Numerik, Prof. Ch. Lubich | **Tutorium B. Brumm**
WS 2012/13 | **18. Dez. 2012**

Wiederholungsfragen

<u>**Hinweise und Literatur:**</u> Die folgenden Fragen und Aufgaben dienen der Wiederholung des Vorlesungsstoffes und der Vorbereitung auf die Klausur. Begründen Sie Ihre Antworten jeweils. Bei Rückfragen und Diskussionsbedarf stehe ich gerne zur Verfügung.
Die Auswahl der Fragen basiert natürlich auf der Vorlesung "Numerik" (früher "Numerische Mathematik I") von Prof. Ch. Lubich (siehe die Mitschriften von Markus Klein und Nils Rudolph), darüber hinaus auf dem Skript zur Vorlesung "Numerik für Informatiker und Bioinformatiker" von Dr. D. Weiß. Dem letztgenannten verdanke ich zahlreiche Beispiele und Anregungen. Die eingestreuten Aufgaben gehen auf alte Klausuren vergangener Jahre zurück sowie zu geringen Teilen auf die Lehrbücher von Deuflhard / Hohmann und Stoer / Bulirsch. Einzelreferenzen kann ich bei Nachfragen gerne angeben.

1 Numerische Integration

1. Was versteht man unter der Ordnung einer Quadraturformel (QF)? Wie hängt dies mit den Ordnungsbedingungen

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q}, \qquad 1 \leq q \leq p,$$

   für eine QF der Ordnung p zusammen?
   Bestimmen Sie die Ordnung der QF

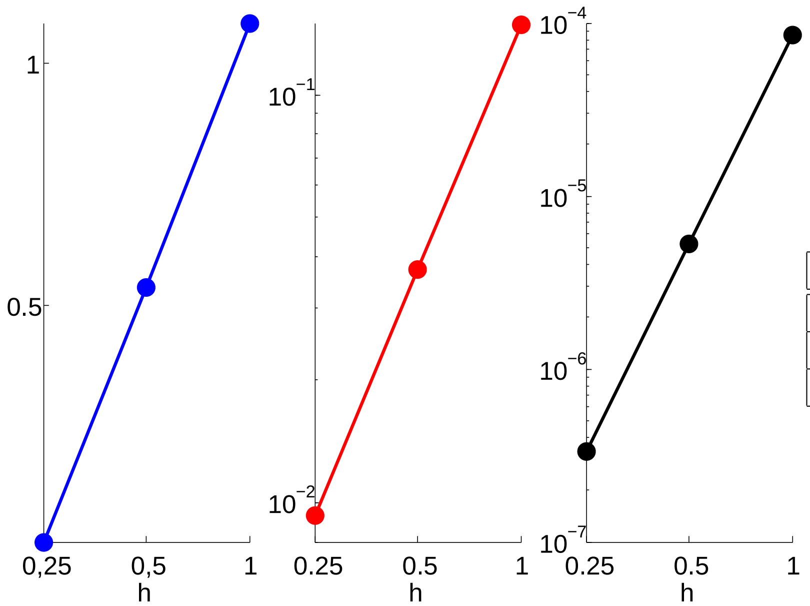
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{4} \cdot \left(3f\left(a + \frac{b-a}{3}\right) + f(b)\right).$$

2. Seien Knoten $(c_i)_{i=1}^s$ gegeben. Finden Sie zugehörige Gewichte $(b_i)_{i=1}^s$ so, dass Ihre QF Ordnung $p \geq s$ hat. Ist Ihre Wahl der b_i eindeutig?

3. Wann heißt eine QF symmetrisch? Hat jede symmetrische QF gerade Ordnung? Ist jede QF gerader Ordnung symmetrisch? Geben Sie ggf. ein Gegenbeispiel an.
   Es sei der Knoten $c_1 = \frac{1}{3}$ einer symmetrischen QF mit zwei Knoten gegeben. Bestimmen Sie den Knoten c_2 und die Gewichte b_1 und b_2 so, dass die Ordnung der QF maximal wird. Wie groß ist diese?

4. Was ist die maximale Ordnung einer s-stufigen QF? Wie konstruiert man QFn maximaler Ordnung, falls man Knoten und Gewichte frei wählen kann? Was hat das mit den in der Vorlesung behandelten orthogonalen Polynomen zu tun? Ist Gauß-Legendre-Quadratur symmetrisch?

5. Sei eine abstrakte QF der Ordnung $\geq p$ gegeben. Geben Sie eine Abschätzung für den Fehler der QF bei Anwendung auf eine beliebige, hinreichend oft differenzierbare Funktion über einem beliebigen abgeschlossenen Intervall. Was gilt für den Fehler auf dem Gesamtintervall, wenn Sie es in gleich große Teilintervalle zerlegen und auf jedem Teilintervall die QF anwenden?
   Betrachten Sie die folgenden Fehlerplots für summierte QFn in Bild 1 und ordnen Sie jedem eine mögliche QF zu.



h	links	Mitte	rechts
1	1.124	$1.481 \cdot 10^{-1}$	$8.483 \cdot 10^{-5}$
0.5	0.525	$3.710 \cdot 10^{-2}$	$5.307 \cdot 10^{-6}$
0.25	0.253	$9.280 \cdot 10^{-3}$	$3.317 \cdot 10^{-7}$

Figure 1: Fehlerplots für summierte QFn und zugeh. Werte.

Wieviele äquidistante Unterteilungen sind für die Simpsonregel erforderlich, damit die Näherung für das Integral

$$\int_0^{\pi/2} \sin(x)\cos(x)\,dx$$

um nicht mehr als 10^{-5} vom exakten Wert abweicht?
Approximieren Sie das Integral

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x}\,dx$$

mit der summierten Trapezregel und äquidistanten Unterteilungen der Länge $\frac{1}{2^i}$, $1 \le i \le 3$. Verbessern Sie anschließend Ihr Ergebnis mittels Extrapolation.

6. Sei $f \in \mathcal{C}^6[-1,1]$ und p das Hermite-Interpolationspolynom zu f in den Knoten -1, 0 und 1 (vom Grad 5). Welche QF entsteht durch Integrieren von p über $[-1,1]$? Welche Ordnung hat sie? Zeigen Sie, dass der Peanokern auf $[-1,1]$ konstantes Vorzeichen hat. Bestimmen Sie mit diesem Wissen eine Fehlerdarstellung für Ihre QF (Mittelwertsatz der Integralrechnung!).

2 Interpolation und Approximation

1. Was ist die Aufgabenstellung bei der Polynominterpolation? Ist das Interpolationspolynom (IP) eindeutig?

2. Leiten Sie die Fehlerdarstellung bei der Polynominterpolation her. Ist Polynominterpolation überhaupt ein sinnvolles Vorgehen? Vergleichen Sie zur Beantwortung der letzten Frage den Fehler $f(x) - p(x)$ mit $f(x) - q(x)$, wo p das IP zu f in $n+1$ gegebenen Knoten ist und q irgendein Polynom vom Grad höchstens n.

3. Es seien Daten $(x_i, y_i)_{i=0}^n$ und gestörte Daten $(x_i, \tilde{y}_i)_{i=0}^n$ gegeben mit zugehörigen IPen p bzw. $\tilde{p}$. Wie groß ist der Datenfehler $p(x) - \tilde{p}(x)$ allgemein? Was passiert bei äquidistanten x_i?

4. Welche Darstellungen des IPs p kennen Sie? Wie bestimmen Sie jeweils die Koeffizienten? Gegeben eine bestimmte Darstellung, wie werten Sie jeweils p an einem Punkt x aus? Klären Sie bei beiden Fragestellungen auch für jede Darstellung den Rechenaufwand.

5. Die Funktion $f(x) = \exp(2x)$ wird auf $[-1, 1]$ durch ein Polynom vom Grad $\leq n$ in den Knoten
$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{n+1}\frac{\pi}{2}\right), \qquad 0 \leq k \leq n,$$
interpoliert. Geben Sie eine möglichst gute Abschätzung des maximalen Interpolationsfehlers in Abhängigkeit von n (unabh. von f) an. Für welches n ist dieser Fehler kleiner als 10^{-4}?
Allgemein: Welche sind die Vorzüge der Tschebyscheff-Interpolation hinsichtlich des Daten- und hinsichtlich des Interpolationsfehlers? Wie verhält sich die Lebesgue-Konstante? Wie wertet man das IP in Tschebyscheff-Darstellung an einem Punkt aus? Wie teuer ist dies?

6. Berechnen Sie für die Funktion $f(x) = \cos(x)$ mit Hilfe des Newton-Tableaus das kubische Hermite-Interpolationspolynom p in $-\pi$ und 0. Zeigen Sie, dass für $x \in [-\pi, 0]$ gilt:
$$|f(x) - p(x)| \leq 0.26$$

7. Welche Typen interpolierender kubischer Splines kennen Sie? Leiten Sie jeweils das zugehörige LGS zur Bestimmung der Ableitungen v_i her. Wie löst man jeweils das LGS? Warum hat es eine eindeutige Lösung?
Für welche b, $c \in \mathbb{R}$ ist
$$s(x) = \begin{cases} x+4, & x \leq 0 \\ x^3 + x + 4, & 0 < x \leq 1 \\ -x^3 + bx^2 + cx + 6, & 1 < x \leq 2 \\ 7x - 2, & 2 < x \end{cases}$$
ein natürlicher kubischer interpolierender Spline?
Sei $\tilde{s}$ der natürliche kubische interpolierende Spline zu den Stützpunkten

x_i	0	1	2	3	4	5	6
y_i	0	1	1	1	1	1	0

Kann $\tilde{s}$ auf $[1, 5]$ konstant sein?

8. Welche Eigenschaften und Vorzüge hat die Spline-Interpolation allgemein? Zeigen Sie: Ist s der interpolierende kubische Spline (von einem der bekannten Typen) zu f über einem Intervall $[a, b]$ mit den äußersten Knoten in den Intervallgrenzen und ist y eine beliebige, auf $[a, b]$ definierte C^2-Funktion mit $[s''(y' - s')]_a^b = 0$, so gilt
$$\|s''\|_{L^2} \leq \|y''\|_{L^2}.$$
Wie deuten Sie dies? Gilt dies für die bekannten Spline-Typen aus der Vorlesung (mit entsprechendem y)?

9. Gibt es einen Zusammenhang zwischen Interpolation und Quadratur? Wie entsteht zum Beispiel die Simpsonregel?

10. Was ist die Idee des Extrapolationsverfahrens? Unter welcher Bedingung kann man es anwenden? Berechnen Sie die Euler'sche Zahl $e = \int_0^1 e^x + 1\,dx$ mit Hilfe des Extrapolationsverfahrens. Setzen Sie $H = 1$, $h_j = \frac{H}{n_j}$ mit $n_j = 2^{j-1}$. Brechen Sie ab, sobald $|e_{jj}| \leq 10^{-7}$.

11. Berechnen Sie die Integrale

$$I_n = \int_1^2 (\ln x)^n\,dx, \qquad n = 1, 2, \ldots$$

Zeigen Sie dazu zunächst die Rekursionsformel

$$I_n = 2(\ln 2)^n - nI_{n-1}, \qquad n \geq 2.$$

Es ist $I_1 = 0.3863\ldots$ und $I_7 = 0.0124\ldots$. Wie wird der Eingabefehler verstärkt, wenn Sie I_7 aus I_1 (Vorwärtsrekursion) bzw. I_1 aus I_7 berechnen (Rückwärtsrekursion), jeweils mit vier Stellen Genauigkeit? Schreiben Sie für eine der beiden rekursiven Berechnungen auch ein kleines Programm in Pseudo-Code. Wie hat man k zu wählen, wenn man per Rückwärtsrekursion den Wert I_7 aus $I_{7+k} = 0$ berechnen möchte mit acht Stellen Genauigkeit?

3 Lineare Gleichungssysteme, Kondition & Stabilität, lineare Ausgleichsrechnung

1. Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gegeben. Gesucht sind (nichttriviale) Zerlegungen $A = BC$ mit entsprechend dimensionierten Matrizen B und C. Für welche Eigenschaften von A kennen Sie derartige Zerlegungen? Wie und mit welchem Aufwand lassen sich die Ihnen bekannten Zerlegungen jeweils berechnen? Wie und mit welchem Aufwand können Sie damit ein LGS $Ax = b$ für geg. $b \in \mathbb{R}^n$ lösen (falls $m = n$ und A invertierbar ist)?

   - Warum pivotisiert man bei der Gauss-Elimination? Welche Rolle spielt die Permutationsmatrix in $PA = LR$?
   - Wie berechnet man die Determinante einer Matrix A? Warum eignet sich dafür eine aus der Vorlesung bekannte Zerlegung von A?
   - Wie prüft man eine symmetrische Matrix auf positive Definitheit (und warum klappt dies so)?
     Für welche $a \in \mathbb{R}$ ist die Matrix

     $$A(a) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -a \\ 0 & -a & 2 \end{pmatrix}$$

     positiv definit?
   - Argumentieren Sie: Für $(n \times n)$-Bandmatrizen mit nur p-vielen besetzten Nebendiagonalen berechnet man die LR-Zerlegung in $\mathcal{O}(np^2)$ vielen Operationen. Wie teuer ist damit das Vor- und Rückwärtseinsetzen zum Lösen eines zugehörigen LGS?

- Bestimmen Sie die Cholesky-Zerlegung der Matrix

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & & & & \\ 1 & 2 & 1 & & & \\ & 1 & 2 & 1 & & \\ & & 1 & 2 & 1 & \\ & & & 1 & 2 & 1 \\ & & & & 1 & 5 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{6\times 6}.$$

  Schreiben Sie ein Matlab-Programm, das für eine gegebene symmetrische und positiv definite Matrix A die Cholesky-Zerlegung $A = LL^{\mathrm{T}}$ berechnet.

2. Was versteht man unter der (relativen, absoluten) Kondition eines Problems? Was bedeutet es, dass ein Algorithmus stabil (im Sinne der Vorwärts- bzw. im Sinne der Rückwärtsanalyse) ist? Impliziert die Rückwärtsstabilität die Vorwärtsstabilität eines Algorithmus?

- Ist die Subtraktion zweier reeller Zahlen gut konditioniert?
  Betrachten Sie die Funktion

$$f(x) = \frac{1 - \cos x}{x^2}$$

  und bestimmen Sie den Wertebereich für $x \neq 0$. Werten Sie an $\bar{x} = 1.2 \cdot 10^{-5}$ aus, wobei der cos bis auf zehn Stellen genau gerundet werde. Was ist der exakte Wert?

- Betrachten Sie das LGS

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1-\varepsilon \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 4 \\ 4-\varepsilon \end{pmatrix}, \qquad 0 < \varepsilon \ll 1,$$

  und bestimmen Sie die exakte Lösung. Was passiert, wenn man mit gestörter rechter Seite $(4+\varepsilon, 4-2\varepsilon)^{\mathrm{T}}$ rechnet? Erklären Sie Ihre Beobachtung, indem Sie die Konditionszahl von A (z.B. bzgl. $\|\cdot\|_\infty$) berechnen. Spielt es für diese Problematik eine Rolle, mit welcher Vorgehensweise Sie das LGS lösen?
  Leiten Sie allgemein her, dass die relative Konditionszahl des Problems $Ax = b$ bei Störungen der rechten Seite gerade $\|A\|\|A^{-1}\|$ ist.

- Was ist eine untere Schranke für die Konditionszahl einer jeden Matrix? Nennen Sie Beispiele von Matrizen mit kleiner und von solchen mit großer Konditionszahl.

- Betrachten Sie die Diagonalmatrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix},$$

  welche auf ein LGS $Ax = b$ mit zwei entkoppelten Gleichungen für die beiden Lösungskomponenten x_i führt, also ein gut konditioniertes Problem bei Störungen der Diagonaleinträge und der rechten Seite ist. Berechnen Sie allerdings die Konditionszahl von A bzgl. der ∞-Norm. Wie deuten Sie den erhaltenen Wert?

- Zeigen Sie: Die relative Kondition der Berechnung des Integrals $\int_a^b f(x)\,dx$ bzgl. der Norm $\|f\|_1 := \int_a^b |f(x)|\,dx$ ist

$$\mathrm{cond}_1 = \frac{\|f\|_1}{\left|\int_a^b f(x)\,dx\right|}$$

  Für welche Integranden ist das Problem also schlecht konditioniert?

- Zeigen Sie die Rückwärtsstabilität des Standardskalarprodukts im $\mathbb{R}^n$.
- Ist die LR-Zerlegung rückwärtsstabil? Gibt es pathologische Fälle? Ist die QR-Zerlegung stabil?
- Ist bei einem stabilen Algorithmus der Ausgabefehler immer von derselben Größenordnung wie der Eingabefehler? Stimmt es, dass Algorithmen für gut konditionierte Probleme auch immer stabil sind?
- Überlegen Sie: Was spricht dagegen, zum Lösen von $Ax = b$ zuerst numerisch die Inverse A^{-1} zu berechnen und dann das Produkt $A^{-1}b$ zu bilden? Denken Sie dabei sowohl an den Rechenaufwand als auch an mögliche Stabilitätsprobleme. Betrachten Sie für letzteres insbesondere nochmals die Matrix
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1-\varepsilon \end{pmatrix},$$
bilden Sie (algebraisch) deren Inverse und bedenken Sie dann den Effekt von Rundungsfehlern.

3. Leiten Sie her: Die Matrix $H = I - 2 \cdot \frac{vv^{\mathrm{T}}}{v^{\mathrm{T}}v}$ liefert eine Spiegelung an der Senkrechten zu $v \in \mathbb{R}^n$. Ist H orthogonal? Wie bringt man eine Matrix mit Hilfe von Householder-Spiegelungen auf Dreiecksgestalt?
Berechnen Sie zu
$$\begin{pmatrix} 1 & -3 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times 2}$$
die QR-Zerlegung mittels Householder-Transformationen. Muss man die einzelnen Matrizen Q_i dafür explizit berechnen?

4. Betrachten Sie die Matrizen
$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$
und zeigen Sie, dass M orthogonal ist. Geben Sie eine QR-Zerlegung von A an. Lösen Sie damit das LGS $Ax = b$.

5. Was ist die Aufgabenstellung bei der linearen Ausgleichsrechnung? Wie ist der Zusammenhang zur Normalengleichung? Mit Hilfe welcher Zerlegung können Sie das zugehörige Minimierungsproblem lösen? Was gilt für die Kondition der Normalengleichungen? Sollte man zur Lösung des linearen Ausgleichsproblems daher bedenkenlos die Normalengleichungen benutzen? Lösen Sie das Ausgleichsgeraden-Problem zu Daten

-3	0	1	4
-5	3	-3	3

4 Nichtlineare Gleichungssysteme

1. Zusammenhang nichtlineare Gleichungssysteme - Fixpunktiterationen: Das Problem

   $$\text{“Finde } x \in \mathbb{R}^n \text{ mit } f(x) = 0 \text{ für geg. } f : D \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n\text{”}$$

   ist äquivalent zum Fixpunktproblem

   $$\text{“Finde } x^* \in \mathbb{R}^n \text{ mit } F(x^*) = x^*\text{”}$$

   mit $F(x) = x - A(x)f(x)$ für eine bel. invertierbare Matrix $A(x) \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Begründen Sie dies. Unter welchen Bedingungen konvergiert die durch die Fixpunktiteration

   $$x_{k+1} = F(x_k)$$

   gegebene Folge $\{x_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ gegen einen eindeutigen Grenzwert?

   - Betrachten Sie

     $$\begin{aligned} f(x) &= xe^{x-2} - 1, \\ F_1(x) &= e^{2-x}, \\ F_2(x) &= 2 - \ln(x) \end{aligned}$$

     und zeigen Sie, dass f genau eine Nullstelle x^* in $[1, 2]$ hat. Wenden Sie das Newton-Verfahren (NV) auf f und die Fixpunktiterationen $x_{k+1} = F_i(x_k)$ an. Wie ist jeweils die Konvergenzgeschwindigkeit der Fixpunktiterationen?
   - Geben Sie ein lokal quadratisch konvergentes Iterationsverfahren zur Berechnung von $x = \sqrt{a}$ mit $a > 0$ an. Verwenden Sie dabei nur die arithmetischen Grundoperationen.

2. Konvergiert das NV für beliebige Startwerte? Was ist die Konvergenz des NV? Wofür benötigt man in höheren Dimensionen in jedem Schritt des NV eine der obigen Matrizenzerlegungen?

   - Wenden Sie das gewöhnliche NV auf die Funktion

     $$f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3, \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} -y_3^2 + 2y_1 + y_2 + 4y_3 - 7 \\ y_3^3 - y_1^2 - 4y_1 - y_2 - 7y_3 + 12 \\ -y_3^3 + 2y_1 + 4y_2 + 8y_3 - 14 \end{pmatrix}$$

     an mit Startwert $x_0 = (0, 0, 0)^{\mathrm{T}}$. Führen Sie eine Iteration des Verfahrens aus.
   - Bestimmen Sie approximativ eine Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems

     $$\begin{aligned} 2\sin x + \cos y &= 1.1, \\ \cos x - 2\sin y &= 0.9. \end{aligned}$$

   - Zeigen Sie, dass das gewöhnliche NV für $f(x) = e^x - 1$ auf ganz $\mathbb{R}$ konvergiert. Zeigen Sie weiter, dass die Konvergenz für große x_0 langsam ist in dem Sinne, dass $|x_n - x^*| \geq 1$ für alle $x_0 \geq n + 1$ (wo x^* die gesuchte Nullstelle von f ist).

3. Was ist der Vorteil beim vereinfachten Newton-Verfahren? Was gilt für die Konvergenz der durch das vereinfachte Newton-Verfahren erzeugten Folge? Was ist die Idee beim gedämpften Newton-Verfahren?

4. Betrachten Sie das nichtlineare Ausgleichsproblem

   $$\|f(x)\|_2 = \min!$$

   und führen Sie es durch Linearisierung auf eine Folge linearer Ausgleichsprobleme zurück. Wie ist die Konvergenz?

Literatur

- P. Deuflhard / A. Hohmann, *Numerische Mathematik 1. Eine algorithmisch orientierte Einführung*, de Gruyter 2008, 4. Auflage.
- Ch. Lubich, Vorlesung über *Numerik I*, gehalten an der Universtität Tübingen im WS 2006/07, Mitschrift von Markus Klein.
- Ders., Vorlesung über *Numerik I*, gehalten ebd. im WS 2010/11, Mitschrift von Nils Rudolph.
- R. Freund / R. Hoppe (Hrsgg.), *Stoer / Bulirsch: Numerische Mathematik 1*, Springer 2007, 10., neu bearb. Auflage.
- D. Weiß, Vorlesung über *Numerik für Informatiker und Bioinformatiker*, gehalten an der Universität Tübingen im SS 2010, Skript.