

Numerische Mathematik I (Maschinenbau) frequently asked questions (FAQ), SS 05

- *Wo findet man Musterlösungen und aktuelle Informationen zur Klausur?*

Unter <http://www.igpm.rwth-aachen.de/Numa/NumaMB/> findet man sowohl aktuelle Informationen als auch viele alte Klausuren mit Musterlösungen, so dass genügend Stoff zur individuellen Vorbereitung vorliegt. Zu den während des Semesters gerechneten Kleingruppen-Aufgaben gibt es aus verständlichen Gründen allerdings keine Musterlösungen.

- *Wann und wo findet die Klausur statt?*

Die Klausur findet am Montag, den 05.09.05, 14:00–16:00 Uhr, in diversen Hörsälen (Audimax, Grüner HS, Fo1, Fo2, etc.) statt. Die Sitzplatzverteilung wird am Mittwoch, den 31.08.05, und die Klausurergebnisse am Montag, den 19.09., bekanntgegeben, beides sowohl per Aushang im Hauptgebäude, 1. Stock, gegenüber von Raum 103, als auch unter <http://www.igpm.rwth-aachen.de/Numa/NumaMB/>. Die Einsicht findet am Donnerstag, den 22.09., ab 9:00, im Hauptgebäude, 1. Stock, Raum 149, statt. Die mündlichen Nachprüfungen finden von Montag, den 26.09. bis Donnerstag, den 29.09., statt.

- *Wann ist man zugelassen?*

Zulassung zur Klausur erhalten diejenigen, die das Numerik-Labor erfolgreich besucht haben (6-mal anwesend, beide Mini-Tests bestanden), regelmäßig (d. h. meistens) an den Kleingruppenübungen teilgenommen haben und mindestens zweimal dort vorgerechnet haben (Ausnahme: Materialwissenschaftler), sowie natürlich die sonstigen Bedingungen gemäß DPO erfüllen.

- *Gibt es vor der Klausur eine Extrasprechstunde?*

In den beiden letzten Wochen vor der Herbstklausur (diesmal: 22.08.-02.09.05) findet täglich eine Klausur-Sprechstunde von 10:00–12:00 Uhr statt, und zwar im Hauptgebäude, 1. Stock, Raum 103. Da gegen Ende dieser beiden Wochen erfahrungsgemäß sehr starker Andrang herrscht, empfehlen wir dringend, bereits in der ersten Woche Fragen zu stellen.

- *Welche Themen sind klausurrelevant?*

Klausurrelevant sind alle in der Vorlesung und Übung behandelten Begriffe und Verfahren: Kondition, Stabilität, gestörte lineare Gleichungssysteme, Gauß-Elimination, LR -Transformation, Skalierung, Pivotisierung, Nachiteration, LDL^T -Transformation, QR -Zerlegung (Givens), Aufwand, linearer Ausgleich (QR und Normalgleichungen), nichtlineare skalare Gleichungen (Bisektion, Sekantenverfahren), nichtlineare Gleichungssysteme (Banach'sche Fixpunktiteration, Newton-Verfahren, vereinfachtes Newton-Verfahren), nichtlinearer Ausgleich (Gauss-Newton mit QR und Normalgleichungen), Konvergenzordnung, Interpolation (Lagrange, Newton, Neville-Aitken), numerische Differentiation, Quadratur (Newton-Cotes, auch summiert, Gauß-Quadratur, Romberg-Extrapolation), gewöhnliche Differentialgleichungen (Reduktion auf System erster Ordnung, Euler explizit, implizit und verbessert, implizite Mittelpunktsregel, Trapezmethode, Runge-Kutta).

- *Welche Hilfsmittel sind zur Klausur zugelassen?*

Als Hilfsmittel zugelassen sind pro Prüfling 5 handgeschriebene und zusammengetackerte DIN-A4-Blätter (d. h. 10 Seiten) sowie genau ein Taschenrechner, der jedoch nicht programmierbar sein darf, d. h. keine benutzerdefinierten Funktionen ausführen kann. Die aktuelle Positivliste findet man unter <http://www.igpm.rwth-aachen.de/Numa/NumaMB/>. Wer sich absolut sicher ist, dass sein Taschenrechner zwar nicht programmierbar ist, ihn aber dennoch nicht auf dieser Positivliste finden kann, wende sich bis spätestens zum

29.07.05 an uns. Handys dürfen nicht mitgebracht werden, auch wenn sie ausgeschaltet sind. Zuwiderhandlungen gelten als Täuschungsversuch!

- *Mit wie vielen Stellen soll man in der Klausur rechnen?*

Falls in der Aufgabenstellung die Verwendung einer bestimmten Anzahl von Stellen gefordert ist, hat man sich natürlich daran zu halten (Erinnerung: nach **jeder** Operation entsprechend runden, dann erst weiterrechnen). Eine große Anzahl von Stellen (“Rechnen Sie in 10-stelliger GPA”) wird jedoch sicher nicht gefordert werden, da dies für eine zweistündige Klausur ungeeignet wäre.

Falls in der Aufgabenstellung keine Vorschrift zur Gleitpunktarithmetik gemacht ist, gelten folgende Faustregeln:

4–5 Stellen reichen bei fast allen klausurrelevanten Aufgaben. Nur bei hochgenauen Rechnungen benötigt man mehr Stellen, d. h. etwa ≥ 8 .

Beim Romberg-Quadratur-Schema beispielsweise muss von Anfang an, d. h. im **gesamten** Schema, mit ausreichend vielen Stellen (etwa ≥ 8) gerechnet werden, da sich die Rundungsfehler von oben links ja bis ins Ergebnis unten rechts fortpflanzen.

Da es sich bei dem (ebenfalls hochgenauen, da quadratisch konvergenten) Newton-Verfahren hingegen um ein iteratives (d. h. alte Rundungsfehler werden im Falle der Konvergenz automatisch korrigiert) Verfahren handelt, ist es dort ausreichend, erst sukzessive mit jedem weiteren Iterationsschritt immer mehr Stellen zur Verfügung zu stellen, um tatsächlich die quadratische Konvergenz zu sehen und nicht nur Rundungsfehler zu iterieren.

Bei der Nachiteration (zur Verbesserung der Genauigkeit der Lösung x eines linearen Gleichungssystems $Ax = b$) muss die Berechnung des Residuums $r := b - Ax$ unbedingt in höherer (doppelter) Genauigkeit erfolgen als die vorherige Berechnung der LR -Zerlegung bzw. LDL^T -Zerlegung von A . Das anschließende Lösen der Gleichung $LR\Delta x = r$ (bzw. $LR\Delta x = PDr$ bei Skalierung und Pivotisierung bzw. $LDL^T\Delta x = r$ bei Cholesky) durch Vorwärts-/Rückwärtseinsetzen kann dann wieder in einfacher Genauigkeit erfolgen, d. h. unter Verwendung der **alten** Matrizen L und R (sowie evtl. P und D). Hat man also die Matrixzerlegung sowie die Lösung x mit ursprünglich 4 Stellen berechnet, so ist $r := b - Ax$ unbedingt mit 8 Stellen zu berechnen, und dann mit wiederum 4 Stellen Δx sowie die verbesserte Lösung $x + \Delta x$.

- *Wie ausführlich sind die Voraussetzungen des Banachschen Fixpunktsatzes darzustellen?*

Bei der Untersuchung der (bei uns mindestens stetig differenzierbaren) Iterationsfunktion $F(x)$ (mit $x^* = F(x^*)$) auf Selbstabbildung sind die Extrema von F zu bestimmen, wobei Randwerte und Extremwerte von F in Frage kommen. Nur wenn man glaubhaft vermitteln kann, dass F monoton ist, braucht man keine Extremwertbetrachtung von F durchzuführen, d. h. man braucht nur die Randwerte einzusetzen und nicht noch zusätzlich alle Extremwerte $F(x_0)$ zu berechnen mit $F'(x_0) = 0$. Beispielsweise glauben wir der Aussage “ $F(x) = e^x$ ist monoton in $[0, 1] \Rightarrow$ untersuche nur Randwerte” ohne weiteren Beweis. Die Aussage “ $-1 \leq F(x) := \sin(x) \leq 1 \Rightarrow F$ ist selbstabbildend auf jedem Intervall $[a, b] \supseteq [-1, 1]$ ” glauben wir ebenfalls ohne weiteren Beweis. Jedoch glauben wir einer Aussage wie “ $F(x) = 5x^4 + 3x^3 - 2x^2 + 10x - 3$ ist monoton in $[a, b]$ ” nicht ohne Beweis, d. h. es ist erst zu untersuchen, ob Stellen x_0 mit $F'(x_0) = 0$ in $[a, b]$ liegen, und — falls dies der Fall ist — sind auch alle Extremwerte $F(x_0)$ auszurechnen und mit den Randwerten zu vergleichen.

Hat man eine **abgeschlossene** (unbedingt erwähnen!) Menge E gefunden mit $F(E) =: \tilde{E} \subseteq E$ (d. h. F bildet E auf sich selbst ab), so ist nun die Kontraktivität zu untersuchen, d. h. ob $\max_{x \in E} |F'(x)| =: L < 1$ gilt. Da F stetig differenzierbar ist, kommen hierbei auch wieder Rand- und Extremwerte in Frage, so dass man bei monotonem F' (wieder begründen, siehe oben) nur Randwerte von F' untersuchen muss. Man hat also praktisch dieselben Überlegungen wie bei der Selbstabbildung durchzuführen, allerdings alles “um eine Ableitung höher”.

Im mehrdimensionalen Fall muss E **konvex** (unbedingt erwähnen!) sein, damit $\max_{x \in E} \|F'(x)\| =: L < 1$ hinreichend ist für Kontraktivität. (Erinnerung: Eine Menge E ist konvex, wenn die Verbindungsstrecke je zweier beliebiger Punkte aus E stets **ganz** in E liegt. Ein n -dimensionaler Quader (n -dimensionales Intervall) ist trivialerweise konvex, ebenso eine n -dimensionale Kugel, nicht jedoch ein L-förmiges Gebiet.) Bei der Normbildung wird man, wie in der Übung, in der Regel erst die Elemente der Jacobi-Matrix F' einzeln betragsmäßig abschätzen und dann die Norm bilden, was zwar gröber, aber sehr viel weniger aufwändig ist als wenn man erst $\|F'(x)\|$ für allgemeines x hinschreibt und dann bzgl. x maximiert. Hierbei kann man sich entweder für die 1- oder ∞ -Norm entscheiden, wobei im Falle $\max_{x \in E} \|F'(x)\|_\infty \approx \max_{x \in E} \|F'(x)\|_1$ meist die ∞ -Norm am geschicktesten ist, da ja stets $\|x^1 - x^0\|_\infty \leq \|x^1 - x^0\|_1$ gilt, so dass die a-priori-Abschätzung dann günstiger wird als mit der 1-Norm. Für die 2-Norm ist dieses vorherige komponentenweise Abschätzen nicht zulässig, da nicht sicher ist, dass ein Vergrößern der Beträge der Komponenten von F' auch ein Vergrößern von $\|F'\|_2$ zur Folge hat. Dies ist aber keine nennenswerte Einschränkung, da die 2-Norm aufgrund ihres höheren Aufwandes (Eigenwertbestimmung von $(F')^T F'$) hierbei ohnehin kaum verwendet wird.

Da der gesuchte Fixpunkt x^* stets in \tilde{E} liegt, reicht es auch aus, wenn man die Kontraktivitätsuntersuchung auf dem **kleineren** Bereich \tilde{E} durchführt. Dies hat zwar den Nachteil, dass die Zahlenwerte oft etwas unschöner werden, jedoch den erheblichen Vorteil, dass die Lipschitzkonstante L dadurch meist kleiner wird. Man muss allerdings beachten, dass die sich daraus ergebende a-priori-Abschätzung (“nach $n = 17$ Schritten gilt sicher $\|x^n - x^*\| < \varepsilon$ ”) nur gilt, wenn auch der (evtl. vorgeschriebene) Startwert in \tilde{E} liegt. Liegt der Startwert nicht \tilde{E} , so braucht man eben einen Schritt mehr (um nämlich von diesem Startwert aus E nach \tilde{E} zu kommen), d. h. es gilt sicher $\|x^{n+1} - x^*\| < \varepsilon$.

- Welche Funktion und welches Vorzeichen muss man beim nichtlinearen Ausgleich wählen?

Beim nichtlinearen Ausgleich ist eine Funktion $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $n < m$ (deshalb leider i. a. $F(x) \neq 0$) bzgl. der 2-Norm zu minimieren, d. h. im (Gaußschen) Sinne minimaler Quadrate der Komponenten von F : $\|F(x)\|_2 \rightarrow \min$, d. h. Beträge der einzelnen Zeilen gegeneinander “ausgleichen”. Bei der Gauß-Newton-Methode wird dieses nichtlineare Problem durch eine Iterationsfolge linearer Probleme ersetzt, indem man F jeweils im aktuellen Punkt x^k linear approximiert (deshalb “Newton”) und das sich daraus ergebende lineare Ausgleichsproblem $\|F'(x^k)\Delta x^k + F(x^k)\|_2 \rightarrow \min$ löst (mit $x^{k+1} := x^k + \Delta x^k$). Hierzu wird das System $[F'(x^k) \mid -F(x^k)]$ (also inkl. rechter Seite) QR -transformiert und der obere $(n \times n)$ -Teil anschließend durch Rückwärtseinsetzen exakt gelöst. Das sich aus den letzten $m - n$ Zeilen der transformierten rechten Seite ergebende Residuum ist das Residuum $\|F'(x^k)\Delta x^k + F(x^k)\|_2$ der linearen Näherung, das sowohl größer als auch kleiner als das “echte” Residuum $\|F(x^{k+1})\|_2$ sein kann. Arbeitet man hingegen mit Normalgleichungen, so ist das System $F'(x^k)^T F'(x^k)\Delta x^k = -F'(x^k)^T F(x^k)$ mit LDL^T -Transformation (oder bei kleinen m, n auch mit Gaußelimination) zu lösen, wobei man sich wegen $\kappa_2(F'(x^k)^T F'(x^k)) = \kappa_2(F'(x^k))^2$ jedoch eine Quadrierung und damit Verschlechterung der Kondition einhandelt.

Ebenso wie beim linearen Ausgleich kann auch beim nichtlinearen Ausgleich die zu minimierende Funktion $F(x)$ sowohl explizit als auch implizit von den Werten in der Messwertetabelle abhängen. Wir beschränken uns im Folgenden auf den Fall, dass m Messwertepaare (t_i, y_i) , $i = 1, \dots, m$, gegeben sind.

Im expliziten Fall ist eine explizite analytische Funktion $y(t; x)$ gegeben für den Messwert y , der von dem anderen Messwert t sowie den unbekanntem Parametern x_j , $j = 1, \dots, n < m$, abhängt, z. B. $y(t; x) = x_1 \exp(-x_2 t)$ mit $n = 2$. Man wählt dann beispielsweise $F(x) := [y(t_i; x) - y_i]_{i=1, \dots, m}$, also ergibt sich als $(m \times n)$ -Jacobi-Matrix $F'(x) = [\partial y(t_i; x) / \partial x_j]_{i=1, \dots, m; j=1, \dots, n}$ und als rechte Seite $-F(x) = [y_i - y(t_i; x)]_{i=1, \dots, m}$.

Im impliziten Fall ist ein impliziter analytischer Zusammenhang $f(t, y; x) = 0$ gegeben, der die Messwerte t und y miteinander verknüpft und von den unbekanntem Parametern x_j , $j = 1, \dots, n < m$, abhängt, z. B. $f(t, y; x) = (t/x_1)^2 + (y/x_2)^2 - 1 = 0$ für eine Ellipse in Normallage in der (t, y) -Ebene mit $n = 2$. Man wählt dann einfach $F(x) := [f(t_i, y_i; x)]_{i=1, \dots, m}$,

also ergibt sich als $(m \times n)$ -Jacobi-Matrix $F'(x) = [\partial f(t_i, y_i; x) / \partial x_j]_{i=1, \dots, m; j=1, \dots, n}$ und als rechte Seite $-F(x) = [-f(t_i, y_i; x)]_{i=1, \dots, m}$.