Numerik für CE, Ing. und Phys., Übung 9, Lösungsvorschlag

Gruppenübung

G 26 (*QR–Zerlegung*)

Gegeben seien die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \\ 3 & 1 & 3 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} R \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 1 & \sqrt{3} \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ist R aus einer QR–Zerlegung der Matrix A entstanden?

Nein! Beim ersten Schritt der QR–Zerlegung wird mit der orthogonalen Matrix U_1 die erste Spalte von A so gespiegelt, daß das Spiegelbild auf der ersten Koordinatenachse liegt. Die Norm der ersten Spalte von A und die des Spiegelbildes sind damit gleich.

Die 2-Norm der ersten Spalte von A ist allerdings 4 und die 2-Norm des angeblichen Spiegelbildes, der ersten Spalte der Matrix R, ist 5. Damit kann R nicht aus einer QR-Zerlegung der Matrix A entstanden sein!

G 27 (*Lineare Ausgleichsprobleme*)

Ein Wagen werde aus dem Stand innerhalb von 10 Sekunden auf seine Fahrgeschwindigkeit von 100 km/h beschleunigt. Die Geschwindigkeit des Wagens nach 3 Sekunden betrage 29 km/h und nach 6 Sekunden 63 km/h. Aus $v(t) = a \cdot t$ soll mittels der Methode der kleinsten Fehlerquadrate die Beschleunigung a bestimmt werden. Hierbei bezeichne v die Geschwindigkeit und t die Zeit.

1. Stellen Sie das zugehörige Gleichungssystem auf.
2. Leiten Sie die Normalgleichung her, und berechnen Sie die Beschleunigung.
3. Bestimmen Sie die Norm des Residuums.

1.

$$Aa = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} a = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \\ 10 \end{pmatrix} a = b = \begin{pmatrix} 29 \\ 63 \\ 100 \end{pmatrix}$$

2. Normalgleichung

$$A^T Aa = 145a = A^T b = 1465.$$

Daraus folgt die Beschleunigung

$$a = \frac{293}{29} \frac{km}{h \cdot s} \approx 10,103 \frac{km}{h \cdot s} \approx 2,807 \frac{m}{s^2}.$$

3. *Das Residuum ist*

$$r = \frac{1}{29}\begin{pmatrix} 3\cdot 293 - 29\cdot 29 \\ 6\cdot 293 - 29\cdot 63 \\ 10\cdot 293 - 29\cdot 100 \end{pmatrix} = \frac{1}{29}\begin{pmatrix} +38 \\ -69 \\ +30 \end{pmatrix},$$

   und damit ist $\|r\|_2 = \frac{\sqrt{7105}}{29} \approx 2,906\frac{km}{h}$.

G 28 (*Householdermatrix*)
Man gebe u an, so daß

$$Q = I - \frac{2}{u^T u} u u^T$$

den Vektor

$$x = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \\ 2 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

auf ein Vielfaches des ersten Koordinateneinheitsvektors transformiert. Verifizieren Sie Ihr Ergebnis.

Der Vektor u für die Householdermatrix Q:

$$\begin{aligned} u &= \begin{pmatrix} sign(x_1)(|x_1| + \|x\|_2) \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1(2+5) \\ -3 \\ 2 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ -3 \\ 2 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}, \\ \beta &= \frac{2}{u^T u} = \frac{2}{70} = \frac{1}{35}. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} Qx &= (I - \beta u u^T)x = Ix - \beta(u^T x)u \\ &= \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \\ 2 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} - \frac{1}{35}\cdot 35 \begin{pmatrix} 7 \\ -3 \\ 2 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Der Vektor x wird also auf $-\|x\|_2 e_1$ abbildet.

Hausübung

H 25 (*Lineares Ausgleichsproblem*)

Gegeben sei eine Tabelle von Messwerten:

i	1	2	3	4
t_i	1	2	3	4
y_i	1	2	2	3

Zur Approximation der "Punktwolke" (t_i, y_i) soll der Ansatz $x_1 + x_2 t + x_3 t^2$ verwendet werden.

a) Bestimmen Sie die Vektoren $\vec{\varphi}_1, \ldots, \vec{\varphi}_3$ und die Matrix Φ.

b) Stellen Sie das Normalgleichungssystem auf und lösen Sie es mit einem geeigneten Verfahren.

c) Skizzieren Sie die Lösung.

d) Berechnen Sie die 2-Norm des Residuums $\vec{r}$.

a) *Die Ansatzfunktionen lauten $\varphi_1(t) = 1$, $\varphi_2(t) = t$ und $\varphi_3(t) = t^2$. Demnach ergibt sich*

$$\vec{\varphi}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{\varphi}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{\varphi}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 9 \\ 16 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \Phi = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{pmatrix}.$$

b) *Das Normalgleichungssystem $\Phi^T \Phi x = \Phi^T y$ lautet*

$$\begin{pmatrix} 4 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 8 \\ 23 \\ 75 \end{pmatrix}.$$

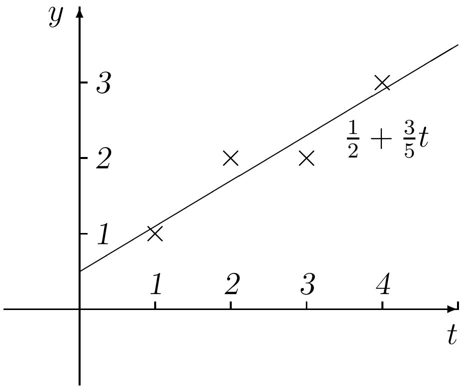
Die Lösung dieses Systems ist z.B. mit dem Cholesky-Algorithmus möglich, da die Matrix $\Phi^T \Phi$ symmetrisch und positiv definit ist. Die Zerlegung ist gegeben durch LL^T mit

$$L = \begin{pmatrix} 2 & & \\ 5 & \sqrt{5} & \\ 15 & 5\sqrt{5} & 2 \end{pmatrix}$$

und die Lösung lautet demnach

$$x = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{3}{5} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

c) *Die Lösung ist also die Gerade* $y = \frac{1}{2} + \frac{3}{5}t$.



d) *Die Komponenten des Residuums sind gegeben durch*

$$r_i = y_i - \sum_{j=1}^{3} x_j \varphi_j(t_i), \quad i = 1, \dots, 4,$$

also ergibt sich

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} 1 - (\frac{1}{2} + \frac{3}{5}1) \\ 2 - (\frac{1}{2} + \frac{3}{5}2) \\ 2 - (\frac{1}{2} + \frac{3}{5}3) \\ 3 - (\frac{1}{2} + \frac{3}{5}4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 0.3 \\ -0.3 \\ 0.1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \|\vec{r}\|_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}.$$

H 26 (*Ausgleichsproblem mit trigonometrischen Ansatzfunktionen*)

Lineare Ausgleichsrechnung ist auch mit anderen Funktionen als Polynomen möglich. Bestimmen Sie die Parameter x_1, x_2, x_3 in dem Ansatz

$$H(t) = x_1 + x_2 \sin\frac{2\pi t}{12} + x_3 \cos\frac{2\pi t}{12}$$

so, dass $H(t)$ die Daten

t_i	0	2	4	6	8	10
$m(t_i)$	1	1.6	1.4	0.6	0.2	0.8

im Sinne der Methode der kleinsten Quadrate möglichst gut approximiert. Benutzen Sie die Normalgleichung.

Die Ansatzfunktion lässt sich zerlegen in die Ansätze

$$a_1(t) = 1, \quad a_2(t) = \sin\frac{2\pi t}{12} \quad \text{und} \quad a_3(t) = \cos\frac{2\pi t}{12}.$$

Die Matrix A lautet damit

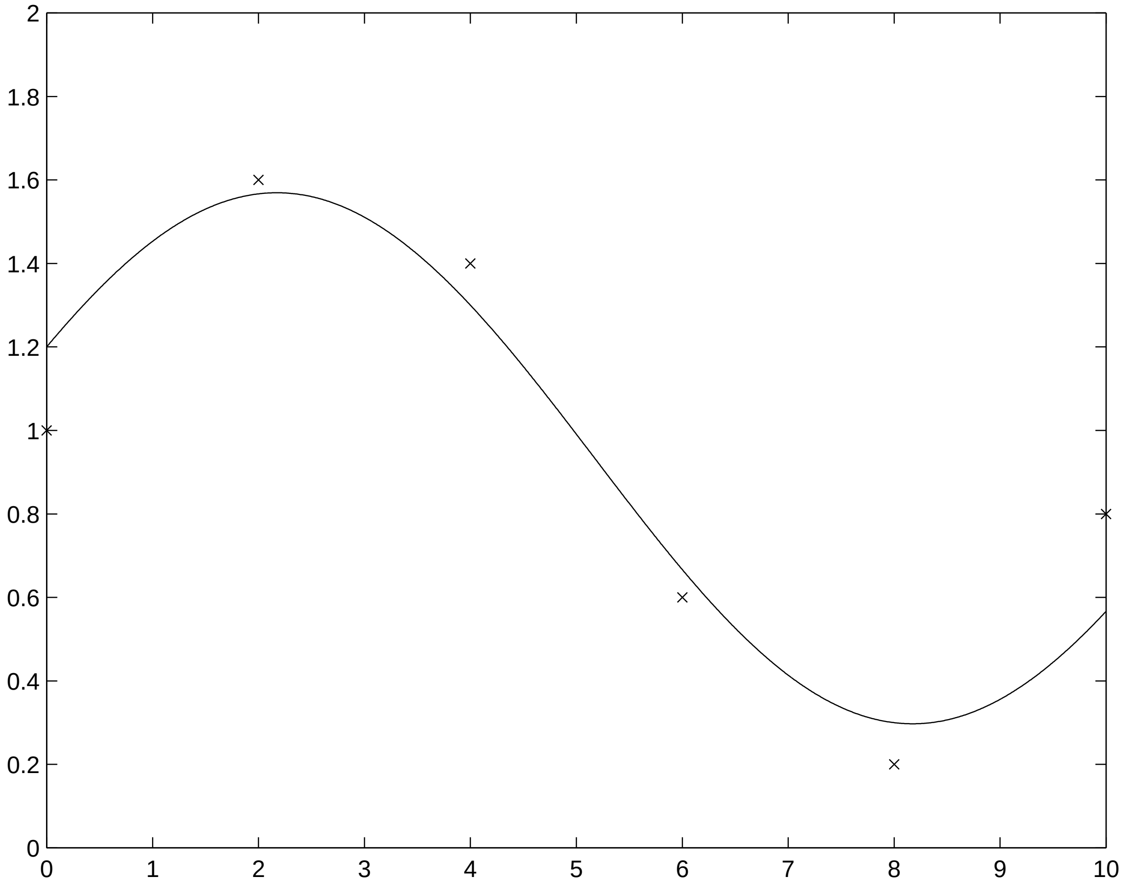
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0.5 \\ 1 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -0.5 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -0.5 \\ 1 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0.5 \end{pmatrix}.$$

Die Normalgleichungen ($A^TAx = A^Ty$) sind

$$\begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 5.6 \\ \sqrt{3} \\ 0.8 \end{pmatrix}.$$

Als Lösung ergibt sich $x = (\frac{14}{15}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{4}{15})^T$. Die Fehlerquadratsumme der Lösung ist

$$\|Ax - b\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} \frac{6}{5} \\ \frac{47}{30} \\ \frac{13}{10} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{3}{10} \\ \frac{17}{30} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{16}{10} \\ \frac{14}{10} \\ \frac{6}{10} \\ \frac{2}{10} \\ \frac{8}{10} \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} \frac{1}{5} \\ -\frac{1}{30} \\ -\frac{1}{10} \\ \frac{1}{15} \\ \frac{1}{10} \\ -\frac{7}{30} \end{pmatrix} \right\|_2 = \frac{\sqrt{3}}{5}.$$



H 27 (*Programmieraufgabe: Householder-Faktorisierung*)

Der radioaktive Zerfall einer Substanz, die aus zwei Isotopen besteht, lässt sich durch die Funktion

$$y(t, w_0, w_1) = w_0 \cdot \exp(-\lambda_0 \cdot t) + w_1 \cdot \exp(-\lambda_1 \cdot t)$$

beschreiben. Die Zerfallskonstanten seien

$$\lambda_0 = 0.8004419910164 \quad \text{und} \quad \lambda_1 = 0.52068619687912 \cdot 10^{-1}.$$

Gesucht sind die Konzentrationen w_0 und w_1 der beiden Isotope, die linear in die Zerfallskurve eingehen. Um diese zu ermitteln, werden zu $m = 25$ verschiedenen Zeitpunkten $t_i = i$, $i = 1, \ldots, m$, Messungen y_i der Zerfallskurve y durchgeführt:

$$(y_1, \ldots, y_m) = (15.51, 7.76, 4.24, 2.62, 1.85, 1.48, 1.28, 1.15, 1.07, 1.00, 0.95, 0.90,\\ 0.85, 0.81, 0.77, 0.73, 0.69, 0.65, 0.62, 0.59, 0.56, 0.53, 0.50, 0.48, 0.46).$$

Die gesuchten Konzentrationen $w := (w_0, w_1)^T$ werden nun mit Hilfe der Forderung, dass

$$F(w) := \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^{m} (y(t_i, w) - y_i)^2$$

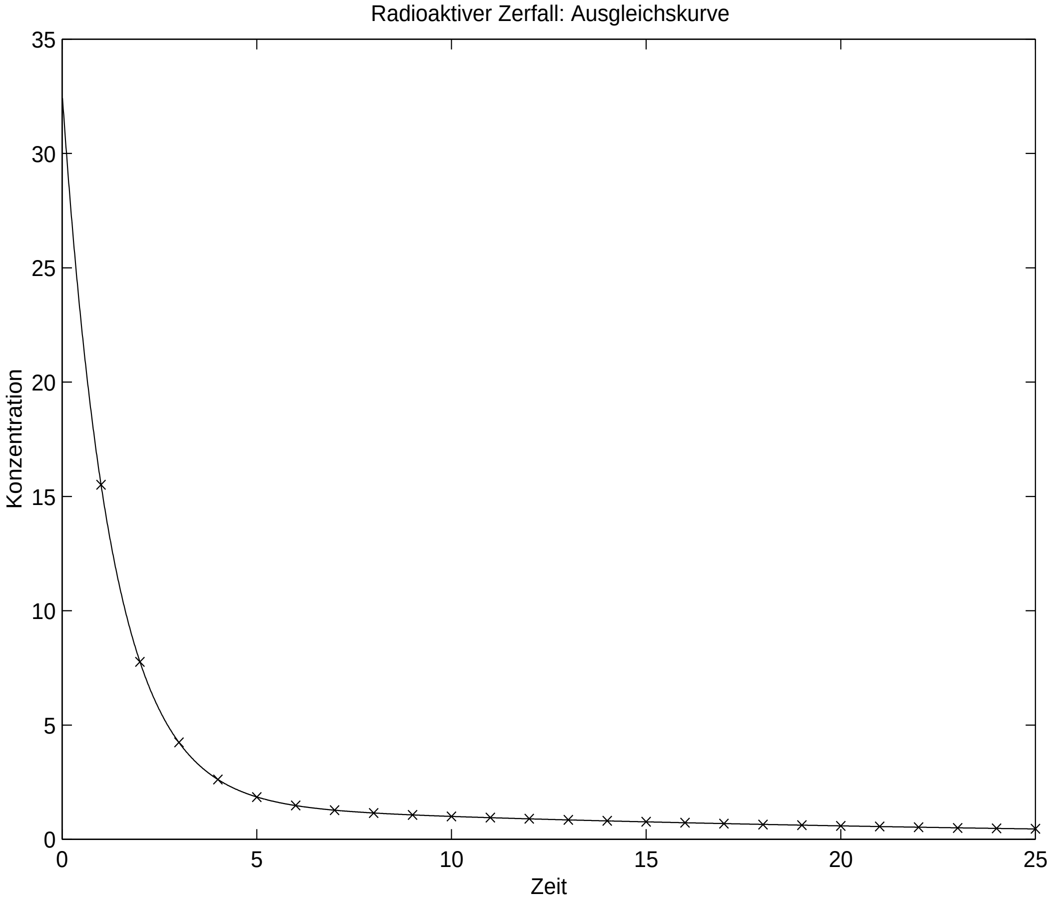
minimal wird, bestimmt.

Lösen Sie dieses lineare Ausgleichsproblem mit Hilfe einer Householder-Faktorisierung!
Mögliche Abgabe:

1. Lösung w_* des LAP und $F(w_*)$
2. Graphischer Ausdruck der Daten und der Ausgleichskurve in einem Diagramm
3. Programmquelltext

1. $w_* = (30.9991, 1.6723)$, $F(w_*) = 1.0616e - 04$.

2. Ausdruck:



3. Quelltext:

```
function[]=isotop_2

%Zerfallskonstanten

l(1)=0.8004419910164;
```

```
l(2)=0.52068619687912e-1;

%Bestimmung der Koeffizientenmatrix
%A ist 25x2 Matrix

m=25;
n=2;

for i=1:m
  for j=1:n
    A(i,j)=exp(-i*l(j));
  end
end

%Messdaten
b=[15.51,7.76,4.24,2.62,1.85,1.48,1.28,1.15,1.07,1.00,0.95,
0.90, 0.85,0.81,0.77,0.73,0.69,0.65,0.62,0.59,0.56,0.53,%
0.50,0.48,0.46]';

%-------------------------------------------------------------
%-------------------------------------------------------------
%Householder-Orthogonalisierung

C=A;
d=b;

for i=1:n

%Eliminationsfaktoren

   rho=-sign(C(i,i))*(C(i:m,i)'*C(i:m,i))^(1/2);
   v=C(i:m,i)-(rho*eye(m+1-i,1));
   gamma=0.5*v'*v;

%Bestimmung der Tranformationsmatrix fuer die Restmatrix

   Q=eye(m+1-i)-(1/gamma)*(v*v');

%Q1 ist mxm Matrix, veraendert aber nur die Restmatrix

   Q1=blkdiag(eye(i-1),Q);

%Elimination der i-ten Spalte in der Restmatrix
```

```
%und Transformation der restlichen Matrix

   C=Q1*C;

%Berechnung der neuen rechten Seite

   d=Q1'*d;

end

%---------------------------------------------------
%---------------------------------------------------
%Bilden von R und b_1

R=C(1:n,1:n);
b_1=d(1:n);


%Bestimmung von w

w=R\b_1

%Residuum

res=0.5*((A*w-b)'*(A*w-b))

%Daten fuer Plotten der Ausgleichskurve

for k=1:m*100
  for j=1:n
    F(k,j)=exp(-0.01*k*l(j));
  end
end

plot([1:1:25],b,'x',[0.01:0.01:25],F*w)

title('Radioaktiver Zerfall: Ausgleichskurve')
xlabel('Zeit')
ylabel('Konzentration')
```