

Gewöhnliche Differentialgleichungen; Eigenwertprobleme

9. Vorlesung
170 004 Numerische Methoden I

Erika Hausenblas und Clemens Brand

Montanuniversität Leoben

16. Mai 2019

Gliederung 9. Vorlesung

① Gewöhnliche Differentialgleichungen: Ergänzungen

Hamiltonsche Mechanik

Bahnen im Phasenraum

Symplektische Verfahren

② Eigenwertprobleme

Definition: Eigenwerte und Eigenvektoren

Anwendungen: Netzwerke, Schwingungen...

Methoden

Feder-Masse System

Formulierung als hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Gegeben ist:

$$m \frac{d^2}{dt^2} y(t) = -ky(t), \quad t \geq 0, \quad y(0) = q_0, \quad \dot{y}(0) = p_0/m.$$

Dies kann man mit Hilfsvariablen $q(t) = y(t)$, $p(t) = m\dot{y}(t)$ auch umschreiben als

$$\begin{aligned}\dot{q}(t) &= \frac{dq}{dt} = \frac{p}{m} = \frac{\partial H}{\partial p}(q(t), p(t)), \\ \dot{p}(t) &= \frac{dp}{dt} = -kq = -\frac{\partial H}{\partial q}(q(t), p(t)),\end{aligned}$$

wobei die *Hamilton-Funktion* definiert ist durch

$$H(q, p) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kq^2,$$

und die Anfangsbedingungen durch den Vektor $[q_0, p_0]^T$ gegeben sind.

Feder-Masse System

Formulierung als hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Wir können dieses System auch umschreiben:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -k & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}.$$

Die exakte Lösung ist auch bekannt und lautet folgendermaßen:

$$\begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\omega t) & \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) \\ -m\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_0 \\ p_0 \end{bmatrix} = M_t \begin{bmatrix} q_0 \\ p_0 \end{bmatrix}.$$

Feder-Masse System

Eigenschaften der hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Wichtig sind folgende Eigenschaften

- 1 Die Abbildung $M_t : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ ist flächentreu, d.h. hat eine Menge $A = \{(x_1, x_2)^T : a \leq x_1 \leq b, c \leq x_2 \leq d\}$, so hat $M_t A$ die gleiche Fläche.
- 2 Das System ist reversibel bei Zeit-Umkehr, d.h. $M_{-t} = (M_t)^{-1}$

$$M_{-t} = \begin{bmatrix} \cos(-\omega t) & \frac{1}{m\omega} \sin(-\omega t) \\ -m\omega \sin(-\omega t) & \cos(-\omega t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\omega t) & -\frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) \\ m\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{bmatrix} = (M_t)^{-1}.$$

- 3 Die Hamilton-Funktion ist zeitlich konstant, d.h.

$$\frac{d}{dt} H(q(t), p(t)) = 0$$

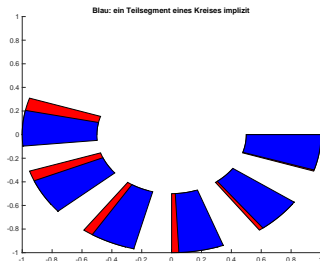
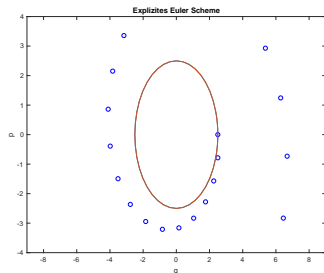
oder $H(q(t), p(t)) = H(q_0, p_0)$ für alle $t \geq 0$.

Feder-Masse System

Explizites Euler-Verfahren

Das explizite Euler-Verfahren mit Zeitschritt h lautet:

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_n + h \frac{p_n}{m} \\ p_n - hkq_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{h}{m} \\ -hk & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} = (I + hA) \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}.$$

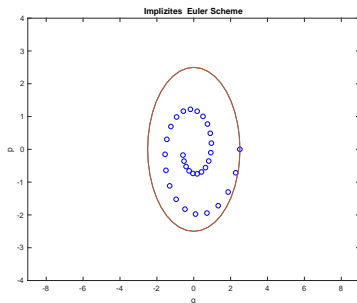


Feder-Masse System

Implizites Euler-Verfahren

Das implizite Euler-Verfahren mit Zeitschritt h lautet:

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{1 + h^2 \frac{k}{m}} \begin{bmatrix} 1 & \frac{h}{m} \\ -hk & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} = (I - hA)^{-1} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}.$$

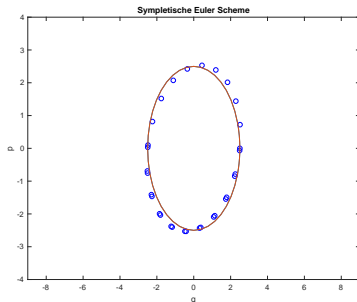


Feder-Masse System

Symplektisches Euler-Verfahren

Das symplektische Euler-Verfahren mit Zeitschritt h lautet:

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_n + h \frac{p_{n+1}}{m} \\ p_n - hkq_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - h^2 \frac{k}{m} & \frac{h}{m} \\ -hk & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}.$$



Feder-Masse System

Veränderung einer Flächeneinheit

- Das explizite Euler-Schema kann man als folgende Abbildung schreiben:

$$\begin{bmatrix} T_1(q, p) \\ T_2(q, p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{h}{m} \\ -hk & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}.$$

Da $\det(J_T) = (1 - h^2 \frac{k}{m})$ gilt, folgt (J_T ist die Jacobimatrix)

$$\int_{T(D)} x \, dx = \int_D J_T(x) \, dx = (1 + h^2 \frac{k}{m}) \int_D 1 \, dx.$$

- Das implizite Euler-Schema kann man als folgende Abbildung schreiben:

$$\begin{bmatrix} T_1(q, p) \\ T_2(q, p) \end{bmatrix} = \frac{1}{1 + h^2 \frac{k}{m}} \begin{bmatrix} 1 & \frac{h}{m} \\ -hk & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}.$$

Da $\det(J_T) = (1 + h^2 \frac{k}{m})^{-1}$ gilt, folgt $\int_{T(D)} x \, dx = (1 + h^2 \frac{k}{m})^{-1} \int_D 1 \, dx$.

- Das symplektische Euler-Schema kann man als folgende Abbildung schreiben:

$$\begin{bmatrix} T_1(q, p) \\ T_2(q, p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - h^2 \frac{k}{m} & \frac{h}{m} \\ -hk & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}.$$

Da $\det(J_T) = 1$ gilt, bleibt die Fläche gleich.

Geometrische Eigenschaften der numerischen Verfahren

- ▶ *Strömer-Verlet Methoden* in der molekularen Dynamik: Diese Methode respektiert die physikalischen Größen;
- ▶ Hamiltonian: Symplektische Integration

Gliederung 9. Vorlesung

① Gewöhnliche Differentialgleichungen: Ergänzungen

Hamiltonsche Mechanik

Bahnen im Phasenraum

Symplektische Verfahren

② Eigenwertprobleme

Definition: Eigenwerte und Eigenvektoren

Anwendungen: Netzwerke, Schwingungen...

Methoden

Eigenwertproblem

Definition: Eigenwerte und Eigenvektoren

Gegeben:

eine $n \times n$ -Matrix A

Gesucht:

- ▶ ein vom Nullvektor verschiedener Vektor \mathbf{x} und
- ▶ ein Skalar λ (auch $\lambda = 0$ ist erlaubt),

welche die Gleichung $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ erfüllen.

Ein solches λ heißt *Eigenwert* von A , ein passendes \mathbf{x} heißt *Eigenvektor* von A zum Eigenwert λ .

Anwendung:

Schwingungen, Hauptträgheitsachsen starrer Körper, Spannungstensor, Stabilitätstheorie, Hauptkomponentenanalyse, Quantenmechanik. . .

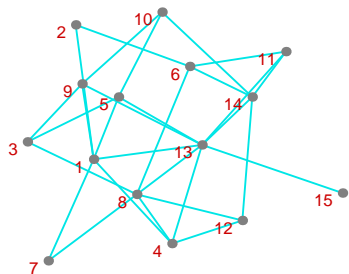
Eigenwerte und Eigenvektoren, anschaulich

Siehe Skriptum, Kapitel 8.1!

- ▶ „Der Hauptberuf einer Matrix ist, Vektoren zu multiplizieren!“
- ▶ $n \times n$ - Matrix beschreibt allgemein lineare Abbildung $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$
- ▶ $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$: Matrix, angewandt auf Vektor \mathbf{x} , gibt neuen Vektor \mathbf{y} . Der zeigt normalerweise in andere Richtung und hat andere Länge.
- ▶ Jede $n \times n$ -Matrix hat aber ganz spezielle *Eigenvektoren*. Für sie ändert sich bei Multiplikation nur die *Länge*, aber die *Richtung* bleibt gleich (oder entgegengesetzt).
- ▶ sehen Sie sich die MatI ab-Demo EIGSHOW an (Übungsunterlagen)!

Beispiel: Erreichbarkeit in einem Netzwerk

Ein Netzwerk (Verkehrsverbindungen, verlinkte Seiten im Internet, soziales Netz... , mathematisch: ein Graph) lässt sich durch seine *Adjazenzmatrix* beschreiben



$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

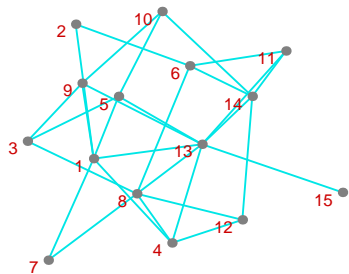
Welcher Knoten ist am besten erreichbar?

Welche Seite Internet-Seite listet Google als erste?

Beispiel: Erreichbarkeit in einem Netzwerk

Lässt sich als Eigenwertproblem $Ax = \lambda x$ formulieren

Der Eigenvektor x zum größtem Eigenwert λ liefert Bewertung!

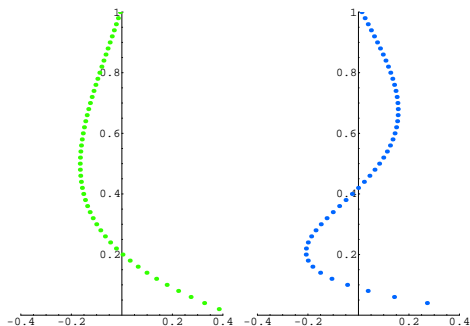


$$x = \begin{bmatrix} 74 \\ 27 \\ 41 \\ 64 \\ 56 \\ 45 \\ 32 \\ 72 \\ 56 \\ 38 \\ 46 \\ 44 \\ 100 \\ 60 \\ 22 \end{bmatrix}$$

Beispiel: Schwingungen der frei hängenden Kette

Das Eigenwertproblem $A \cdot \mathbf{x} = \frac{\ell \omega^2}{ng} \mathbf{x}$ beschreibt die Schwingungsformen einer (idealisierten) n -gliedrigen freihängenden Kette (Bild: erste und zweite Oberschwingung)

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & & \dots & & 0 \\ -1 & 3 & -2 & & & \vdots \\ & -2 & 5 & -3 & & \vdots \\ & & -3 & 7 & \ddots & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \\ 0 & \dots & & 1-n & & 1-n \\ & & & & & 2n-1 \end{bmatrix}$$



Schwingungsberechnungen (Saiten, Membrane, Balken, Platten, Schall, ...) führen typischerweise zu Eigenwertaufgaben.

Methoden

- ▶ Nullstellen im charakteristische Polynom bestimmen (klassisch, ineffizient bei voller Matrix, gut für Tridiagonalmatrix!)
- ▶ Vektoriteration (langsam!)
- ▶ QR-Verfahren (Standard)
- ▶ Lanczos-Verfahren (Spezial-Verfahren bei schwach besetzter Matrix)

MATLAB-Befehle eig und eigs

Anwendungsbeispiele

$d = \text{eig}(A)$ liefert Vektor von Eigenwerten

$[V,D] = \text{eig}(A)$ Spalten von V sind Eigenvektoren, Diagonalelemente von D sind Eigenwerte.

$d = \text{eigs}(A)$, $d = \text{eigs}(A)$ analoge Befehle für **schwach besetzte** Matrizen. Liefern die sechs betragsgrößten Eigenwerte und zugeh. Eigenvektoren.

Wichtige Feststellungen zu $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$

Siehe Skriptum, Kapitel 8.1 und 8.2!

- ▶ Eigenwerte sind Nullstellen des **charakteristischen Polynoms** $\det(A - \lambda I)$
- ▶ Eine $n \times n$ -Matrix hat genau n **reelle oder komplexe** Eigenwerte (bei entsprechender Zählung)
- ▶ Eigenwerte **symmetrischer** Matrizen sind immer **reell**.
- ▶ Ähnlichkeitstransformation: $X^{-1}AX$ und A haben die gleichen Eigenwerte .
- ▶ Hauptachsentransformation: Symmetrische Matrizen sind durch orthogonale Transformation diagonalisierbar, $Q^T \cdot A \cdot Q = D$.

Vektoriteration bestimmt den betragsgrößten Eigenwert

Iterationsverfahren nach Richard von Mises und Hilda Pollaczek-Geiringer

Gegeben eine $n \times n$ -Matrix A , ein Startvektor $\mathbf{x}^{(0)} \neq 0$ und ein fix gewähltes $i \in \{1, \dots, n\}$

Iteriere für $k = 1, 2, \dots$

berechne $\mathbf{y}^{(k)} = A\mathbf{x}^{(k-1)}$

setze $\lambda^{(k)} = y_i^{(k)}$ (i -te Komponente von $\mathbf{y}^{(k)}$)

setze $\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k)} / \lambda^{(k)}$ (Skalierung)

Falls ein reeller Eigenwert betragsmäßig größer ist als alle anderen Eigenwerte und ein zugehöriger Eigenvektor in Komponente i ungleich 0 ist, konvergieren die $\lambda^{(k)}$ und die $\mathbf{x}^{(k)}$.

Varianten dieses Verfahrens verwenden unterschiedliche Skalierungsvorschriften.

Das QR-Verfahren

bestimmt alle Eigenwerte einer Matrix A durch eine Folge orthogonaler Transformationen

Iteriere bis zur Konvergenz

berechne QR-Zerlegung $A = Q \cdot R$

setze $A = R \cdot Q$ (Ähnlichkeitstransform. $A \rightarrow Q^T \cdot A \cdot Q$)

Das Verfahren konvergiert (unter gew. Voraussetzungen und u.U. sehr langsam) zu einer Matrix in oberer Dreiecksform. Deren Hauptdiagonale enthält die Eigenwerte.

Für den praktischen Einsatz wird das Verfahren durch gezielte Verschiebungen der Art $\tilde{A} = A + sI$ beschleunigt.