Numerik für Ingenieure.

Mathias Sawall

Institut für Mathematik, Universität Rostock

Sommersemester 2023

Organisatorisches

Vorlesungen (14 an der Zahl):

- Di 13.00 - 15.00, Gr. HS, A.-Einstein-Str. 2,
- Folien mit den wichtigsten Inhalten (ohne Gewähr) unter https://www.numerik.mathematik.uni-rostock.de/sawall/

Übungen (8 an der Zahl):

- Mi 9.00 - 11.00, Ex 04 HS Experimentalgebäude, A.-Einstein-Str. 2,
- nur an geraden Wochen,
- Franziska Schulz.

Bei Fragen:

- mathias.sawall@uni-rostock.de,
- Raum 431, Ulmenstraße 69, Haus 3.

Organisatorisches

Übungsaufgaben & Bedingungen:

- Übungsserien werden in der VL ausgegeben,
- 50% der Punkte bei den Übungsaufgaben,
- manche Aufgaben mit Programmieranteil (etwa Matlab nutzen), diese zählen wie normale Aufgaben.

Abgaben der Übungsserien:

- Dienstag (Vl $2i-1$) $\longrightarrow$ Dienstag (Vl $2i+1$) für $i = 1, \ldots, 7$,
- Abgabe in der Vorlesung oder bis Di 13 Uhr in den Briefkasten (letzte Serie Briefkasten oder letzte VL),
- Abgabe der Programmieraufgaben: Quellcode + Resultate ausdrucken.

Organisatorisches

Klausur:

- teilweise mit der Stochastik zusammen, siehe Prof. Meister,
- Zeiten 120 min bzw. 72 min.

Zugelassene Hilfsmittel:

- nicht programmierbarer & nicht grafikfähiger Taschenrechner,
- 7 beidseitig handbeschriebene DIN-A4-Seiten für die Numerik.

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme

3. Eigenwertprobleme

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme

3. Eigenwertprobleme

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Maschinenzahlen:

- Speicherung/Darstellung von Zahlen auf dem Rechner,
- Computer können nicht mit echt reellen Zahlen (etwa $\sqrt{2}$) rechnen, endliche Teilmenge als Ersatz: *Gleitpunktzahlen*,
- auch $1/3$ im Dualsystem nicht exakt darstellbar.

Normalisierte Gleitpunktzahl:

- Basis p, etwa Dualsystem (Rechner) oder Dezimalsystem (täglicher Umgang),
- Normaliserte Gleitpunktdarstellung einer Zahl $d \neq 0$ auf einem digitalen Rechner

$$d = \pm 0 \,.\, \underbrace{d_1\, d_2\, d_3 \ldots d_l}_{\text{Mantisse}} \cdot p^e, \qquad 0 \leq d_i < p,\ d_1 \neq 0$$

- mit $e \in \mathbb{N}$ dem Exponenten, $-m \leq e \leq M$, und l der Mantissenlänge,
- offensichtlich ist

$$d = d_1 p^{e-1} + d_2 p^{e-2} + \ldots + d_l p^{e-l}.$$

Definition 1.1

Die Menge der Maschinenzahlen $\mathbb{F}(p, l, m)$ umfasst alle Zahlen in normalisierter Gleitpunkdarstellung mit Basis p, l-stelliger Mantisse und m-stelligem Exponenten.

Beispiel 1

Darstellung verschiedener Dezimalzahlen im Dualsystem $\mathbb{F}(2, 5, 3)$:

$$27 = 2^4 + 2^3 + 2^1 + 2^0 \quad \rightarrow \quad 11011E0 \quad \rightarrow \quad 0.11011E101,$$

$$\frac{1}{2} = 2^{-1} \quad \rightarrow \quad 0.10000E000,$$

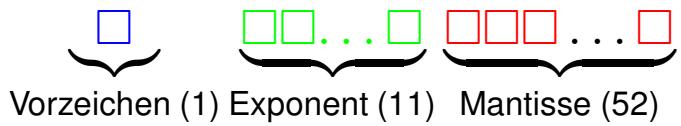
$$\frac{1}{3} = 2^{-2} + 2^{-4} + 2^{-6} + \ldots \quad \rightarrow \quad 0.10101E - 001.$$

Konvertierungsfehler

$$\left| \frac{1}{3} - 0.32812 \right| = 5.2083 \cdot 10^{-3}.$$

IEEE Arithmetik (Institute of Electrical and Electronic Engineers, 1985):

- Standardisierung der normalisierten Gleitpunktdarstellung,
- 32bit (single), 64bit (double),



- Zahlenbereich (abhängig von Exponentenlänge)

$$\text{64bit}: \qquad 2.2 \cdot 10^{-308} \leq |x| \leq 1.8 \cdot 10^{308},$$

- Rundungsfehler normalisierter Zahlen (abhängig von Mantissenlänge)

$$\text{64bit}: \qquad 2^{-52} \approx 2.22 \cdot 10^{-16}.$$

Rundungsoperator für die Darstellung mittels Maschinenzahlen:

$$\mathrm{rd}: \ \mathbb{R} \to \mathbb{F}(p,l,m), \qquad |x - \mathrm{rd}(x)| = \min_{f \in \mathbb{F}(p,l,m)} |x - f|.$$

Gleitpunktarithmetik (Rechnen auf dem Computer):

$$x \oplus y = \mathrm{rd}(x+y), \qquad \text{für } x, y \in \mathbb{F}.$$

Maschinengenauigkeit:

- Wert

$$\text{eps} = \frac{p}{2} p^{-l},$$

- IEEE Arithmetik 64 bit

$$\text{eps} = \frac{2}{2} 2^{-52} \approx 2.22 \cdot 10^{-16},$$

- betragskleinste Zahl, die noch zur 1 hinzuaddiert werden kann, sodass nicht wieder 1 herauskommt, also

$$1 \oplus \varepsilon = 1 \quad \text{für alle } \varepsilon \text{ mit } |\varepsilon| < \text{eps}.$$

Berechnen der Maschinengenauigkeit:

```
1  x = 1;
2  eps = 1;
3  while x+eps>1
4     eps = eps/2;
5  end
6  2*eps
```

Auslöschungseffekt:

- IEEE-Rechnung mit $x = 1 + \varepsilon$ und $y = 1$

ε	$x - y$	$\frac{x-y}{\varepsilon} - 1$
10^{-5}	$1.000000000006551 \cdot 10^{-5}$	$6.55 \cdot 10^{-12}$
10^{-12}	$1.000088900582341 \cdot 10^{-12}$	$8.89 \cdot 10^{-5}$
10^{-15}	$1.110223024625157 \cdot 10^{-15}$	$1.10 \cdot 10^{-1}$

Erklärung:

- im Sinne der Darstellbarkeit wird jeweils die nächstgelegene Zahl gewählt,
- Fehler entstehen durch Abschneiden bei $1 + \varepsilon$ und werden durch die Subtraktion verstärkt.

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme

3. Eigenwertprobleme

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Quadratisches lineare Gleichungssystem:

- gegeben $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^n$,
- bestimme $x \in \mathbb{R}^n$ so, dass

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

- Gleichungssystem für beliebiges $b \in \mathbb{R}^n$ lösbar, falls $\operatorname{rank}(A) = n$.

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme
   2.1 Direkte Verfahren
   2.2 Iterative Verfahren
   2.3 Lineare Ausgleichsprobleme

3. Eigenwertprobleme

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Gauß-Algorithmus:

- LGS durch Modifikation der Gleichungen in Dreiecksgestalt bringen,
- Lösungsmenge eines LGS bleibt unverändert, wenn
  (i) eine Gleichung mit $\alpha \neq 0$ multipliziert wird,
  (ii) ein Vielfaches einer Gleichung zu einer anderen addiert wird,
- zwei Schritte: Vorwärtselimination und Rückwärtssubstitution.

Vorwärtselimination an einem 3×3-Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 \\ 1 & -1 & 5 \\ 4 & 1 & -2 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 6 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix},$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 \\ 0 & -3 & 6 \\ 0 & -7 & 2 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 6 \\ -3 \\ -10 \end{pmatrix},$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 \\ 0 & -3 & 6 \\ 0 & 0 & -12 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 6 \\ -3 \\ -3 \end{pmatrix}.$$

$\rightarrow$ Dreiecksgestalt.

Rückwärtssubstitution:

3. Gleichung:

$$-12x_3 = -3 \quad \Rightarrow \quad x_3 = 0.25,$$

2. Gleichung:

$$-3x_2 + 6x_3 = -3 \quad \Rightarrow \quad x_2 = 1 + 2x_3 = 1.5,$$

1. Gleichung:

$$2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 6 \quad \Rightarrow \quad x_1 = 3 - 2x_2 + x_3 = 0.25.$$

Lösung:

$$x = \begin{pmatrix} 0.25 \\ 1.5 \\ 0.25 \end{pmatrix}.$$

Spaltenpivotsuche:

- Wähle als neue Ausgangszeile die, mit dem betragsgrößten führenden Eintrag,
- tausche also die Zeilen i und ℓ, mit

$$|a_{\ell i}| \geq |a_{ji}| \quad \forall j = i, \ldots, n.$$

Mögliche Resultate des Gauß-Algorithmus mit Pivotsuche:

- eindeutige Lösung,
- Auftreten einer nicht lösbaren Gleichung, das gesamte LGS ist nicht lösbar,
- parameterabhängige Lösung.

Aufwand des Gauß-Algorithmus:

- Komplexität, abzählen der Gleitpunktoperationen (flops),
- LR-Zerlegung benötigt

$$\frac{2}{3}n^3 = \mathcal{O}(n^3)\text{flops}.$$

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme
   - 2.1 Direkte Verfahren
   - 2.2 Iterative Verfahren
   - 2.3 Lineare Ausgleichsprobleme

3. Eigenwertprobleme

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Iterative Verfahren zur Lösung eines LGS

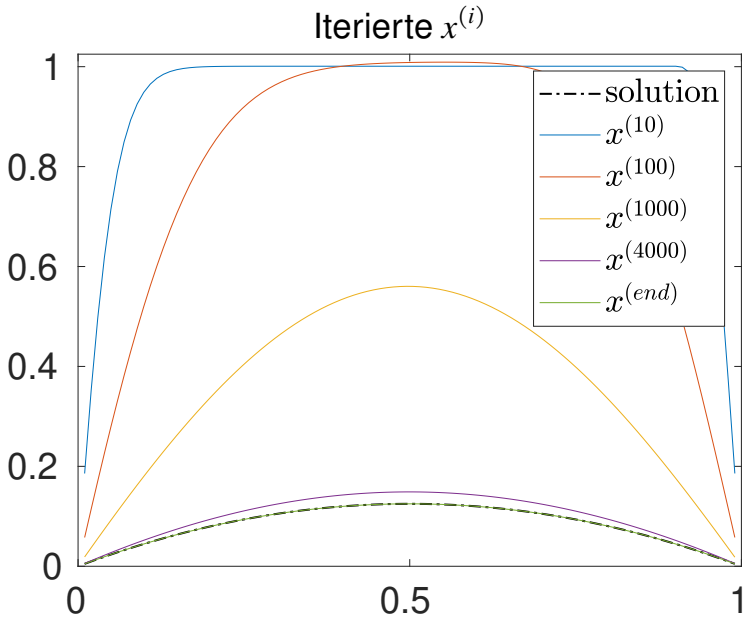
Gauß-Algorithmus:

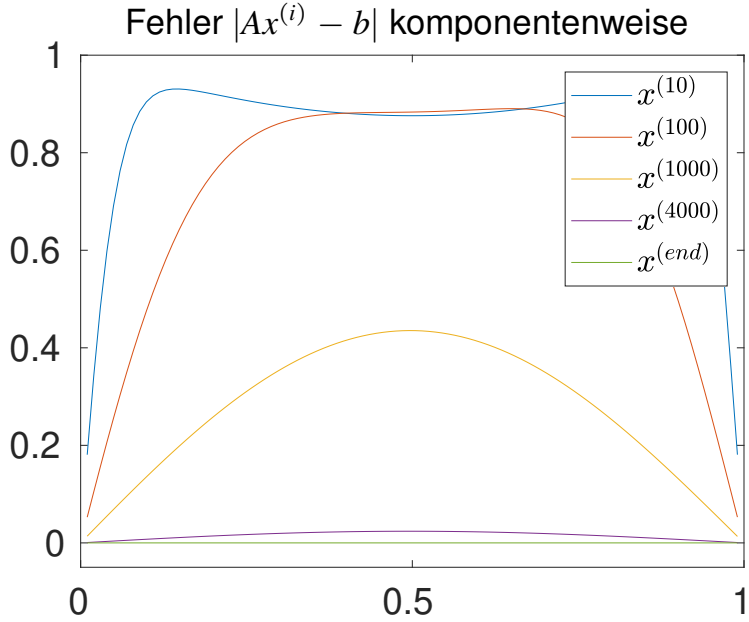
- direktes Lösungsverfahren für LGS,
- Bestimmung der Lösung nach endlich vielen Schritten.

Iterative Verfahren:

- Start mit Näherungslösung,
- Folge von Iterierten, verbessern der Näherungslösung mit jedem Iterationsschritt,
- die Matrix A bleibt unverändert,
- theoretisch unendlich viele Schritte,
- Ziel: Konvergenz gegen die Lösung.

Iterative Verfahren zur Lösung eines LGS





Gegeben:

- zu lösendes lineares Gleichungssystem $Ax = b$,
- Näherungsinversere
$$B^{-1} \approx A^{-1},$$
- Startwert
$$x^{(0)} \in \mathbb{R}^n.$$

Iteration:

- Iteration für $i = 0, 1, 2, \ldots$

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + B^{-1}(b - Ax^{(i)}). \tag{2.1}$$

Gesamtschrittverfahren (Jacobi-Verf.):

- Wahl $B = D$ führt auf

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + D^{-1}(b - Ax^{(i)}), \quad i = 0, 1, 2, \ldots,$$

- Komponentenschreibweise

$$x_k^{(i+1)} = \frac{1}{a_{kk}} \left(b_k - \sum_{\ell=1,\ \ell \neq k}^{n} a_{k\ell} x_\ell^{(i)} \right).$$

Einzelschrittverfahren (Gauß-Seidel-Verf.):

- Wahl $B = L + D$ führt auf

$$Dx^{(i+1)} = b - Lx^{(i+1)} - Rx^{(i)}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots,$$

- Komponentenschreibweise

$$x_k^{(i+1)} = \frac{1}{a_{kk}} \left(b_k - \sum_{\ell=1}^{k-1} a_{k\ell} x_\ell^{(i+1)} - \sum_{\ell=k+1}^{n} a_{k\ell} x_\ell^{(i)} \right).$$

Beispiel

Wir betrachten das System $Ax = b$ mit

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & -4 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 7 \end{pmatrix}$$

Für das Jacobi Verfahren gilt

$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad D^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & -0.25 \end{pmatrix}$$

und es ergibt sich mit $x^{(i+1)} = x^{(i)} + D^{-1}(b - Ax^{(i)})$

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -7/4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0.5 & 0.5 \\ 2/3 & 1 & 1/3 \\ 0 & -1/4 & 1 \end{pmatrix} x^{(i)}$$

Zum Startvektor $x^{(0)} = (1, 1, 1)^T$ sind die Iterierten

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1.5 \end{pmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{pmatrix} 3.25 \\ -0.1667 \\ -2 \end{pmatrix}, \ \ldots, \ x^{(31)} = \begin{pmatrix} 4.125 \\ -2 \\ -2.25 \end{pmatrix}.$$

Beispiel

Für das Gauß-Seidel-Verfahren erhalten wir

$$(L+D)^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & -4 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 \\ -1/3 & 1/3 & 0 \\ -1/12 & 1/12 & -1/4 \end{pmatrix}$$

und für die Iterierten gilt

$$\begin{aligned} x^{(i+1)} &= x^{(i)} + (L+D)^{-1}(b - Ax^{(i)}) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -0.5 & -0.5 \\ 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & -1/12 & 0 \end{pmatrix} x^{(i)} + \begin{pmatrix} 2 \\ -4/3 \\ -25/12 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Iterierten zu $x^{(0)} = (1,1,1)^T$ sind

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{pmatrix} 3.5 \\ -1.667 \\ -2.167 \end{pmatrix}, \ \ldots, \ x^{(12)} = \begin{pmatrix} 4.125 \\ -2 \\ -2.25 \end{pmatrix}.$$

Definition 2.1

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt strikt diagonaldominant, falls

$$|a_{ii}| > \sum_{j\neq i} |a_{ij}| \qquad \text{für alle } i = 1, \ldots, n.$$

Satz 2.2

Das Gesamtschritt- und das Einzelschrittverfahren konvergieren jeweils für alle Wahlen von $x^{(0)}$ gegen die exakte Lösung x^*, falls die Matrix A strikt diagonaldominant ist.

Analyse über Fehlerfortpflanzung:

- tatsächliche Lösung x^*,
- Fehler in neuer Iterierten

$$x^{(i+1)} - x^* = \underbrace{(I - B^{-1}A)}_{\text{Fehlerfortpflanzungsmatrix}} (x^{(i)} - x^*).$$

Satz 2.3

Die Iteration aus (2.1) ist konvergiert für alle Wahlen von $x^{(0)}$ genau dann gegen die Lösung x^*, wenn der Spektralradius der Fehlerfortpflanzungsmatrix kleiner als eins ist, also alle Eigenwerte betragsmäßig kleiner als 1 sind.

CG-Verfahren

Gegeben:

- lineares Gleichungssystem $Ax = b$,
- A symmetrisch und positiv definit, also

$$A^T = A, \qquad x^T Ax >= \quad \text{für alle } x \neq 0.$$

CG-Verfahren:

- Konvergenz in maximal n Schritten,
- Startvektor $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, dazu $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ sowie Wahl einer Anfangssuchrichtung, etwa $d^{(0)} = r^{(0)} \in \mathbb{R}^n$,
- Iteration

$$\begin{cases} t^* &= \frac{(d^{(i)})^T r^{(i)}}{(d^{(i)})^T A d^{(i)}}, \\ x^{(i+1)} &= x^{(i)} + t^* d^{(i)}, \\ r^{(i+1)} &= b - Ax^{(i+1)}, \\ s^* &= -\frac{(r^{(i+1)})^T A d^{(i)}}{(d^{(i)})^T A d^{(i)}}, \\ d^{(i+1)} &= r^{(i+1)} + s^* d^{(i)}. \end{cases}$$

Randwertproblem:

$$\Delta u = u_{xx}(x,y) + u_{yy}(x,y) = -1, \quad \text{für } (x,y) \in \Omega = (0,1)^2,$$
$$u(x,y) = 0, \quad (x,y) \in \partial\Omega$$

Diskretisierung führt auf ein LGS $Ax = b$ mit

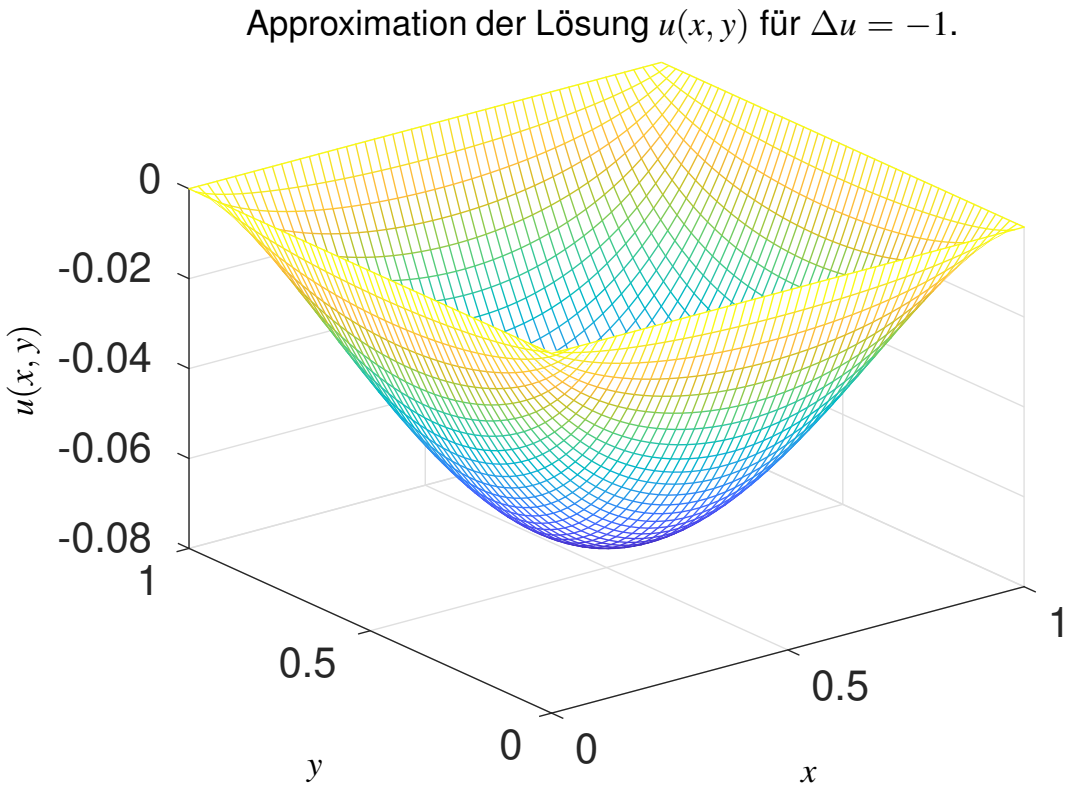
$$A = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} T & -I & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -I & T & -I & \cdots & 0 & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & -I & T & -I \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -I & T \end{pmatrix} = h^{-2}\text{tridiag}(-I, T, -I) \in \mathbb{R}^{m^2 \times m^2}$$

mit $h = 1/(m+1)$ sowie I der $m \times m$-Einheitsmatrix und

$$T = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & 0 & \\ -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 4 \end{pmatrix} = \text{tridiag}(-1, 4, -1) \in \mathbb{R}^{m \times m}.$$

Auslenkung einer Membran

Lösung für $m = 50$, also $A \in \mathbb{R}^{2500 \times 2500}$

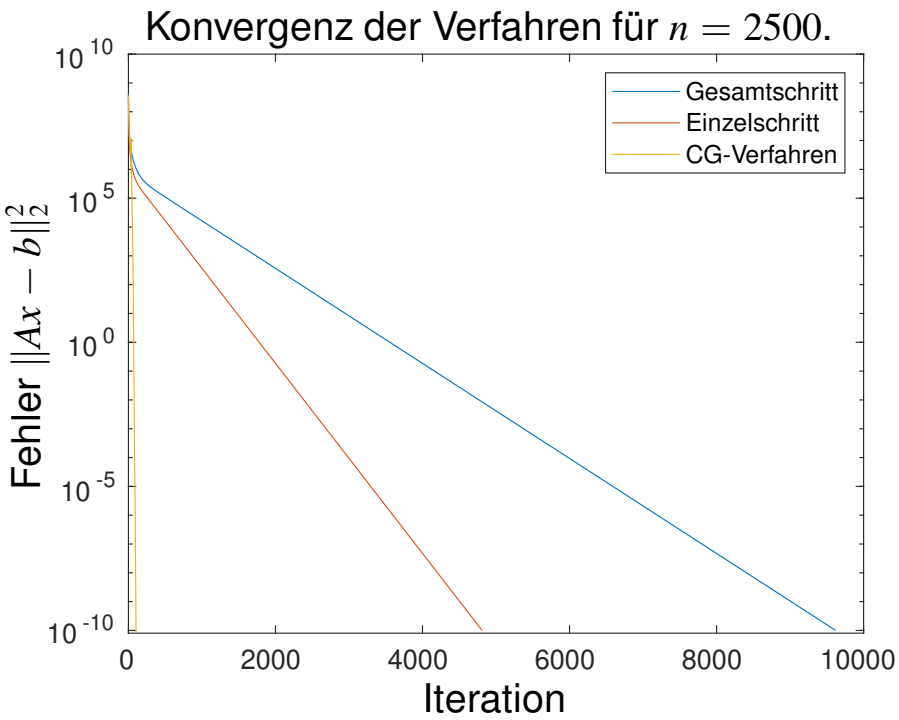


Auslenkung einer Membran

Vergleich verschiedener Verfahren:

- Abbruchschranke $\|Ax - b\|_2^2 < 10^{-10}$,
- einfache Implementireung in MATLAB, Nutzung von sparse.

Auflösung h	Dimension $n \times n$	Gesamtschrittverf Schritte	Gesamtschrittverf Zeit [s]	Einzelschrittverf. Schritte	Einzelschrittverf. Zeit [s]	CG-Verfahren Schritte	CG-Verfahren Zeit [s]
0.02	$2\,500 \times 2\,500$	9622	0.29	4812	7.8	104	0.1
0.01	$10\,000 \times 10\,000$	39166	47.7	19585	579.7	213	0.29



Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme
   - 2.1 Direkte Verfahren
   - 2.2 Iterative Verfahren
   - 2.3 Lineare Ausgleichsprobleme

3. Eigenwertprobleme

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Gegeben:

- überbestimmtes lineares Gleichungssystem

$$Ax = b, \qquad A \in \mathbb{R}^{m \times n},\ m > n$$

Gesucht:

- Lösung kleinster Fehlerquadrate

$$x \in \mathbb{R}^n : \ \|Ax - b\|_2^2 \to \min!$$

Einfachs Beispiel:

- Regressionsgerade durch

$$(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m),$$

- Ansatz

$$y(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x,$$

- resultierendes Ausgleichsproblem (Matrix-Formulierung)

$$\left.\begin{aligned} \alpha_1 + \alpha_2 x_1 &= y_1 \\ \alpha_1 + \alpha_2 x_2 &= y_2 \\ &\vdots \\ \alpha_1 + \alpha_2 x_m &= y_m \end{aligned}\right\} \quad \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

Satz 2.4 (Gauß'sche Normalengleichung)

Ein x^* löst das lineare Ausgleichsproblem genau dann, wenn x^* Lösung des Normalengleichungssystem

$$A^T A x = A^T b$$

ist.

Lösung mittels QR-Zerlegung:

- Gauß'sche Normalengleichung numerisch nicht optimal,
- alternativ mittel QR-Zerlegung von A,
- dabei gilt

$$\|Ax - b\|_2 = \|Rx - Q^T b\|_2,$$

- Lösen von

$$Rx = \tilde{b}$$

zu

$$Q^T b = \begin{pmatrix} \tilde{b} \\ \hat{b} \end{pmatrix}.$$

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme

3. Eigenwertprobleme

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Definition 3.1

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Ein $\lambda \in \mathbb{C}$ heißt Eigenwert, falls es ein $x \in \mathbb{C}^n$ mit $x \neq 0$ gibt, sodass

$$Ax = \lambda x.$$

Ein solches $x \neq 0$ wird Eigenvektor zum Eigenwert λ genannt. Ein Eigenwert zusammen mit dem zugehörigen Eigenvektor bilden ein Eigenpaar.
Die Menge aller Eigenwerte von A ist dessen Spektrum $\sigma(A)$.

Satz 3.2 (Lineare Algebra)

Ein $\lambda \in \mathbb{C}$ ist genau dann ein Eigenwert von A, wenn

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Definition 3.3

Eine Matrix A wird diagonalisierbar genannt, wenn es eine invertierbare Matrix T gibt mit

$$T^{-1}AT = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n).$$

Die Spalten von T sind dann die entsprechenden Eigenvektoren.

Symmetrische Matrizen:

- alle Eigenwerte sind reell und A ist diagonalisierbar.

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme

3. Eigenwertprobleme
   3.1 Gerschgorin-Kreise
   3.2 Potenzmethode und inverse Vektoriteration
   3.3 QR-Verfahren

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Definition 3.4

Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Die Gerschgorin-Kreise sind definiert als

$$K_j = \left\{ z \in \mathbb{C} : \ |z - a_{jj}| \leq \sum_{k=1, k\neq j}^{n} |a_{jk}| \right\}.$$

Der Kreis K_j zur j-ten Zeile von A hat also den Mittelpunkt des Diagonalelements a_{jj} und als Radius die Summe der Beträge der verbleibenden Einträge.

Satz 3.5 (Satz von Gerschgorin)

Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, dann liegen alle Eigenwerte von A in der Vereinigung der Gerschgorin-Kreise, also

$$\sigma(A) \subset \bigcup_{j=1}^{n} K_j.$$

Sind weiter die Gerschgorin-Kreise disjunkt, so liegt in jedem Kreis ein Eigenwert von A.

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme

3. Eigenwertprobleme
   - 3.1 Gerschgorin-Kreise
   - 3.2 Potenzmethode und inverse Vektoriteration
   - 3.3 QR-Verfahren

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Approximation von Eigenwerten - Potenzmethode

Potenzmethode (survival of the largest):

- wähle Startvektor $x \neq 0$ etwa $x = (1, \ldots, 1)^T$, normiere x,
- Iteration:

$$\begin{aligned} y &:= Ax \\ r &:= y^T x \\ x &:= y/\|y\|_2 \end{aligned}$$

- Abbruchkriterium etwa $\|rx - y|_2 < \varepsilon = 10^{-7}$.

Definition 3.6

Der Wert

$$r = \frac{x^T Ax}{x^T x} = \frac{y^T x}{1} = y^T x$$

ist eine Näherung für den betragsgrößten Eigenwert und wird Rayleigh-Quotient von x genannt. Weiter ist x eine Näherung an den zugehörigen Eigenvektor.

Bemerkungen:

- die Normierung verhindert einen Überlauf,
- Konvergenzgeschwindigkeit hängt von $|\lambda_2/\lambda_1|$ ab,
- Nachteile: liefert nur den betragsgrößten EW, u.U. rechenaufwendig.

Approximation von Eigenwerten - Vektoriteration

Inversen Vektoriteration (survival of the smallest):

- Potenzmethode für A^{-1}, liefert EW und EV zum betragskleinsten Eigenwert von A,
- wähle Startvektor $x \neq 0$ etwa $x = (1, \ldots, 1)^T$, normiere x,
- Iteration

$$\text{Löse } Ay = x$$
$$r := \frac{1}{y^T x}$$
$$x := y/\|y\|_2$$

Inverse Vektoriteration mit Spektralverschiebung (survival of the most popular):

- nutze shifts, um andere Eigenwerte zu bestimmen,
- wähle Startvektor $x \neq 0$ etwa $x = (1, \ldots, 1)^T$, normiere x,
- wähle shift μ, etwa Diagonalelement siehe Gerschgorin,
- Iteration

$$\text{Löse } (A - \mu I)y = x$$
$$r := \frac{1}{y^T x} + \mu$$
$$x := y/\|y\|_2$$

Übersicht

1. Einführung und Maschinenzahlen

2. Lineare Gleichungssysteme

3. Eigenwertprobleme
   - 3.1 Gerschgorin-Kreise
   - 3.2 Potenzmethode und inverse Vektoriteration
   - 3.3 QR-Verfahren

4. Nichtlineare Gleichungen

5. Numerische Differentiation und Integration

6. Gewöhnliche Differentialgleichungen

7. Partielle Differentialgleichungen

8. Literatur

Idee:

- Folge von Ähnlichkeitstransformationen mittels QR-Zerlegungen,
- Anteile im linksunteren Teil reduzieren, Konvergenz gegen obere Dreiecksmatrix,
- Eigenwerte stehen auf der Hauptdiagonalen.

QR-Algorithmus:

- Setze $A^{(0)} = A$,
- Berechnung einer QR-Zerlegung $A^{(0)} = Q^{(0)} R^{(0)}$,
- Berechnung
$$A^{(1)} = (Q^{(0)})^T A^{(0)} Q^{(0)} = R^{(0)} Q^{(0)},$$
- Iteration für $k \geq 1$
$$A^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)} \quad \rightarrow \quad A^{(k+1)} = R^{(k)} Q^{(k)}.$$

Approximation von Eigenwerten - Beispiel I

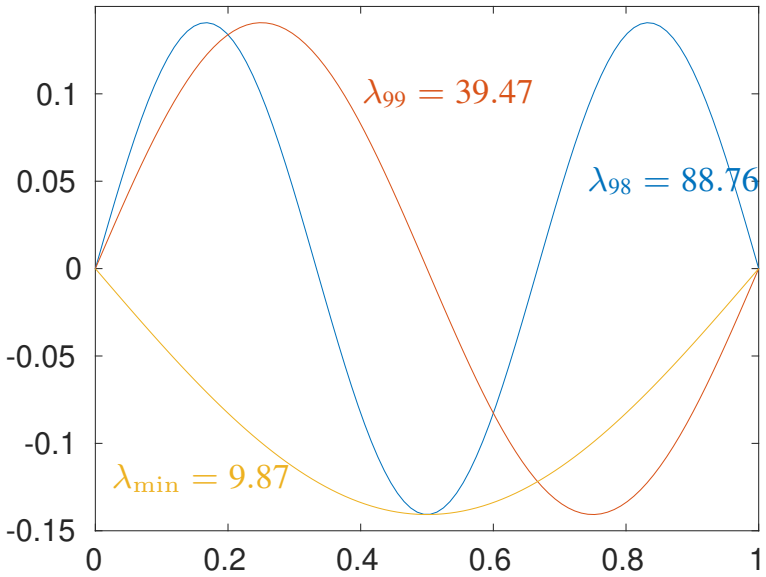
Eindimensionale Schwingung:

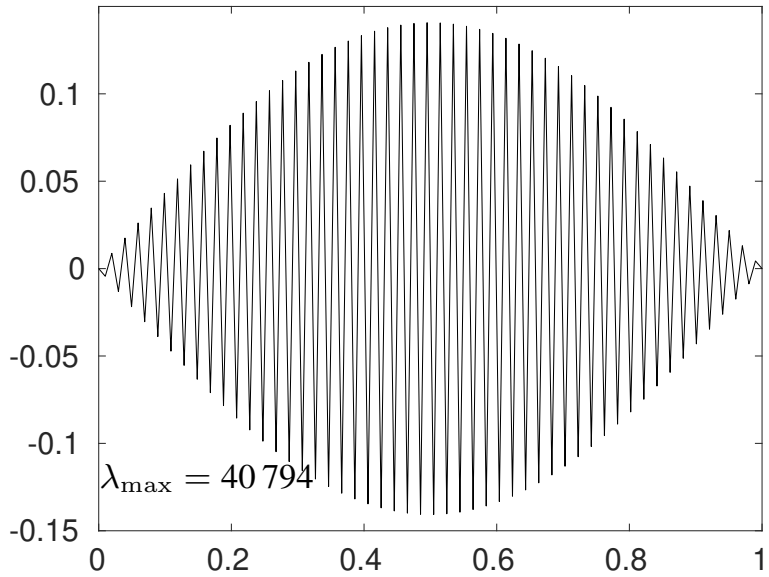
- suche nach Eigenfunktionen/Eigenschwingungen und den Eigenwerten von

$$u''(x) = -\lambda u(x) \quad \text{für } x \in (0,1), \qquad u(0) = u(1) = 0,$$

- Diskretisierung mit n inneren Punkten, Schrittweite $h = 1/(n+1)$,
- führt auf das Eigenwertproblem

$$Av = -\lambda v, \quad \text{mit} \quad A = \frac{1}{h^2}\text{tridiag}(1,-2,1) \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$





Approximation von Eigenwerten - Beispiel II

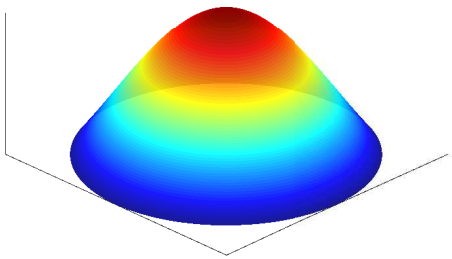
Zweidimensionale Schwingung:

- Randwertproblem mit partieller Differentialgleichung, siehe Abschnitt 7,

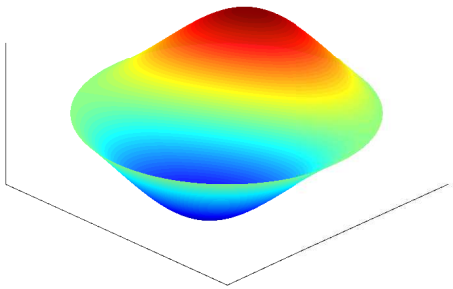
$$\Delta u(x,y) = -\lambda u(x,y), \qquad \text{Differentialgleichung,}$$
$$u(x,y) = 0 \text{ für } (x,y) \in \partial\Omega, \qquad \text{Randbedingung,}$$

- Gebiet $\Omega = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : \; x^2 + y^2 < 1\}$ (Kreis),
- numerische Lösung über Finite-Elemente-Methode.

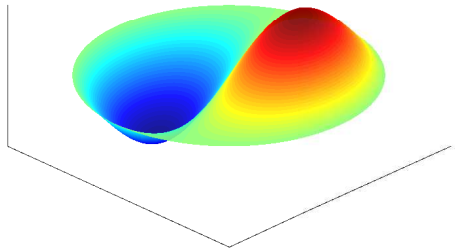
λ_1=5.784



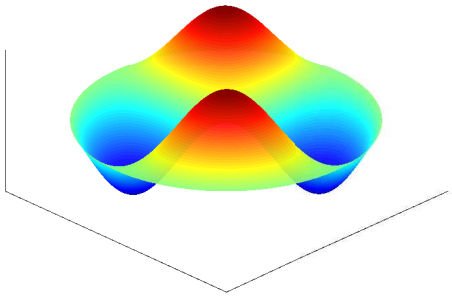
λ_2=14.689



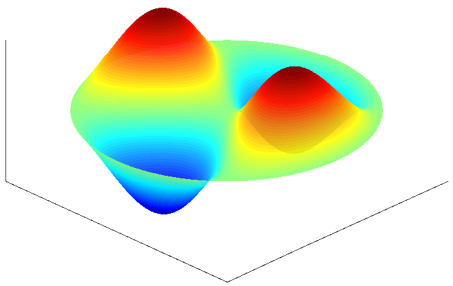
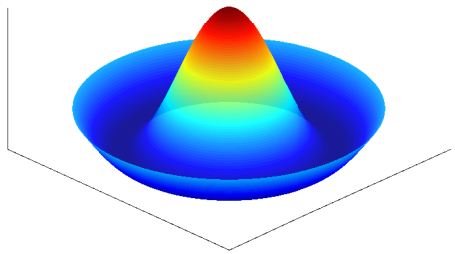
λ_3=14.689



λ_4=26.397



λ_5=26.397



λ_6=30.500