Methoden der Numerik

Christina Eilers, Julian Lüken

6. April 2019

Mathematisches Institut Göttingen

Aufgabe 1 - Wärmegleichung

Wärmegleichung

Die Wärmegleichung lautet

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \nabla^2 u = 0$$

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

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

Diskretisierung der Wärmegleichung

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 $u^k_{i,j}$ 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:

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

Diskretisierung der Wärmegleichung

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

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

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

$$\nabla^2 u(x, y, t) = \frac{1}{4h^2}\Big(u(x - h, y, t) + u(x + h, y, t) + u(x, y - h, t) + u(x, y + h, t) - 4u(x, y, t)\Big) + O(h^4)$$

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:

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

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 z.B. das CG-Verfahren.

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

Finite Differenzen

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

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

Dies entspricht dem expliziten Euler-Verfahren.

Finite Differenzen II

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:

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

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

$x_0 \leftarrow b$, $k \leftarrow 0$, $r_0 \leftarrow b - Kx_0$, $d_0 \leftarrow r_0$
while $r_k^T r_k > \varepsilon$ **do**
    $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T K d_k}$
    $x_{k+1} \leftarrow x^k + \alpha_k d_k$
    $r_{k+1} \leftarrow r_k - \alpha_k K d_k$
    $\beta_k \leftarrow \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$
    $d_{k+1} \leftarrow r_{k+1} + \beta_k d_k$
    $k \leftarrow k + 1$
end while
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** $i \in \{1...n\}$ **do**
3: **for** $k \in \{i+1...n\}$ **do**
4: $L_{ki} \leftarrow \frac{U_{ki}}{U_{ii}}$
5: **for** $j \in \{i...n\}$ **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

Problemstellung

Löse

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

mit $g : \mathbb{R}^7 \to \mathbb{R}^8$, $\nabla g : \mathbb{R}^7 \to \mathbb{R}^{7\times 8}$ und $\nabla^2 g : \mathbb{R}^7 \to \mathbb{R}^{7\times 7\times 8}$. $x_0 = 0$ 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: $\quad H_{\text{inv}} \leftarrow \nabla^2 f(x)$
4: $\quad x \leftarrow x - H_{\text{inv}} \nabla f(x)$
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

$x_0 \leftarrow 0 \in \mathbb{R}^7$
$H_0 = I$
$p_0 = -\nabla f(x_0)$
$k = 0$
while $||\nabla f(x)||_2 \geq 10^{-11}$ **do**
    $\alpha \leftarrow \text{argmin}_{\alpha \in \mathbb{R}} f(x_k + \alpha p_k)$
    $s_k \leftarrow \alpha p_k$
    $x_{k+1} \leftarrow x_k + s_k$
    $y_k \leftarrow \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$
    $H_{k+1} \leftarrow \text{update}(H_k)$
    $k \leftarrow k + 1$
end while
return x_k

Quasi-Newton-Updates

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

BFGS	$H_{k+1} = H_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} + \frac{H_k s_k s_k^T H_k^T}{s_k^T H_k s_k}$
Broyden	$H_{k+1} = H_k + \frac{s_k - H_k y_k}{y_k^T y_k} y_k^T$

Lösungen

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

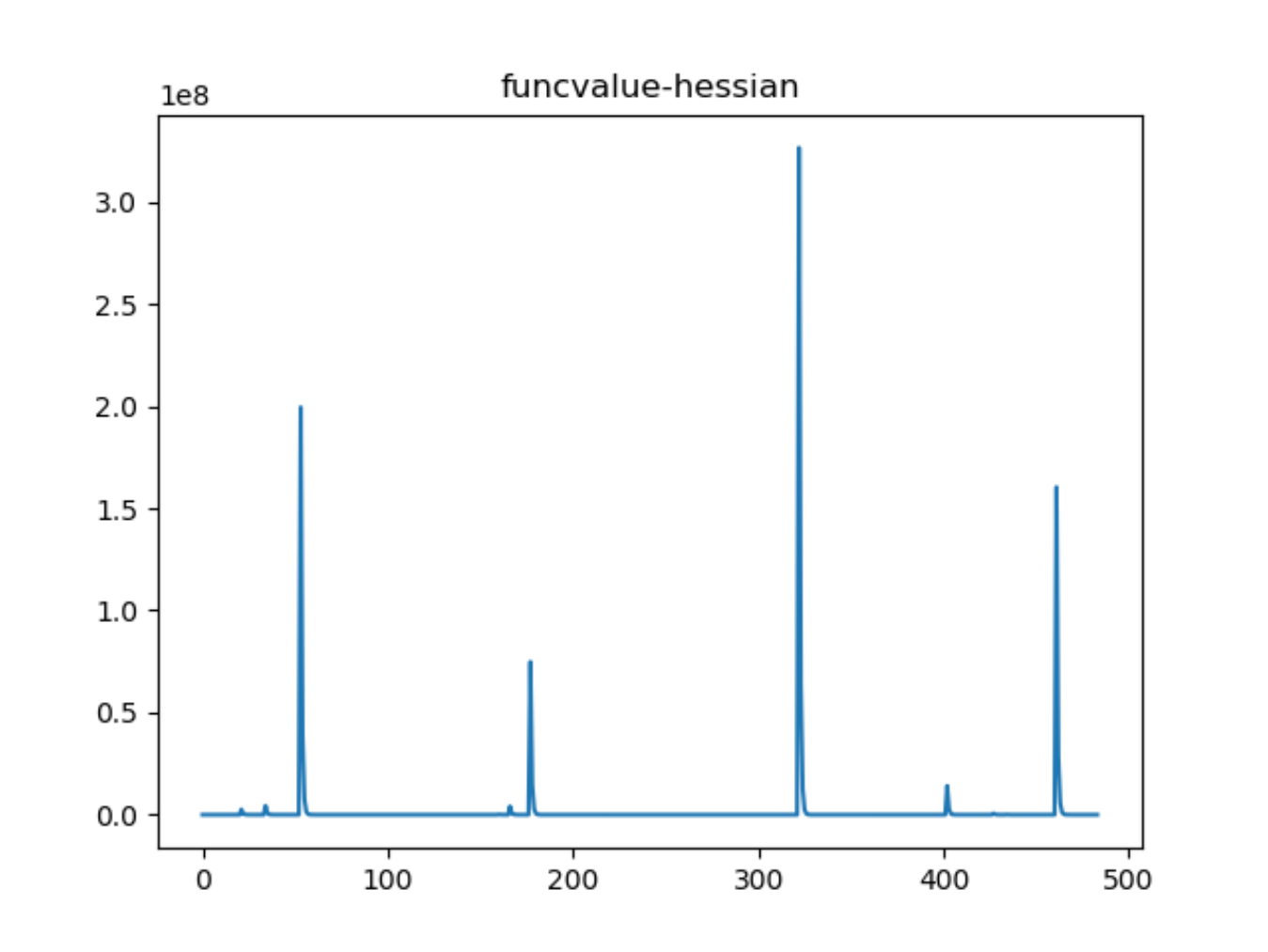
Hesse-Matrizen

$$H^{-1} = \begin{pmatrix} 2.151 & 0.598 & 3.538 & 16.956 & -0.078 & -2.615 & -0.039 \\ 0.598 & 3.288 & 0.121 & 22.659 & 0.310 & 13.016 & -0.011 \\ 3.538 & 0.121 & 13.622 & 45.657 & -0.220 & -8.099 & -0.260 \\ 16.956 & 22.659 & 45.657 & 323.998 & 1.294 & 58.392 & -0.897 \\ -0.078 & 0.310 & -0.220 & 1.294 & 0.148 & 2.717 & 0.001 \\ -2.615 & 13.016 & -8.099 & 58.392 & 2.717 & 93.675 & 0.047 \\ -0.039 & -0.011 & -0.260 & -0.897 & 0.001 & 0.047 & 3.256 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

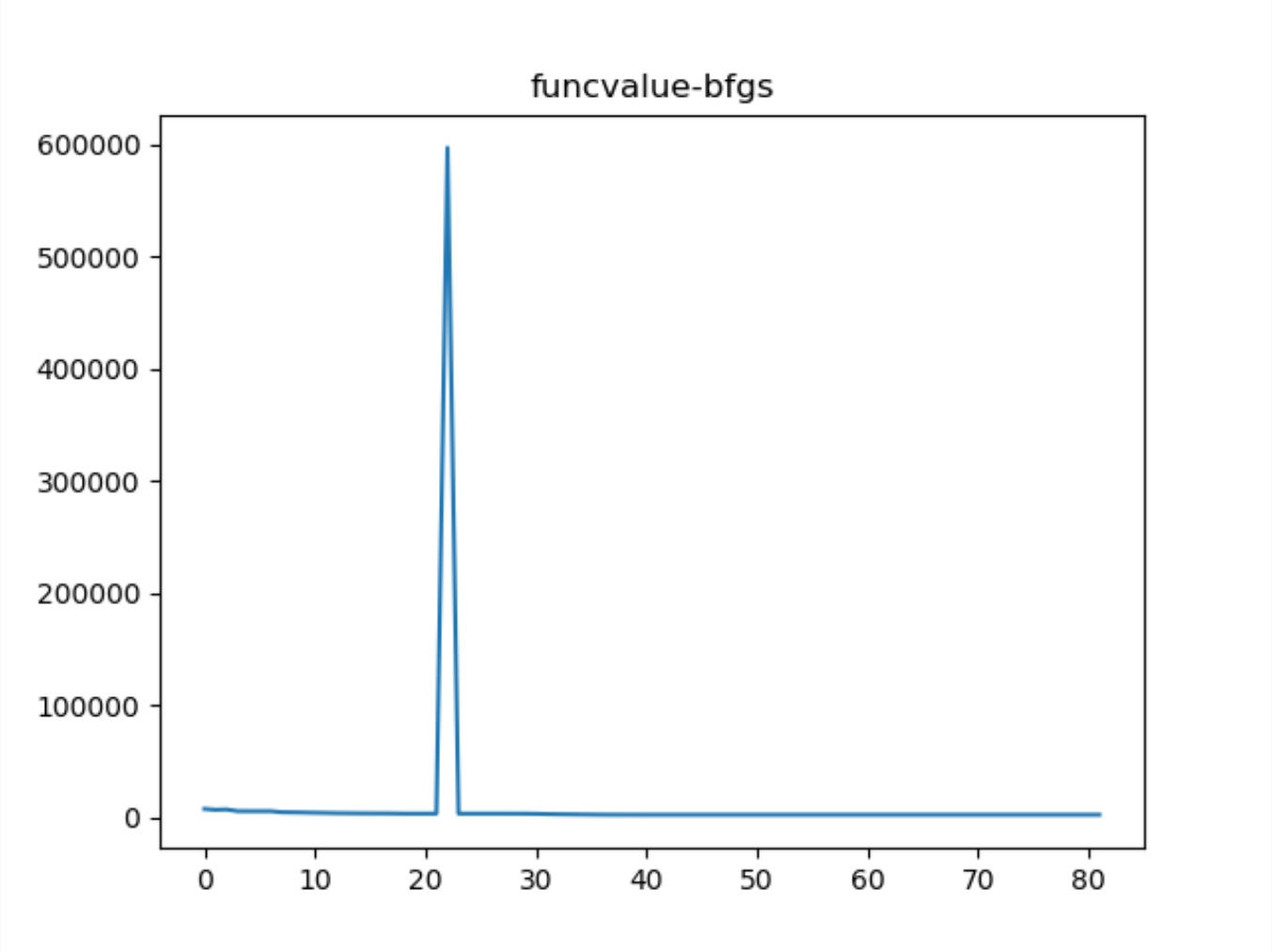
$$H^{-1}_{\text{BFGS}} = \begin{pmatrix} 1.992 & 0.337 & 3.517 & 14.757 & -0.068 & -3.207 & -0.025 \\ 0.337 & 2.532 & 0.301 & 17.282 & 0.273 & 10.557 & -0.003 \\ 3.517 & 0.301 & 13.449 & 46.290 & -0.189 & -7.443 & -0.278 \\ 14.757 & 17.282 & 46.290 & 284.436 & 1.163 & 42.147 & -0.838 \\ -0.068 & 0.273 & -0.189 & 1.163 & 0.135 & 2.584 & -0.014 \\ -3.207 & 10.557 & -7.443 & 42.147 & 2.584 & 80.445 & 0.562 \\ -0.025 & -0.003 & -0.278 & -0.838 & -0.014 & 0.562 & 3.115 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

$$H^{-1}_{\text{Broyden}} = \begin{pmatrix} 1.003 & 0.353 & 2.534 & 10.787 & -0.024 & -0.808 & -0.305 \\ 0.016 & 0.559 & 1.185 & 4.623 & 0.082 & 4.472 & -0.130 \\ 0.035 & 0.129 & 9.330 & 30.184 & -0.035 & -1.636 & -0.773 \\ 0.301 & 4.001 & 62.421 & 234.475 & -0.381 & 2.729 & -5.924 \\ -0.171 & 0.436 & -1.168 & -0.179 & 0.145 & 2.657 & 0.025 \\ 1.258 & -0.488 & 22.002 & 72.069 & 0.185 & 7.744 & -1.962 \\ 0.009 & -0.057 & -1.015 & -3.702 & 0.007 & -0.004 & 1.718 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

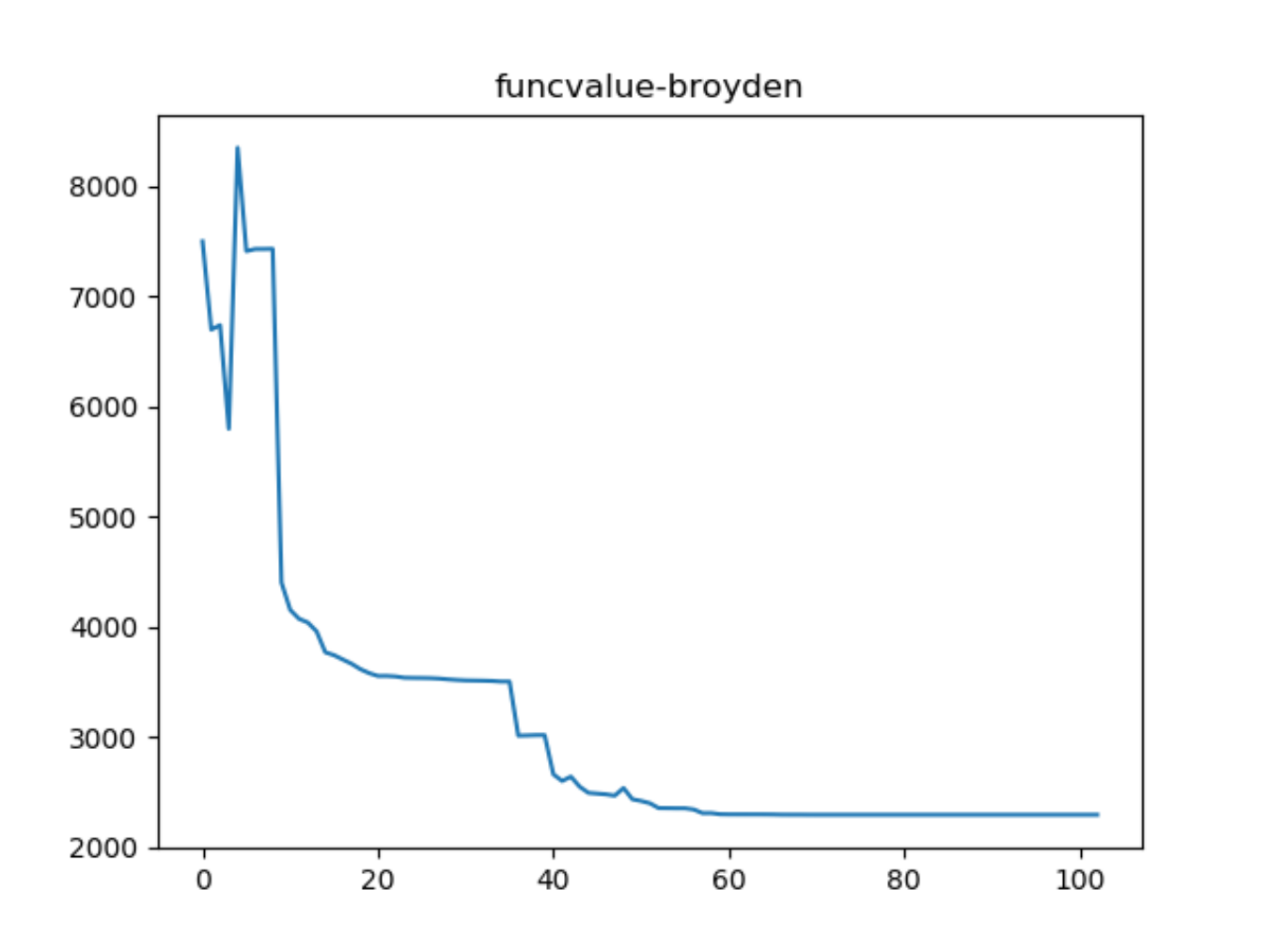
Funktionswerte für Newton-Verfahren



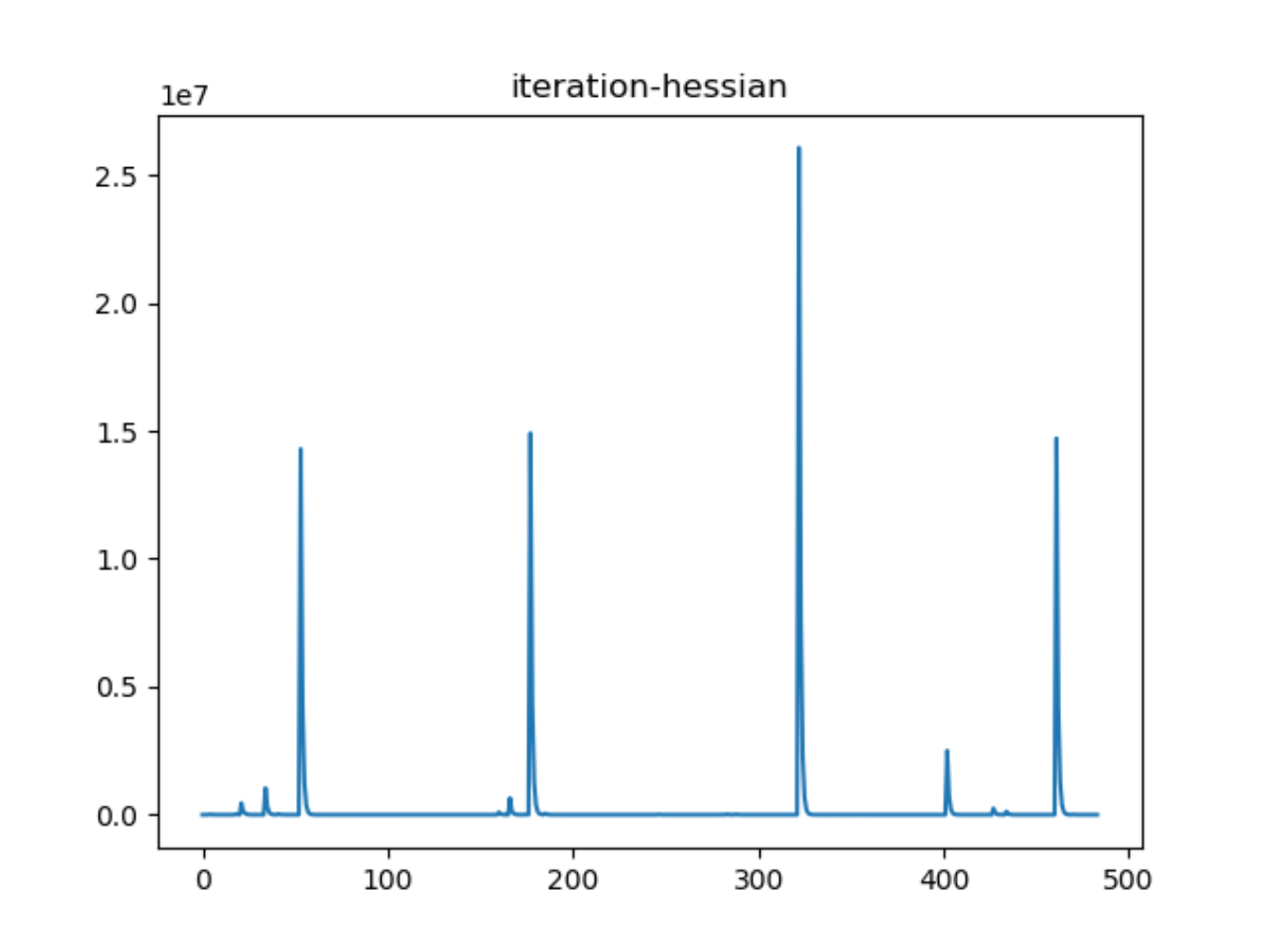
Funktionswerte für Quasi-Newton: BFGS



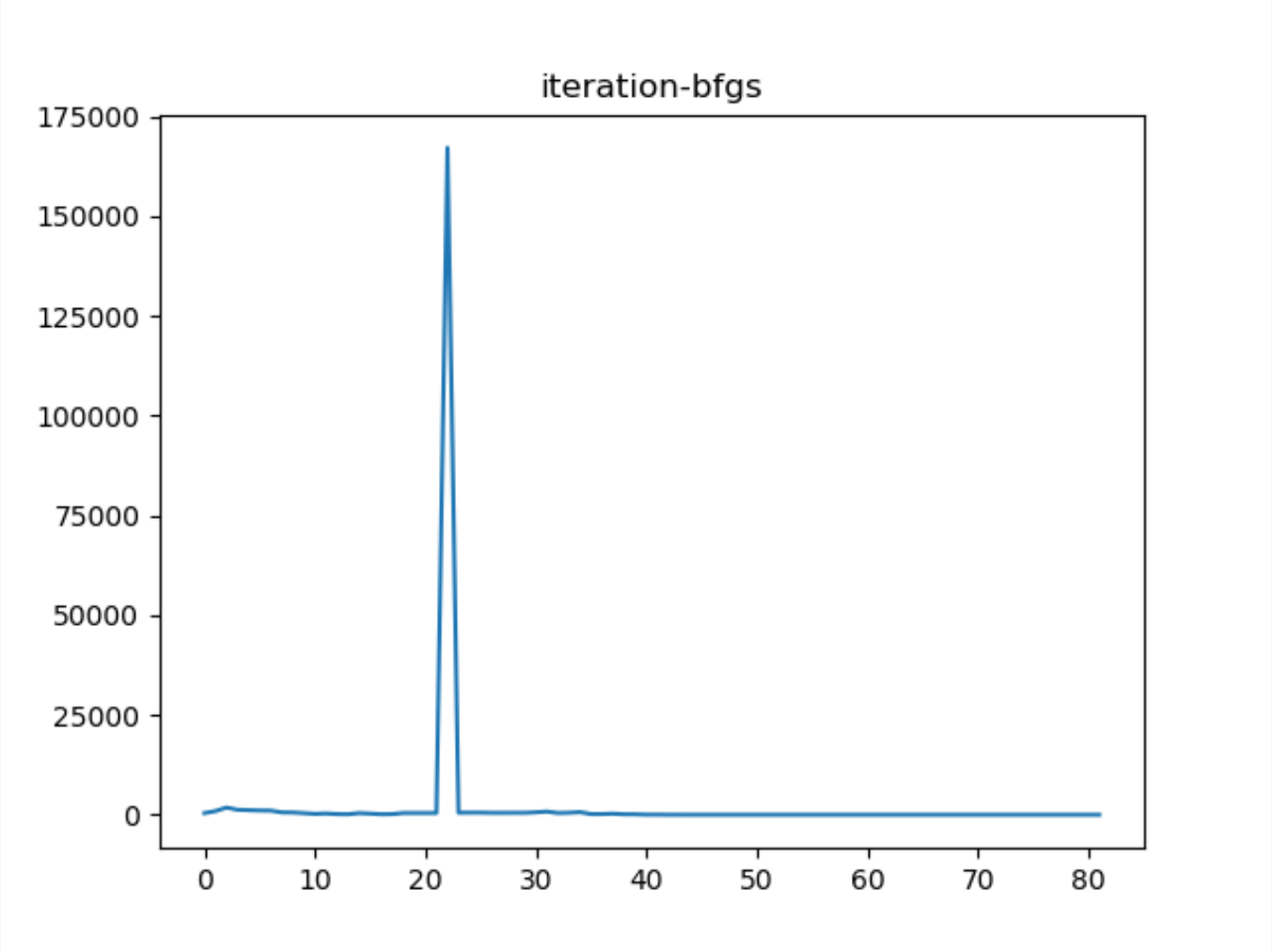
Funktionswerte für Quasi-Newton: Broyden



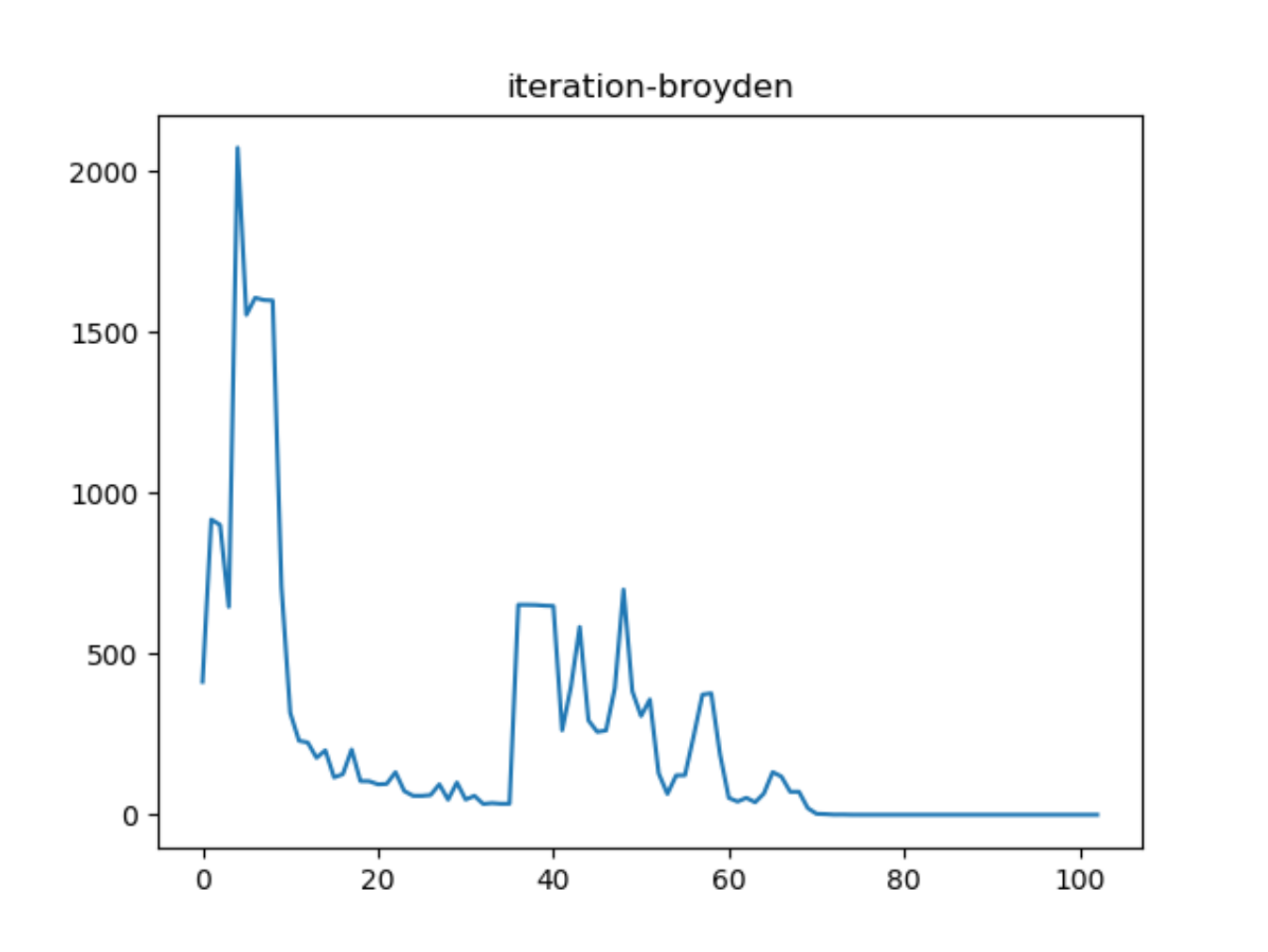
Grad für Newton-Verfahren



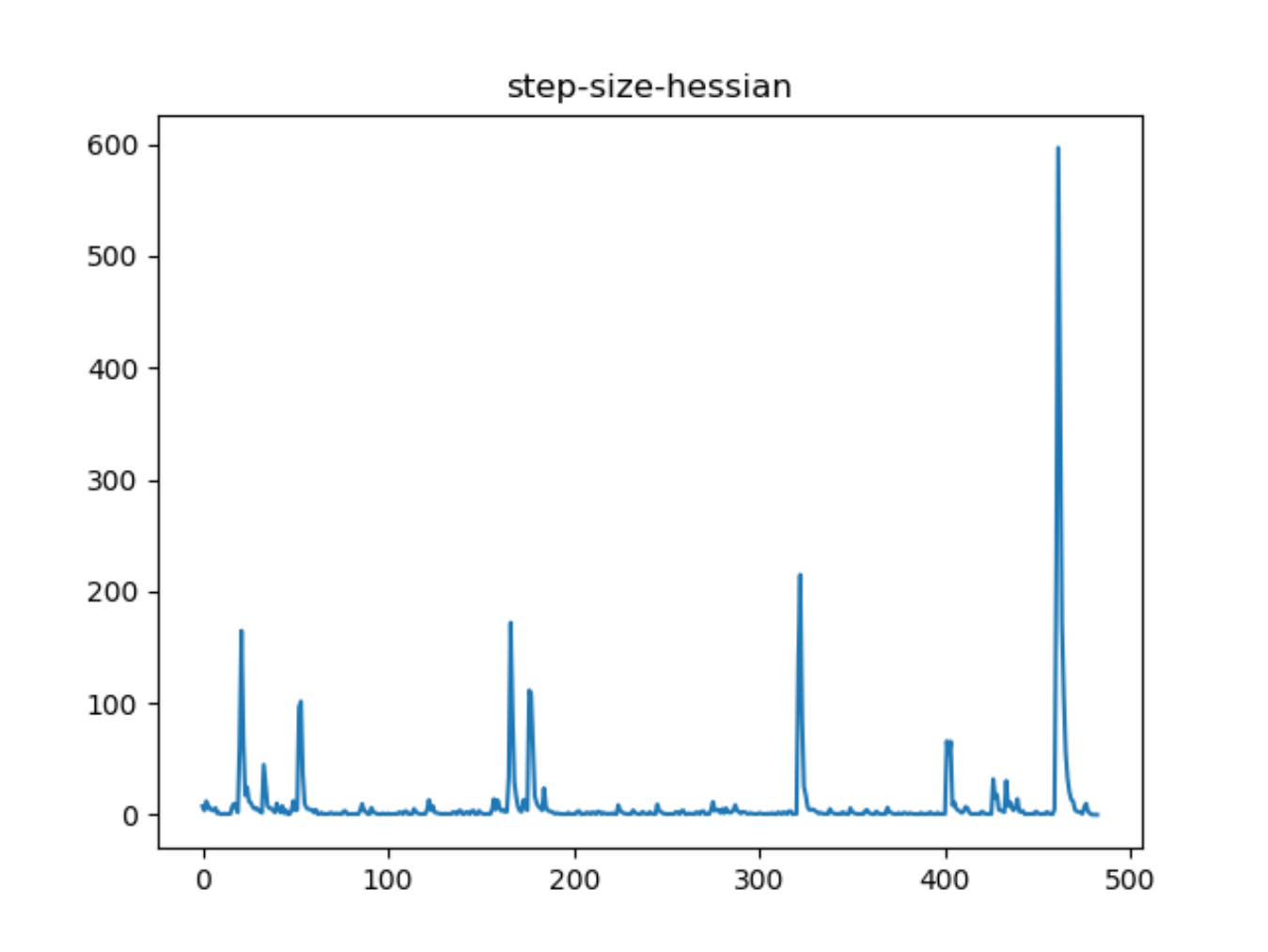
Grad für Quasi-Newton: BFGS



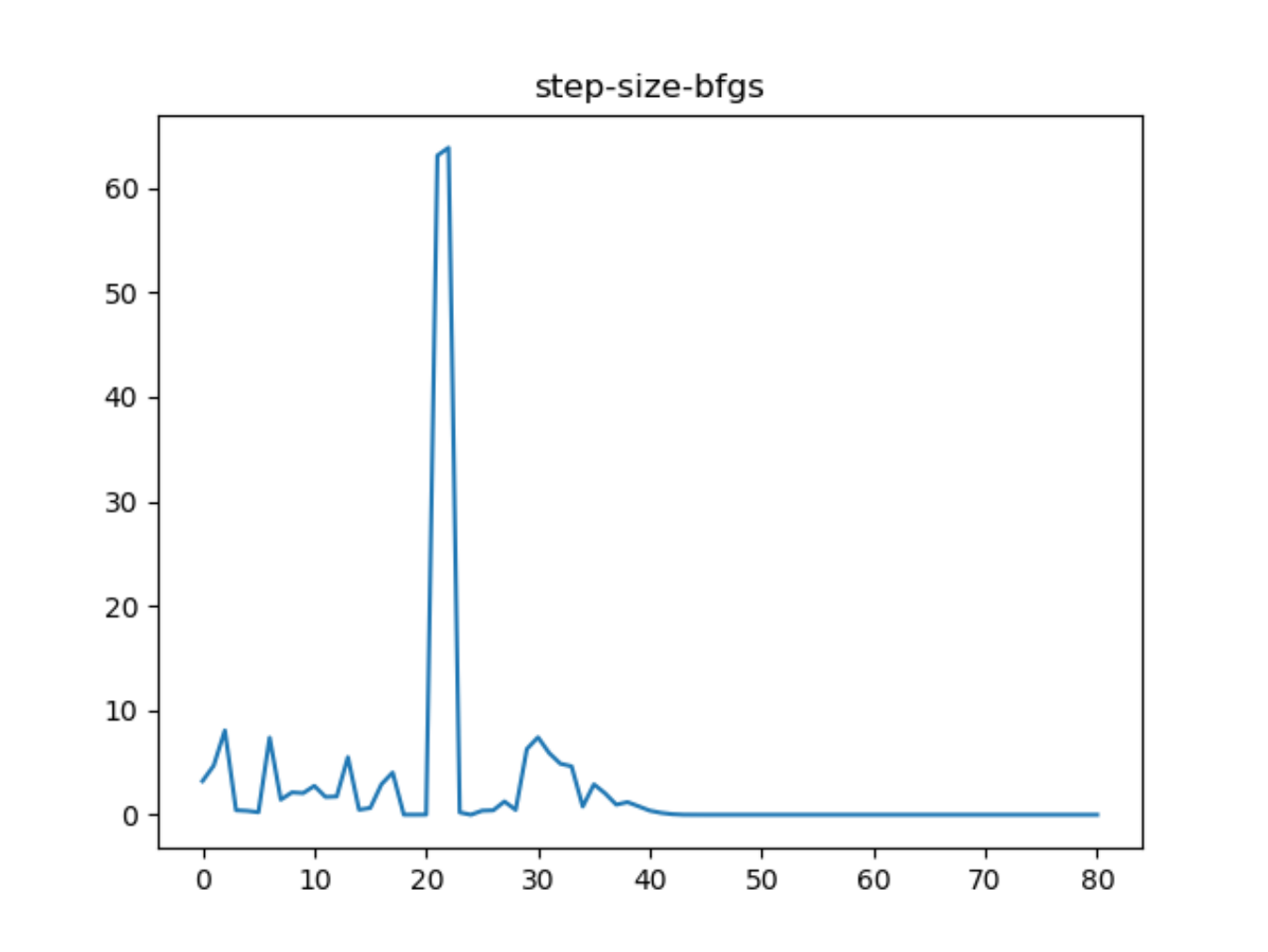
Grad für Quasi-Newton: Broyden



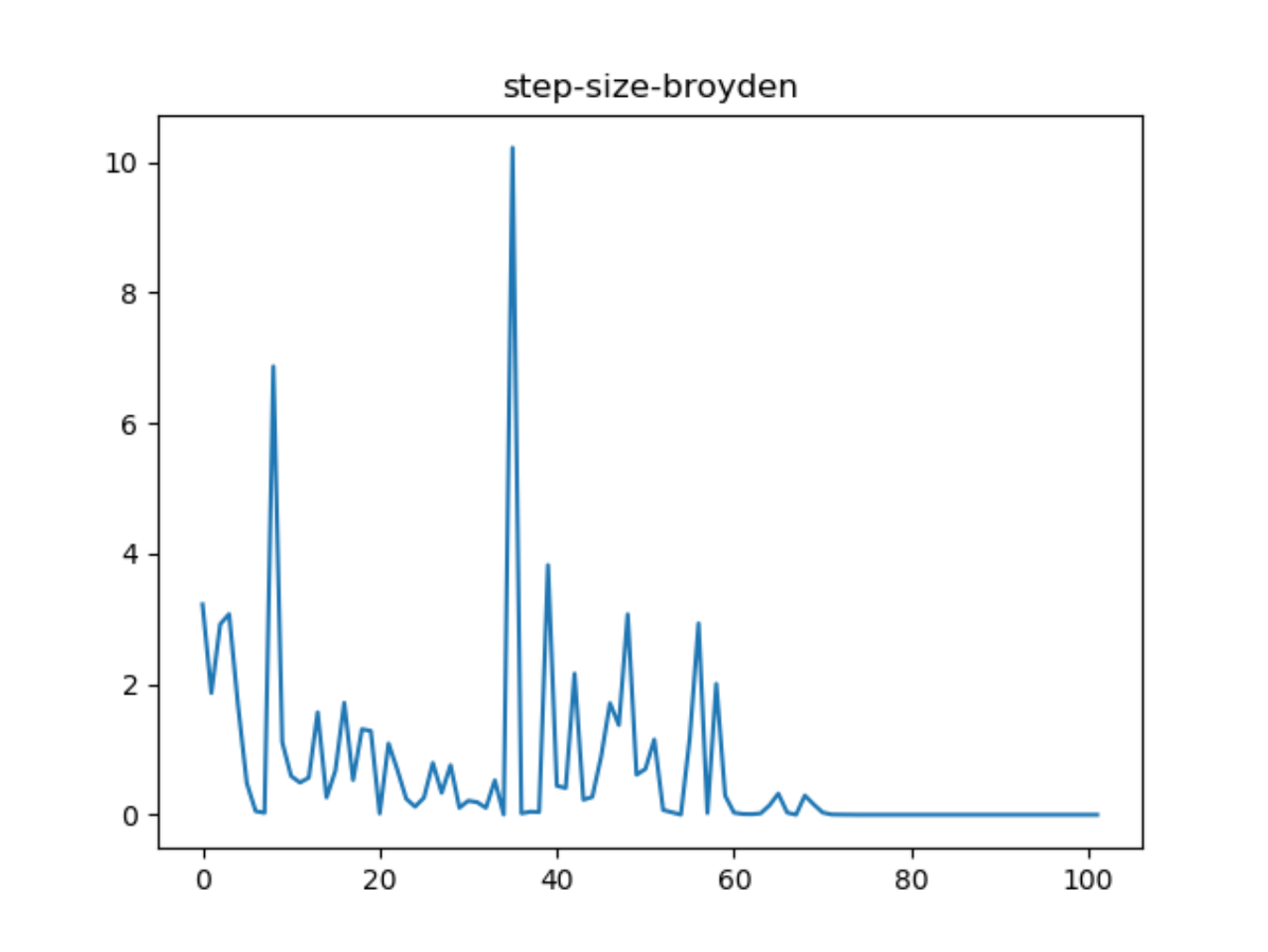
Schrittweite für Newton-Verfahren



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

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

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.

$$Bv = \lambda v \rightarrow ||Bv||_2 = ||\lambda v||_2 = |\lambda|\,||v||_2$$

$$\rightarrow \sqrt{||A_k^T A_k v||_2} = \sqrt{||Bv||_2} = \sqrt{|\lambda|\,||v||_2} = \sqrt{|\lambda|}\sqrt{||v||_2}$$

$$\rightarrow \frac{\sqrt{||A_k^T A_k v||_2}}{\sqrt{||v||_2}} = \sqrt{|\lambda|} = \sqrt{\rho(B)} = ||A_k||_2$$

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 $m >> n$ Dimensionen und nenne ihn $\tilde{v}$ folgendermaßen:

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

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 $||A||_2$

Lösung

Vergleich der Grenzen ergibt:

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

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

n	m	α	β	Genauigkeit
8000	100000	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