

Methoden der Numerik

Christina Eilers, Julian Lüken

4. April 2019

Mathematisches Institut Göttingen

Aufgabe 1 - Wärmegleichung

Wärmegleichung

Die Wärmegleichung lautet

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \nabla^2 u$$

Mit $u : \Omega \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ mit folgenden Randbedingungen:

- $u(x, t) = R$ für $x \in \partial\Omega$
- $u(x, 0) = f(x)$, wobei f beliebig aber fest.

Diskretisierung der Wärme Gleichung

Nimm endlich viele, äquidistante Stellen aus Ω , sodass Folgen entstehen mit $x_i = ih + x_0$ und $y_j = jh + y_0$. Wähle zusätzlich für die Zeit $t_k = k\Delta t + t_0$ Wir schreiben $u_{i,j}^k$ für die (i,j) -te Stelle zum Zeitpunkt k . Für jedes $k \in \mathbb{N}$ entsteht eine $m \times m$ Matrix. Zum Zeitpunkt k haben wir dann:

$$\begin{pmatrix} u_{0,0}^k & u_{0,1}^k & \cdots & u_{0,m}^k \\ u_{1,0}^k & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \\ u_{m,0}^k & \cdots & & u_{m,m}^k \end{pmatrix}$$

Diskretisierung der Wärme Gleichung

Schreibe diese Matrix als Vektor, damit wir einen linearen Operator in Form einer Matrix darauf anwenden können, folgendermaßen:

$$u^k = \begin{pmatrix} u_{0,0}^k \\ u_{0,1}^k \\ \vdots \\ u_{0,m}^k \\ u_{1,0}^k \\ u_{1,1}^k \\ \vdots \\ u_{m,m}^k \end{pmatrix}$$

Diskretisierung

Aus der Taylor-Entwicklung folgt für die Ableitung nach t

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, y, t) = \frac{u(x, y, t + \Delta t) - u(x, y, t)}{\Delta t} + O(\Delta t^2)$$

und für den Laplace-Operator

$$\begin{aligned} \nabla^2 u(x, y, t) = \frac{1}{4h^2} & \left(u(x - h, y, t) + u(x + h, y, t) \right. \\ & \left. + u(x, y - h, t) + u(x, y + h, t) - 4u(x, y, t) \right) + O(h^4) \end{aligned}$$

Für diese Terme können wir im diskreten Fall unter Vernachlässigung des Fehlers schreiben

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\Delta t} \quad \text{und} \quad \frac{1}{4h^2} \left(u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k - 4u_{i,j}^k \right)$$

Explizites Euler-Verfahren

Sei ab jetzt $h = 1$ und $\Delta t = 1$. Für das explizite Euler-Verfahren suchen wir eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m^2 \times m^2}$ für die gilt:

$$u^{k+1} = u^k + \alpha A u^k$$

Mit den aus der Taylor-Entwicklung gewonnenen Diskretisierungen für unsere Differentialoperatoren erhalten wir mit ein paar Umformungen die Iterationsvorschrift

$$u_{i,j}^{k+1} = \alpha \left(\frac{u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k}{4} \right) + (1 - \alpha) u_{i,j}^k$$

Explizites Euler-Verfahren

Im expliziten Euler-Verfahren sieht die Verfahrensmatrix dann so aus:

$$A = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} L & I & 0 & \dots & 0 \\ I & L & I & & \\ 0 & I & L & & \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ & & & & L & I \\ 0 & \dots & & I & L \end{bmatrix} \quad \text{wobei} \quad L = \text{tridiag}(1, -4, 1)$$

Damit wird das explizite Euler-Verfahren in unserem Fall zu

$$u^{k+1} = u^k + \alpha A u^k = (\alpha A + I) u^k$$

Implizites Euler-Verfahren

Im impliziten Euler-Verfahren gilt es nun, eine Iterationsvorschrift der Form

$$u^{k+1} = u^k + \alpha B u^{k+1}$$

zu finden. Aus dem expliziten Euler-Verfahren lässt sich dafür

$$B = A(\alpha A + I)^{-1}$$

herleiten. Wir gewinnen daraus ein Gleichungssystem in der Form $Cx = d$, welches wir in jedem Schritt nach x lösen können

$$u^k = (I - \alpha A(\alpha A + I)^{-1})u^{k+1}$$

Bemerkung:

Hierfür eignet sich das CG-Verfahren.

Weiterhin ist das LGS nur lösbar, wenn $\alpha \neq 1$

Durch Umstellen der Wärmegleichung mit A von vorhin können wir durch folgende Iterationsvorschrift mit gegebenen Startwerten u^0 den Verlauf der Wärmegleichung simulieren:

$$u^{k+1} = (\alpha A + I)u^k$$

Bemerkung:

Wenn man u^k als Matrix schreibt, so kann man ebenfalls mit $L_\alpha = 0.5 \cdot \alpha \cdot \text{tridiag}(1, -2, 1) + I$ den gleichen Schritt folgendermaßen durchführen:

$$u^{k+1} = \frac{1}{2}(L_\alpha u^k + u^k L_\alpha)$$

Zwar werden so pro Schritt zwei Matrixmultiplikationen und eine Addition durchgeführt, allerdings nur mit $m \times m$ Matrizen statt mit $m^2 \times m^2$ Matrizen.

Konjugierte Gradienten

Wir erinnern uns an das implizite Euler-Verfahren mit dem Gleichungssystem

$$u^k = (I - \alpha A(\alpha A + I)^{-1})u^{k+1}$$

Um dieses zu lösen, definieren wir

$$K = (I - \alpha A(\alpha A + I)^{-1})$$

In jedem Schritt unserer Iteration lösen wir nun das Gleichungssystem

$$u^k = Ku^{k+1}$$

mithilfe des Algorithmus der konjugierten Gradienten.

Konjugierte Gradienten

Wir wählen $b = u^k$. In jedem Schritt führen wir aus

Algorithm 1 Konjugierte-Gradienten Verfahren

- 1: $x_0 \leftarrow b, k \leftarrow 0, r_0 \leftarrow b - Kx_0, d_0 \leftarrow r_0$
 - 2: **while** $r_k^T r_k > \varepsilon$ **do**
 - 3: $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T K d_k}$
 - 4: $x_{k+1} \leftarrow x^k + \alpha_k d_k$
 - 5: $r_{k+1} \leftarrow r_k - \alpha_k K d_k$
 - 6: $\beta_k \leftarrow \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$
 - 7: $d_{k+1} \leftarrow r_{k+1} + \beta_k d_k$
 - 8: $k \leftarrow k + 1$
 - 9: **end while**
 - 10: **return** x_k
-

Gauss-Elimination

Man kann das LGS ebenfalls mit Gauss-Elimination lösen. Zunächst brauchen wir dafür die LU-Zerlegung $K = LU$, wobei L untere Dreiecksmatrix und U obere Dreiecksmatrix.

Algorithm 2 LU-Zerlegung

```
1:  $U \leftarrow K, L \leftarrow I$ 
2: for  $i \in \{1 \dots n\}$  do
3:   for  $k \in \{i + 1 \dots n\}$  do
4:      $L_{ki} \leftarrow \frac{U_{ki}}{U_{ii}}$ 
5:     for  $j \in \{i \dots n\}$  do
6:        $U_{kj} \leftarrow U_{kj} - L_{ki} \cdot U_{ij}$ 
7:     end for
8:   end for
9: end for
10: return  $L, U$ 
```

Gauss-Elimination

Jetzt löst man durch Vorwärtselimination

$$Ly = u^k$$

und danach durch Rückwärtselimination

$$Uu^{k+1} = y$$

Bemerkung:

Die LU -Zerlegung von K müssen wir für unsere Zwecke nur einmal bestimmen.

Aufgabe 2 - Newton-Verfahren

Löse

$$\min_{x \in \mathbb{R}^7} f(x) = \frac{1}{2} \|g(x)\|_2^2$$

mit $g : \mathbb{R}^7 \rightarrow \mathbb{R}^8$, $\nabla g : \mathbb{R}^7 \rightarrow \mathbb{R}^{7 \times 8}$ und $\nabla^2 g : \mathbb{R}^7 \rightarrow \mathbb{R}^{7 \times 7 \times 8}$. $x_0 = 0$ und für die Lösung soll gelten $\|\nabla f(\bar{x})\|_2 < 10^{-11}$

Newton-Verfahren

Im Newton-Verfahren nutzen wir die Iterationsvorschrift

$$x_{n+1} = x_n - (\nabla^2 f(x))^{-1} \nabla f(x)$$

Oder in Pseudocode:

Algorithm 3 Newton-Verfahren

```
1:  $x \leftarrow 0 \in \mathbb{R}^7$ 
2: while  $\|\nabla f(x)\|_2 \geq 10^{-11}$  do
3:    $H_{\text{inv}} \leftarrow \nabla^2 f(x)$ 
4:    $x \leftarrow x - H_{\text{inv}} \nabla f(x)$ 
5: end while
6: return  $x$ 
```

Bemerkung:

Das funktioniert nur, wenn $\nabla^2 f$ existiert und bekannt ist.

Quasi-Newton-Verfahren

Algorithm 4 Quasi-Newton-Verfahren

```
1:  $x_0 \leftarrow 0 \in \mathbb{R}^7$ 
2:  $H_0 = I$ 
3:  $p_0 = -\nabla f(x_0)$ 
4:  $k = 0$ 
5: while  $\|\nabla f(x)\|_2 \geq 10^{-11}$  do
6:    $\alpha \leftarrow \operatorname{argmin}_{\alpha \in \mathbb{R}} f(x_k + \alpha p_k)$ 
7:    $s_k \leftarrow \alpha p_k$ 
8:    $x_{k+1} \leftarrow x_k + s_k$ 
9:    $y_k \leftarrow \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$ 
10:   $H_k = \text{update}(H_k)$ 
11:   $k \leftarrow k + 1$ 
12: end while
13: return  $x_k$ 
```

Quasi-Newton-Updates

Für die Funktion update auf der letzten Folie gibt es verschiedene Möglichkeiten, beispielsweise:

$$\begin{array}{l|l} \text{BFGS} & H_{k+1} = H_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} + \frac{H_k s_k s_k^T H_k^T}{s_k^T H_k s_k} \\ \text{Broyden} & H_{k+1} = H_k + \frac{s_k - H_k y_k}{y_k^T y_k} y_k^T \end{array}$$

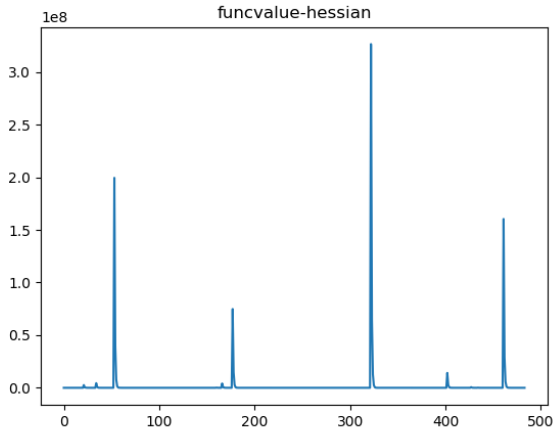
Lösungen

	klassisch	BFGS	Broyden
$f(x)$	2291.020503182124	2291.0205031821224	2291.020503182123
$\nabla f(x)$	$\begin{pmatrix} 0 \\ -1.137 \\ 0.941 \\ -0.284 \\ 5.684 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot 10^{-13}$	$\begin{pmatrix} -2.274 \\ 67.075 \\ 21.245 \\ -7.248 \\ 37.232 \\ -2.256 \\ -2.487 \end{pmatrix} \cdot 10^{-13}$	$\begin{pmatrix} -3.411 \\ -14.780 \\ -4.814 \\ 1.705 \\ 86.118 \\ -3.606 \\ 0.249 \end{pmatrix} \cdot 10^{-13}$

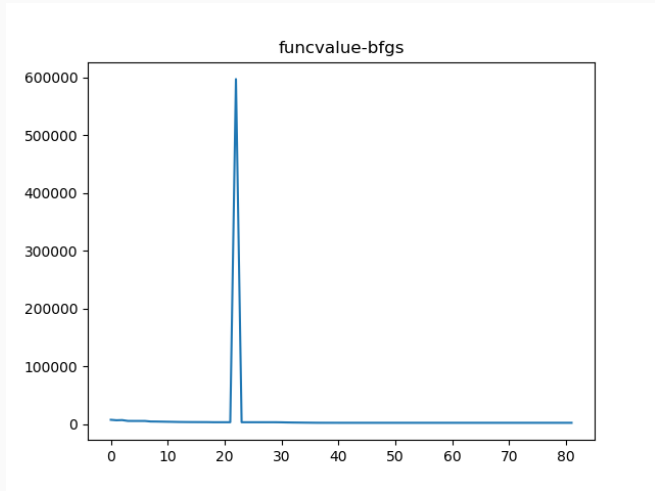
Hesse-Matrizen

$$H^{-1} = \begin{pmatrix} 2.151 & 0.598 & 3.538 & 16.956 & -0.078 & -2.615 & -0.039 \\ 0.598 & 3.288 & 0.121 & 22.659 & 0.310 & 13.016 & -0.011 \\ 3.538 & 0.121 & 13.622 & 45.657 & -0.220 & -8.099 & -0.260 \\ 16.956 & 22.659 & 45.657 & 323.998 & 1.294 & 58.392 & -0.897 \\ -0.078 & 0.310 & -0.220 & 1.294 & 0.148 & 2.717 & 0.001 \\ -2.615 & 13.016 & -8.099 & 58.392 & 2.717 & 93.675 & 0.047 \\ -0.039 & -0.011 & -0.260 & -0.897 & 0.001 & 0.047 & 3.256 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$
$$H_{\text{BFGS}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1.992 & 0.337 & 3.517 & 14.757 & -0.068 & -3.207 & -0.025 \\ 0.337 & 2.532 & 0.301 & 17.282 & 0.273 & 10.557 & -0.003 \\ 3.517 & 0.301 & 13.449 & 46.290 & -0.189 & -7.443 & -0.278 \\ 14.757 & 17.282 & 46.290 & 284.436 & 1.163 & 42.147 & -0.838 \\ -0.068 & 0.273 & -0.189 & 1.163 & 0.135 & 2.584 & -0.014 \\ -3.207 & 10.557 & -7.443 & 42.147 & 2.584 & 80.445 & 0.562 \\ -0.025 & -0.003 & -0.278 & -0.838 & -0.014 & 0.562 & 3.115 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$
$$H_{\text{Broyden}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1.003 & 0.353 & 2.534 & 10.787 & -0.024 & -0.808 & -0.305 \\ 0.016 & 0.559 & 1.185 & 4.623 & 0.082 & 4.472 & -0.130 \\ 0.035 & 0.129 & 9.330 & 30.184 & -0.035 & -1.636 & -0.773 \\ 0.301 & 4.001 & 62.421 & 234.475 & -0.381 & 2.729 & -5.924 \\ -0.171 & 0.436 & -1.168 & -0.179 & 0.145 & 2.657 & 0.025 \\ 1.258 & -0.488 & 22.002 & 72.069 & 0.185 & 7.744 & -1.962 \\ 0.009 & -0.057 & -1.015 & -3.702 & 0.007 & -0.004 & 1.718 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

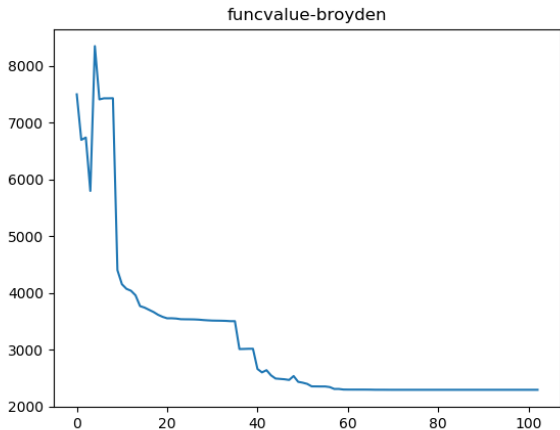
Funktionswerte für Newton-Verfahren



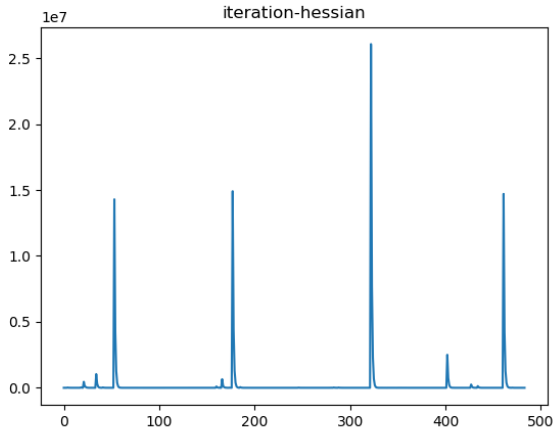
Funktionswerte für Quasi-Newton: BFGS



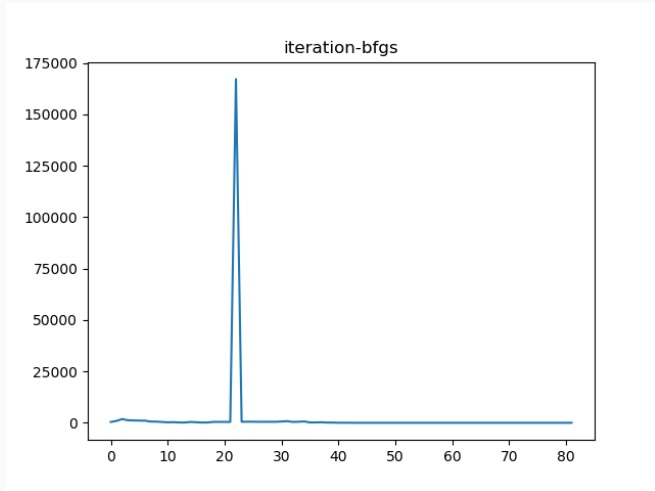
Funktionswerte für Quasi-Newton: Broyden



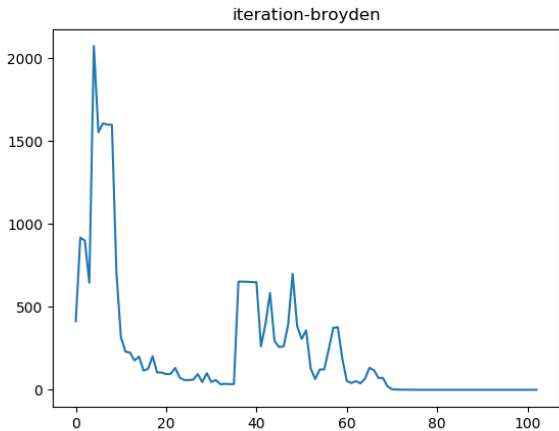
Grad für Newton-Verfahren



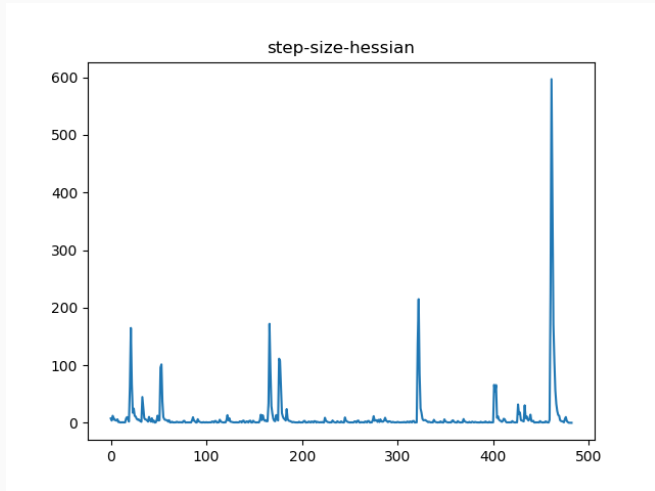
Grad für Quasi-Newton: BFGS



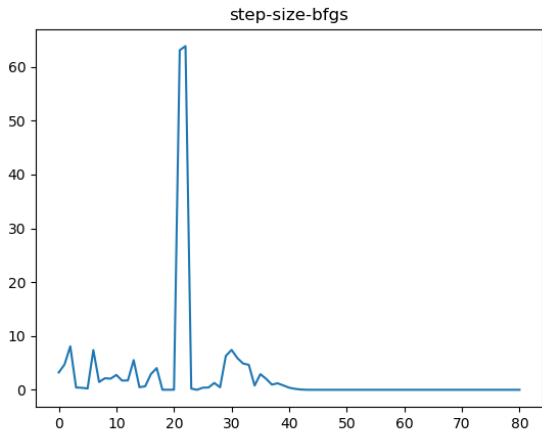
Grad für Quasi-Newton: Broyden



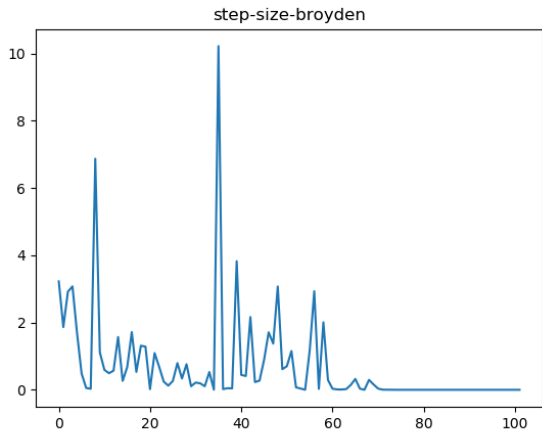
Schrittweite für Newton-Verfahren



Schrittweite für Quasi-Newton: BFGS



Schrittweite für Quasi-Newton: Broyden



Aufgabe 3 - Norm

Problemstellung

Sei

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{7} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{5} & \frac{1}{8} & \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{9} & & \ddots \\ \frac{1}{10} & & \ddots & \end{pmatrix}$$

Was ist $\|A\|_2$ auf 10 signifikante Stellen genau?

Lösungsverfahren: Teil I

Es gilt nach Vorlesung

$$\|A_n\|_2 \leq \|A_m\|_2 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \|A_k\|_2 = \|A\|_2 \leq \|A\|_F = \frac{\pi}{\sqrt{6}}$$

mit $n \leq m$ und A_n der linken oberen $n \times n$ -Teilmatrix von A .

Sei jetzt A_k die linke obere $k \times k$ Teilmatrix von A und $B := A_k^T A_k$. B ist symmetrisch \rightarrow alle Eigenwerte sind reell. Sei $v \in \mathbb{R}^k$ der EV von B zum betragsgrößten EW λ .

$$\begin{aligned} Bv &= \lambda v \rightarrow \|Bv\|_2 = \|\lambda v\|_2 = |\lambda| \|v\|_2 \\ \rightarrow \sqrt{\|A_k^T A_k v\|_2} &= \sqrt{\|Bv\|_2} = \sqrt{|\lambda| \|v\|_2} = \sqrt{|\lambda|} \sqrt{\|v\|_2} \\ \rightarrow \frac{\sqrt{\|A_k^T A_k v\|_2}}{\sqrt{\|v\|_2}} &= \sqrt{|\lambda|} = \sqrt{\rho(B)} = \|A_k\|_2 \end{aligned}$$

Untere Grenze

Erstelle A_n für ein $n \in \mathbb{N}$ und berechne

$$\|A_n\|_2 = \sqrt{\rho(A_n^T A_n)} = \sqrt{\rho(B)}$$

Das von-Mises-Verfahren liefert schnell eine Abschätzung an den betragsgrößten Eigenwert λ von B und gibt auch den dazugehörigen Eigenvektor v zurück. $\alpha = \sqrt{|\lambda|}$ ist untere Grenze von $\|A\|_2$

Lösungsverfahren: Teil II

Der EV v ist normiert und hat nur positive Einträge. Außerdem sind die Einträge mit steigendem Index monoton fallend. Ist in

$$\frac{\sqrt{\|A_k^T A_k v\|_2}}{\sqrt{\|v\|_2}} = \sqrt{|\lambda|} = \|A_k\|_2$$

$\|v\|_2$ etwas größer als 1, so $\sqrt{\|A_k^T A_k v\|_2} > \|A_k\|_2$

Ist $\|v\|_2$ groß genug, so ist sogar $\sqrt{\|A_k^T A_k v\|_2} > \|A\|_2$

Obere Grenze

Das von Mises-Verfahren gibt einen EV $v \in \mathbb{R}^n$ zurück. Erweitere diesen auf $m \gg n$ Dimensionen und nenne ihn \tilde{v} folgendermaßen:

$$\tilde{v}_i := \begin{cases} v_i & \text{für } i \in \{1, \dots, n\} \\ v_n & \text{für } i \in \{n+1, \dots, m\} \end{cases}$$

Bemerkung:

$\|\tilde{v}\|_2$ ist etwas größer als 1

Algorithm 5 Finden einer oberen Grenze für $\|A\|_2$

- 1: $x \leftarrow A_m \tilde{v}$
 - 2: $y \leftarrow A_m^T x$
 - 3: $\beta = \sqrt{\|y\|_2}$
 - 4: **return** β , eine obere Grenze von $\|A\|_2$
-

Vergleich der Grenzen ergibt:

$$\|A\|_2 = 1.2742241528 \quad (11 \text{ Stellen})$$

Um hinreichend genaue Ergebnisse zu erreichen, genügt $n = 1800$ und $m = 2n$

n	m	α	β	Genauigkeit
8000	10000	1.2742241528116438	1.2742241528249134	11
8000	16000	1.2742241528116438	1.2742241528221396	11
12000	24000	1.2742241528182108	1.2742241528211977	11
6200	20000	1.2742241528011655	1.2742241528269063	11
6200	50000	1.2742241528011655	1.2742241528300235	11
1800	100000	1.2742241520093243	1.2742241533011174	9
1800	4500	1.2742241520093243	1.2742241529847291	10
1800	3600	1.2742241520093243	1.2742241528986895	10