 2),
- Numerische Optimierung (Numerik 3),
- Numerik von Differenzialgleichungen (Numerik 4 und Numerik von Partiellen Differenzialgleichungen)
- Numerical Finance
- Computational Physics, Computational Science
- CFD: Computational Fluid Dynamics
- Wissenschaftliches Rechnen
- ...

Mathematische Modellierung



Beispiel: Bestimmung des Abraums bei der Braunkohleförderung

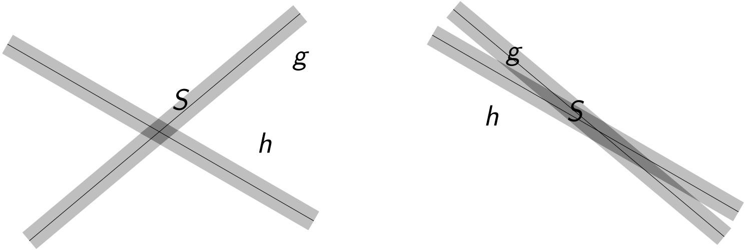
- Weg vom realen Modell zur Simulation an einem Beispiel.
- Bestimmung des Abraums, der durch die Förderung von Braunkohle entstanden ist
- exakte Form des entstandenen Lochs unbekannt,
- Flugzeug macht Tiefenmessungen an einzelnen Punkten.

Das ergibt folgendes Vorgehen:

1) *Reales Modell:* Volumen des Abraums; mit *Messungen (Experiment)* aus Flugzeugen, Satelliten;
2) *Mathematisches Problem:* Bestimme das Volumen des Lochs $\rightsquigarrow$ Volumenintegrale; verwende dabei Mess-Ergebnisse als Daten (*Modellierung*);
3) *Konstruktion und Umsetzung von Verfahren:* näherungsweise Berechnung der 3D–Integrale;
   Simulation: Programmiere das o.g. Verfahren

2.1 Kondition eines Problems I

- Bestimmung des Schnittpunkts S zweier Geraden g und h in der Ebene.
- Abhängigkeit von S (Output) bzgl. den Zeichenfehlern (Fehler im Input)



2.1 Kondition eines Problems II

In der Grafik zu sehen:

- Ausgabefehler hängt stark vom Winkel $\measuredangle(g, h)$ ab!
- g annähernd senkrecht $h \leadsto$ Ausgabefehler $\approx$ Eingabefehler: *gut konditioniert*.
- $\measuredangle(g, h)$ klein (g und h fast parallel) $\leadsto$ kleine Lageänderung von g oder h liefert ganz anderen Schnittpunkt: *schlecht konditioniertes* Problem.

$\leadsto$ Mathematische Präzisierung des Konditionsbegriffs nötig!

2.1 Kondition eines Problems III

Aufgabe

Seien X, Y Mengen und $\varphi : X \to Y$. Wir betrachten das Problem:

Gegeben sei $x \in X$, gesucht $y = \varphi(x)$.

Fragen:

- Wie wirken sich Störungen in den Daten x auf das Ergebnis y aus?
- Zu beachten: hat nichts mit der Realisierung auf dem Computer (dem Algorithmus) zu tun, ist einzig eine Eigenschaft der Problemstellung.

2.1 Kondition eines Problems IV

Noch einmal der Geradenschnittpunkt

Gegeben seien die 2 Geraden in folgender Form:

$$G_1 = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 = b_1\}, \quad G_2 = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 = b_2\},$$

mit: $b = (b_1, b_2)^T \in \mathbb{R}^2$, $a_{i,j}$ für $i, j = 1, 2$, $A := (a_{ij})_{i,j=1,2} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$

Gesucht: Schnittpunkt $x = (x_1, x_2)^T$ von G_1, G_2: $Ax = b \rightsquigarrow x = A^{-1}b$
(falls A regulär)

Also: $X = \mathbb{R}^{2\times 2} \times \mathbb{R}^2, \quad Y = \mathbb{R}^2$ und $\varphi(A, b) = A^{-1}b = x$.

2.1 Kondition eines Problems V

Und noch einmal der Kohleaushub

- **Gegeben:** Messungen $h(x) = z$, $h : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$
- Das Kohlerevier sei in $R := [a, b] \times [c, d] \subset \mathbb{R}^2$ enthalten.
- Formel für den Kohleaushub: $\boxed{f(h) = \int_a^b \int_c^d h(x)\, dx_2\, dx_1}$

$\rightsquigarrow$ $Y = \mathbb{R}$, $h \in \mathcal{R}(\mathbb{R}^2) = X$ (Menge der Rieman-integrierbaren Funktionen auf $\mathbb{R}^2$)

- X ist hier *unendlich-dimensional*!

2.1 Kondition eines Problems VI

Lineare skalare Abbildungen

- betrachte den Spezialfall

$$\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \quad \text{mit} \quad \varphi(x) := \langle a, x \rangle + b, \quad a \in \mathbb{R}^n, \quad b \in \mathbb{R}, \qquad (\langle x, y \rangle = x^T y)$$

- Seien x und $\widetilde{x} \in \mathbb{R}^n$ zwei Eingaben.
- es gilt (falls $\varphi(x) \neq 0$ und $x_j \neq 0$ für alle j):

$$\left| \frac{\varphi(x) - \varphi(\widetilde{x})}{\varphi(x)} \right| = \frac{|\langle a, x - \widetilde{x} \rangle|}{|\varphi(x)|} \leq \frac{1}{|\varphi(x)|} \sum_{j=1}^{n} |a_j||x_j - \widetilde{x}_j| = \sum_{j=1}^{n} \frac{|x_j|}{|\varphi(x)|} |a_j| \cdot \frac{|x_j - \widetilde{x}_j|}{|x_j|} \qquad (1)$$

2.1 Kondition eines Problems VII

Lineare skalare Abbildungen – Fortsetzung

$$\left|\frac{\varphi(x)-\varphi(\widetilde{x})}{\varphi(x)}\right| \leq \sum_{j=1}^{n} \frac{|x_j|}{|\varphi(x)|}|a_j| \cdot \frac{|x_j-\widetilde{x}_j|}{|x_j|}$$

- falls $\mathrm{eps} := \frac{|x_j-\widetilde{x}_j|}{|x_j|}$ für alle j dann ist der **unvermeidbaren Fehler** (selbst bei exakter Rechnung), der bei der Berechnung von φ auftritt:

$$\boxed{\mathrm{eps} \cdot \sum_{j=1}^{n} \frac{|x_j|}{|\varphi(x)|}|a_j|}$$

2.1 Kondition eines Problems VIII

Allgemeiner Fall

- sei nun $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenzierbar in x. Dann gilt mit der Taylor–Entwicklung

$$\varphi(x) - \varphi(\widetilde{x}) = \langle \nabla\varphi(x), x - \widetilde{x} \rangle + o(\|x - \widetilde{x}\|),$$

und (1) wird zu

$$\frac{|\varphi(x) - \varphi(\widetilde{x})|}{|\varphi(x)|} \leq \sum_{j=1}^{n} \frac{|x_j|}{|\varphi(x)|} \left| \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}(x) \right| \cdot \frac{|x_j - \widetilde{x}_j|}{|x_j|} + o(\|x - \widetilde{x}\|).$$

- dies ist der **Fehlerverstärkungsfaktor**

2.1 Kondition eines Problems IX

Definition (Konditionszahlen)

Sei $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ differenzierbar in $x \in \mathbb{R}^n$ sowie $\varphi_i(x) \neq 0,\ 1 \leq i \leq m$.
Die Zahlen

$$\kappa_{ij}(x) = \frac{|x_j|}{|\varphi_i(x)|} \left| \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j}(x) \right|, \qquad 1 \leq i \leq m,\ 1 \leq j \leq n, \tag{2}$$

heißen die *Konditionszahlen* von φ in x.

2.1 Kondition eines Problems X

Beispiele

1. Multiplikation: $\varphi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, \varphi(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2$,

$$\kappa_1(x) = \frac{|x_1|}{|x_1 x_2|} \left| \frac{\partial \varphi}{\partial x_1}(x) \right| = 1, \quad \kappa_2(x) = 1 \qquad \rightsquigarrow \text{“gut konditioniert”}$$

2. Addition: $\varphi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, \varphi(x_1, x_2) = x_1 + x_2$,

$$\kappa_1(x) = \frac{|x_1|}{|x_1 + x_2|} \left| \frac{\partial \varphi}{\partial x_1}(x) \right| = \frac{|x_1|}{|x_1 + x_2|}, \quad \kappa_2(x) = \frac{|x_2|}{|x_1 + x_2|}.$$

$\rightsquigarrow$ falls $|x_j| \gg |x_1 + x_2|$ große Verstärkung des relativen Fehlers;
in diesem Fall “schlecht konditioniert”.

2.1 Kondition eines Problems XI

3. Lösen der quadratischen Gleichung $x^2 + 2px - q = 0$
   - Fall $p, q > 0$:

$$\text{“Mitternachtsformel”:} \qquad \varphi(p,q) = -p + \sqrt{p^2+q}, \;\; \varphi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, \tag{3}$$

   dann: $\kappa_p = \dfrac{p}{\sqrt{p^2+q}} \leq 1, \quad \kappa_q = \dfrac{p+\sqrt{p^2+q}}{2\sqrt{p^2+q}} \leq 1$: “gut konditioniert”.
   - für $q < 0,\ q \approx -p^2$ ist das Problem “schlecht konditioniert”.

Fehler I

(a) Sei $\widetilde{x} \in X$ eine Approximation von $x \in X$, $\Delta x := x - \widetilde{x}$ ist der **Fehler**

- zu gegebener Norm $\|\cdot\|_X$ ist $\|x - \widetilde{x}\|_X$ der **absolute Fehler** von $\widetilde{x}$
- für $x \neq 0$ ist $\dfrac{\|x - \widetilde{x}\|_X}{\|x\|_X} = \dfrac{\|\Delta x\|_X}{\|x\|_X}$ der **relative Fehler** von $\widetilde{x}$

(b) seien $\|\cdot\|_X$, $\|\cdot\|_Y$ Normen auf X bzw. Y, $\Delta x := x - \tilde{x}$, $\Delta y := y - \tilde{y}$ und

$$\delta_x := \frac{\|\Delta x\|_X}{\|x\|_X}, \qquad \delta_y := \frac{\|\Delta y\|_Y}{\|y\|_Y}$$

die **relativen Ein- bzw. Ausgabefehler**.

Dann heißt $\kappa_\varphi := \dfrac{\delta_y}{\delta_x}$ bzw. $\kappa_{\varphi,\text{abs}} := \dfrac{\|\Delta y\|_Y}{\|\Delta x\|_X}$ die **relative/absolute Kondition** von $y = \varphi(x)$, $\varphi : X \to Y$.

(c) $y = \varphi(x)$ heißt **gut konditioniert**, wenn κ_φ “klein” ist für $\delta_x \to 0$

Fehler II

Beispiel Addition:

- $X = \mathbb{R}^2$, $x = (x_1, x_2)$, $\|x\|_X^2 = x_1^2 + x_2^2$ und $Y = \mathbb{R}$, $y = x_1 + x_2$, $\|y\|_Y = |x_1 + x_2|$

$$\begin{aligned}\kappa_{\varphi,\mathrm{abs}}^2 &= \frac{|x_1 - \widetilde{x}_1 + x_2 - \widetilde{x}_2|^2}{(x_1 - \widetilde{x}_1)^2 + (x_2 - \widetilde{x}_2)^2} = \frac{(x_1 - \widetilde{x}_1)^2 + (x_2 - \widetilde{x}_2)^2 + 2\,|x_1 - \widetilde{x}_1|\,|x_2 - \widetilde{x}_2|}{(x_1 - \widetilde{x}_1)^2 + (x_2 - \widetilde{x}_2)^2} \\ &= 1 + 2\frac{|x_1 - \widetilde{x}_1|\,|x_2 - \widetilde{x}_2|}{(x_1 - \widetilde{x}_1)^2 + (x_2 - \widetilde{x}_2)^2} \leq 2,\end{aligned}$$

(letzter Schritt mit Young-Ungleichung $ab \leq \frac{1}{2}(a^2 + b^2)$): $\kappa_{\varphi,\mathrm{abs}} \leq \sqrt{2}$

- Hingegen: $\kappa_\varphi = \kappa_{\varphi,\mathrm{abs}} \frac{\|x\|_X}{\|y\|_Y} = \kappa_{\varphi,\mathrm{abs}} \frac{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}{|x_1 + x_2|} \leq \sqrt{2}\,\frac{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}{|x_1 + x_2|}$
  unbeschränkt für $x_1 \approx -x_2$ ("Auslöschung")

Fehler III

Bemerkung

Relativer Fehler in der ∞-Norm:

$$\frac{\|x-\widetilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty} \approx 10^{-p},$$

bedeutet, dass $\widetilde{x}$ näherungsweise p korrekte signifikante Stellen hat.

2.2 Stabilität eines Algorithmus I

Jeder Algorithmus lässt sich auffassen als Abbildung $\widetilde{\varphi} : X \to Y$.
Erwartungen an einen "guten" Algorithmus:

- unwesentliche Verstärkung der relativen Fehler, also $\approx \kappa_{ij}(x)$ des Problems φ
- Für $\widetilde{\varphi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ sollte gelten eine Abschätzung der Form:

$$\left| \frac{\widetilde{\varphi}_i(\widetilde{x}) - \widetilde{\varphi}_i(x)}{\widetilde{\varphi}_i(x)} \right| \leq C_{i1} \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \kappa_{ij}(x) \frac{|\widetilde{x}_j - x_j|}{|x_j|}}_{\geq \frac{|\varphi_i(\widetilde{x}) - \varphi_i(x)|}{|\varphi_i(x)|} + o(\|\tilde{x} - x\|)} + C_{i2}\, n \,\mathrm{eps} \quad (i = 1 \ldots, m), \qquad (4)$$

mit Konstanten C_{i1}, $C_{i2} \geq 0$, welche nicht viel größer als 1 sind.

2.2 Stabilität eines Algorithmus II

Definition (Numerische Stabilität eines Algorithmus)

- Ein Algorithmus $\widetilde{\varphi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ zur Lösung von $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ heißt ***numerisch stabil***, falls (4) gilt mit "vernünftigen" Konstanten C_{i1}, C_{i2}.
- Andernfalls heißt der Algorithmus *numerisch instabil*.

2.2 Stabilität eines Algorithmus III

Beispiel: Quadratische Gleichung

Wir untersuchen zwei verschiedene Verfahren zur Lösung der quadratischen Gleichung.

$$\varphi(p, q) = -p + \sqrt{p^2 + q} \text{ löst } x^2 + 2px - q = 0.$$

1. $u = \sqrt{p^2 + q}, \quad y = \varphi_1(p, u) = -p + u$: falls $u \approx p$ $(p \gg q)$: $\kappa_{\varphi_1} \gg 1$
2. $u = \sqrt{p^2 + q}, \quad y = \varphi_2(p, q, u) = \frac{q}{p+u}$: (Satz von Viëta): $\kappa_{\varphi_2} \leq 1$

Algorithmus 1. ist numerisch instabil, aber Algorithmus 2. ist numerisch stabil.

2.2 Stabilität eines Algorithmus IV

Bemerkung

Zu beachten beim Algorithmus in obigem Beispiel:

- die numerische Auswertung der Funktion φ_1 für sich genommen ist *nicht* numerisch instabil!
- problematisch ist $\varphi_1(p, \sqrt{p^2 + q})$ zu berechnen.
- das Zusammensetzen zweier stablier Algorithmen kann instabil sein.