Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen
Institut für Geometrie und Praktische Mathematik

Numerisches Rechnen — WS 2011/2012

Prof. Dr. M. Grepl — P. Esser, G. Welper, L. Zhang

Klausur Numerisches Rechnen (13.03.2012) (Musterlösung)

- Hilfsmittel: nur dokumentenechtes Schreibgerät (blau oder schwarz); genau ein Taschenrechner, der auf der Liste der erlaubten Taschenrechner steht; zwei beidseitig handbeschriebene Din-A4-Blätter
- kein eigenes Papier benutzen und nicht mit Blei-, Rot- oder Grünstift schreiben
- Bearbeitungszeit: 120 Minuten
- Deckblätter ausfüllen und unterschreiben
- Aufgabenblätter kontrollieren: insgesamt sechs Aufgaben
- jedes Blatt mit Namen und Matrikelnummer versehen
- Studenten- und Lichtbildausweis zur Kontrolle bereitlegen
- keine vorzeitige Abgabe während der letzten 15 Minuten

Zum Bestehen der Klausur sind 40 der insgesamt 80 erreichbaren Punkte erforderlich. Die Klausurergebnisse werden voraussichtlich ab Freitag, den 23. März 2012, auf der Webseite zur Veranstaltung bekanntgegeben. Die Klausureinsicht findet am Montag, den 26. März 2012, von 14:00 – 16:00 Uhr im Raum 149 Hauptgebäude statt. Danach sind keine Einsprüche gegen die Korrektur mehr möglich. Die Klausur kann nach einer Aufbewahrungsfrist von 5 Jahren innerhalb von 3 Wochen am Institut für Geometrie und Praktische Mathematik abgeholt werden.

Matrikelnummer: ____________________ Taschenrechner: ____________________

Name: ____________________________ Vorname: ____________________________

Hiermit erkläre ich, dass ich keine anderen als die erlaubten Hilfsmittel benutze. Ferner nehme ich zur Kenntnis, dass bei Täuschungsversuchen, auch solchen zugunsten anderer, die Klausur als *nicht bestanden* bewertet wird.

Datum: ____________________________ Unterschrift: ____________________________

Korrekturvermerke

A 1	A 2	A 3	A 4	A 5	A 6	$\sum$

Aufgabe 1
Es sei
$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & \beta \\ 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3}.$$

a) Bestimmen Sie die Cholesky-Zerlegung $A = LDL^T$. Geben Sie die Matrizen L und D explizit an.

b) Für welche $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ ist A positiv definit?

c) Berechnen Sie die Determinante von A.

d) Es sei nun
$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{6}{5} & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3}, \quad D = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{5}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3.$$

Lösen Sie das lineare Gleichungssystem $LDL^T x = b$.

7+1+1+5=14 Punkte

Musterlösung

a) Cholesky-Zerlegung

$$\begin{aligned} \text{1.Spalte:} \quad d_{11} &= a_{11} = 2 \\ l_{21} &= \frac{a_{21}}{d_{11}} = -\frac{1}{2} \\ l_{31} &= \frac{a_{31}}{d_{11}} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{2.Spalte:} \quad d_{22} &= a_{22} - l_{21}^2 d_{11} = 2 - \left(-\frac{1}{2}\right)^2 \cdot 2 = \frac{3}{2} \\ l_{32} &= \frac{a_{32} - l_{31} d_{11} l_{21}}{d_{22}} = \frac{\beta - 0}{\frac{3}{2}} = \frac{2\beta}{3} \end{aligned}$$

$$\text{3.Spalte:} \quad d_{33} = a_{33} - l_{31}^2 d_{11} - l_{32}^2 d_{22} = \alpha - 0 - \left(\frac{2\beta}{3}\right)^2 \cdot \frac{3}{2} = \alpha - \frac{2}{3}\beta^2$$

Somit ergibt sich dann also:
$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3}\beta & 1 \end{pmatrix}, \; D = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & 0 \\ 0 & d_{22} & 0 \\ 0 & 0 & d_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha - \frac{2}{3}\beta^2 \end{pmatrix}$$

b) A ist genau dann positiv definit, wenn alle Diagonalelemente von D positiv sind, d.h., genau dann wenn $\alpha > \frac{2}{3}\beta^2$ gilt.

c) $\det A = \det(LDL^T) = \det(D) = 2 \cdot \frac{3}{2} \cdot (\alpha - \frac{2}{3}\beta^2) = 3\alpha - 2\beta^2$

d) Gleichungssystem lösen

L (Vorwärtseinsetzen): $Ax = b \;\Leftrightarrow\; L\underbrace{DL^Tx}_{=:z} = b$. Also $Lz = b \;\Rightarrow\; z = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{5}{3} \\ 3 \end{pmatrix}$

D (Diagonale): $D\underbrace{L^Tx}_{=:y} = z$. Also $Dy = z \;\Rightarrow\; y = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}$

L^T (Rückwärtseinsetzen): $L^Tx = y \;\Rightarrow\; x = \begin{pmatrix} 5 \\ 7 \\ 5 \end{pmatrix}$

Aufgabe 2
Gegeben seien Meßwerte

i	1	2	3	4
t_i	0	1	2	4
$f(t_i)$	4	2.5	2.5	7

die zu dem Bildungsgesetz

$$f(t) := \frac{\alpha}{t+1} + \beta(t-1)^2 + t$$

gehören.

a) Formulieren Sie das lineare Ausgleichsproblem zur Bestimmung von α und β. Sie brauchen das Ausgleichsproblem nicht zu lösen.

b) Gegeben sei nun das lineare Ausgleichsproblem mit Matrix A und rechter Seite b gegeben durch

$$A := \begin{pmatrix} -4 & -8 \\ 0 & -2 \\ -3 & -6 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 2} \quad \text{und} \quad b := \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 10 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3.$$

Bestimmen Sie die Lösung $x \in \mathbb{R}^2$ des Ausgleichsproblems. Verwenden Sie dazu Givens-Rotationen. Wie groß ist die Norm des Residuums?

Hinweis: Die Anwendung der Normalgleichungen oder des Verfahrens von Householder ergibt 0 Punkte. Bei korrekter Rechnung wird nur eine Givens-Rotation benötigt.

c) Sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit vollem Rang und $m \geq n$. Für die Vektoren $b \in \mathbb{R}^m$ und $x \in \mathbb{R}^n$ sei das Residuum $Ax - b$ senkrecht zum Bildraum von A, d.h.

$$Ax - b \perp \text{Bild}(A).$$

Zeigen Sie: Der Vektor x löst die Normalgleichungen.

2+5+4=11 Punkte

Musterlösung

a) Das zugehörige lineare Ausgleichsproblem lautet: $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$, wobei

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{3} & 1 \\ \frac{1}{5} & 9 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times 2} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 1.5 \\ 0.5 \\ 3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^4. \quad \text{und} \quad x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2.$$

b) Bestimme die Givens-Rotation um a_{31} zu eliminieren.

$$r = \sqrt{(-4)^2 + (-3)^2} = \sqrt{16+9} = \sqrt{25} = 5$$

$$c = \frac{-4}{5}, \quad s = \frac{-3}{5}$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} -4 & -8 & 5 \\ 0 & -2 & 4 \\ -3 & -6 & 10 \end{array}\right) \underset{G_{31}\cdot}{\rightsquigarrow} \left(\begin{array}{cc|c} 5 & 10 & -10 \\ 0 & -2 & 4 \\ 0 & 0 & -5 \end{array}\right)$$

Löse das lineare Ausgleichsproblem durch Rückwärtseinsetzen:

$$\left.\begin{cases} -2x_2 &= 4 & \Leftrightarrow & x_2 &= -2 \\ 5x_1 &= -10 - 10(-2) = 10 & \Leftrightarrow & x_1 &= 2 \end{cases}\right\} \Leftarrow x = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Residuum:

$$||Ax - b||_2 = 5.$$

c) Es gilt:

$$\begin{aligned} Ax - b \perp \text{Bild}(A) &\Leftrightarrow w^T(Ax - b) = 0 \text{ für alle } w \in \text{Bild}(A) \\ &\Leftrightarrow (Ay)^T(Ax - b) = 0 \text{ für alle } y \in \mathbb{R}^n \\ &\Leftrightarrow y^T(A^TAx - A^Tb) = 0 \text{ für alle } y \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Mit der Wahl $y = A^TAx - A^Tb$ folgt $\|A^TAx - A^Tb\|_2^2 = 0$ und somit $A^TAx - A^Tb = 0 \Leftrightarrow A^TAx = A^Tb$. Also löst x die Normalgleichungen.

Aufgabe 3
Wir betrachten das Optimierungsproblem

$$x^* = \arg\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x)$$

wobei $x = (x_1, x_2)$ und $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ gegeben ist durch

$$f(x_1, x_2) = 1.5x_1^2 + 3x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1 - 2x_2 + 2.$$

a) Zeigen Sie, dass die Funktion als $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c$ geschrieben werden kann. Zeigen Sie, dass A symmetrisch positiv definit gewählt werden kann.

b) Bestimmen Sie das Minimum von f mit Hilfe der hinreichenden Bedingung 2. Ordnung.

c) Eine Abstiegsrichtung d^k ist dadurch definiert, daß

$$f(x^{k+1}) = f(x^k + \alpha^k d^k) < f(x^k), \quad k = 0, 1, \ldots$$

mit α^k positiv und hinreichend klein. Sei $\nabla f(x^k) \neq 0$ und $D \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ positiv definit. Zeigen Sie, daß

$$d^k = -D\nabla f(x^k)$$

eine Abstiegsrichtung ist.

Hinweis: Verwenden Sie die Taylorreihenentwicklung unter Vernachlässigung aller Terme vom Grad zwei und höher.

d) Gegeben sei nun der Startwert $x^0 = (0, 0)^T$. Führen Sie jeweils einen Schritt der folgenden beiden Verfahren zur Lösung des Optimierungsproblems aus:

(I) Steepest Descent (Verfahren des steilsten Abstiegs) mit Schrittweite $\alpha^k = \frac{\left(b-Ax^k\right)^T d^k}{(d^k)^T A\, d^k}$.

(II) Newton-Verfahrens mit Schrittweite $\alpha^k = 1$.

Vergleichen Sie die Lösungen der beiden Verfahren nach dem ersten Schritt. Hätten Sie dies erwartet? Begründen Sie Ihre Antwort.

3+2+4+4=13 Punkte

Musterlösung

a) Sei $A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$, dann gilt:

$$\begin{aligned}
f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c &= \frac{1}{2}(x_1, x_2)^T \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - (b_1, b_2)^T \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + c \\
&= \frac{1}{2}(x_1, x_2)^T \begin{pmatrix} a_1x_1 + a_2x_2 \\ a_3x_1 + a_4x_2 \end{pmatrix} - b_1x_1 - b_2x_2 + c \\
&= \frac{1}{2}(a_1x_1^2 + a_2x_1x_2 + a_3x_1x_2 + a_4x_2^2) - b_1x_1 - b_2x_2 + c
\end{aligned}$$

Der Koeffizientenvergleich mit $f(x) = 1.5x_1^2 + 3x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1 - 2x_2 + 2$ liefert: $b_1 = 4$, $b_2 = 2$, $c = 2$, $a_1 = 3$, $a_4 = 6$, $a_2 + a_3 = -4$. Wähle $a_2 = a_3 = -2$, dann ist A symmetrisch. Zusammenfassend ergibt sich

$$A = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 6 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}, \qquad c = 2,$$

mit A positiv definit [zu zeigen über quadratische Ergänzung oder Hauptminoren oder Diagonaldominanz (mit positiven Diagonaleinträgen)]

b) Es ist $\nabla f(x) = Ax - b$ und $\nabla^2 f(x) = A$. Bestimme x^* mit $\nabla f(x^*) = 0 \Leftrightarrow Ax^* = b$:

$$\begin{aligned} x^* = A^{-1}b &= \frac{1}{\det(A)} \begin{pmatrix} a_4 & -a_2 \\ -a_3 & a_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{3 \cdot 6 - (-2) \cdot (-2)} \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Damit erfüllt x^* das hinreichende Kriterium 2.Ordnung für eine Minimalstelle von f.

c) Aus der Taylorreihenentwicklung erster Ordnung mit $d^k = -D\nabla f(x^k)$ ergibt sich

$$\begin{aligned} f(x^{k+1}) &= f(x^k + \alpha^k d^k) \\ &= f(x^k) + \alpha^k (d^k)^T \nabla f(x^k) \\ &= f(x^k) - \alpha^k (\nabla f(x^k))^T D \nabla f(x^k) < f(x^k), \quad k = 0, 1, \dots, \end{aligned}$$

da α^k positiv und D positiv definit, d.h. $\alpha^k(\nabla f(x^k))^T D \nabla f(x^k) > 0$ für $\nabla f(x^k) \neq 0$.

d) (I) Die Iterationsvorschrift für Steepest Descent lautet: $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$, wobei $d_k = -\nabla f(x^k)$, $\alpha^k = \frac{\left(b - Ax^k\right)^T d^k}{(d^k)^T A \, d^k}$. Es ergibt sich somit:

$$x^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad d^0 = -\nabla f(x^0) = b - Ax^0 = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\alpha^0 = \frac{\left(b - Ax^0\right)^T d^0}{(d^0)^T A \, d^0} = \frac{(4,2) \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}}{(4,2) \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}} = \frac{20}{(4,2) \begin{pmatrix} 8 \\ 4 \end{pmatrix}} = \frac{1}{2}$$

Damit ist

$$x^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(II) Die Iterationsvorschrift für das Newton-Verfahren lautet

$$x^{k+1} = x^k - (\nabla^2 f(x^k))^{-1} \nabla f(x^k)$$

Konkret bedeutet das hier (vergleiche Aufgabenteil b)):

$$x^1 = x^0 - A^{-1}(Ax^0 - b) = x^0 - x^0 + A^{-1}b = A^{-1}b$$

$$= \frac{1}{14} \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Beide Lösungen sind gleich und identisch mit x^*. Für das Newton-Verfahren ist dies zu erwarten, da das Kostenfunktional quadratisch ist und das Newton-Verfahren daher in einem Schritt konvergiert.

Mit dem Verfahren des steilsten Abstiegs erreicht man das Optimum im Allgemeinen nicht in einem Schritt, d.h. die Lösung war nicht zu erwarten (in dem vorliegenden Fall konvergiert auch das Verfahren des steilsten Abstiegs in einem Schritt, da der Startwert x^0 auf einer der beiden Halbachsen des Paraboloids, genauer gesagt der Niveaulinien, liegt).

Aufgabe 4
Betrachten Sie die Funktion
$$f(x) = \sin(x) + \frac{x\cos(x)}{\pi}$$
und die Stützstellen $x_0 = 0$, $x_1 = \pi$ und $x_2 = \frac{3\pi}{2}$.

a) Bestimmen Sie das Interpolationspolynom $P(f|x_0, x_1, x_2)$ in Newton-Darstellung.

b) Werten Sie $P(f|x_0, x_1, x_2)$ mit dem Horner-Schema an der Stelle $x = \frac{4}{5}\pi$ aus.

c) Schätzen Sie den Interpolationsfehler $\max_{x\in[x_0,x_2]} |P(f|x_0, x_1, x_2)(x) - f(x)|$ möglichst genau ab.

Hinweise:

- Für $\omega(x) := x(x-\pi)(x-\frac{3\pi}{2})$ gilt $\max\limits_{x\in[x_0,x_2]} |w(x)| \approx 8.19 < \dfrac{41}{5}$.
- Es ist $f'''(x) = -\left(1+\frac{3}{\pi}\right)\cos(x) + \frac{x}{\pi}\sin(x)$.

7+2+3=12 Punkte

Musterlösung

a) Auswerten $f(x_0), f(x_1)$und$f(x_2)$:

$$\begin{aligned}
f(x_0) &= f(0) = \sin(0) + \frac{0\cdot\cos(0)}{\pi} = 0\\
f(x_1) &= f(\pi) = \sin(\pi) + \frac{\pi\cdot\cos(\pi)}{\pi} = 0 + (-1) = -1\\
f(x_2) &= f(\frac{3\pi}{2}) = \sin(\frac{3\pi}{2}) + \frac{\frac{3\pi}{2}\cdot\cos(\frac{3\pi}{2})}{\pi} = -1 + 0 = -1
\end{aligned}$$

Tableau der dividierten Differenzen:

x_i	$[x_i]f$	$[x_i, x_{i-1}]f$	$[x_i, x_{i-1}, x_{i-2}]f$
0	0	$-$	$-$
π	-1	$\frac{-1-0}{\pi-0} = -\frac{1}{\pi}$	$-$
$\frac{3}{2}\pi$	-1	$\frac{-1-(-1)}{\frac{3}{2}\pi-\pi} = 0$	$\frac{0-(-\frac{1}{\pi})}{\frac{3}{2}\pi-0} = \frac{2}{3\pi^2}$

Das Interpolationspolynom in Newton-Darstellung lautet

$$P(f|x_0, x_1, x_2)(x) = 0 - \frac{1}{\pi}(x-0) + \frac{2}{3\pi^2}(x-0)(x-\pi).$$

b) Hornerschema

$$P(f|x_0, x_1, x_2)(\frac{4}{5}\pi) = 0 + x\cdot\left[-\frac{1}{\pi} + (x-\pi)\cdot\left\{\frac{2}{3\pi^2}\right\}\right]\Bigg|_{x=\frac{4}{5}\pi}$$

$$
\begin{aligned}
&= 0 + \frac{4}{5}\pi \cdot \left[-\frac{1}{\pi} + (\frac{4}{5}\pi - \pi) \cdot \left\{ \frac{2}{3\pi^2} \right\} \right] \\
&= 0 + \frac{4}{5}\pi \cdot \left[-\frac{1}{\pi} - \frac{2}{15\pi} \right] \\
&= -\frac{68}{75} = -0.90667
\end{aligned}
$$

c) Schätze den Interpolationsfehler ab:

$$
\begin{aligned}
&f(x) = \sin(x) + \frac{x\cos(x)}{\pi} \\
&\Rightarrow f'(x) = \cos(x) + \frac{1}{\pi}(\cos(x) - x \cdot \sin(x)) = (1 + \frac{1}{\pi})\cos(x) - \frac{x}{\pi}\sin(x) \\
&\Rightarrow f''(x) = -(1 + \frac{1}{\pi})\sin(x) - \frac{1}{\pi}(\sin(x) + x \cdot \cos(x)) = (-1 - \frac{2}{\pi})\sin(x) - \frac{x}{\pi}\cos(x) \\
&\Rightarrow f'''(x) = (-1 - \frac{2}{\pi})\cos(x) - \frac{1}{\pi}(\cos(x) - x \cdot \sin(x)) = (-1 - \frac{3}{\pi})\cos(x) + \frac{x}{\pi}\sin(x)
\end{aligned}
$$

Damit gilt

$$
\begin{aligned}
|f'''(x)| &= \left|(-1 - \frac{3}{\pi})\cos(x) + \frac{x}{\pi}\sin(x)\right| = \left|1 + \frac{3}{\pi}\right| \underbrace{|\cos(x)|}_{\leq 1} + \frac{1}{\pi} \underbrace{|x|}_{\leq \frac{3}{2}\pi} \underbrace{|\sin(x)|}_{\leq 1} \\
&\leq 1 + \frac{3}{\pi} + \frac{3}{2} = \frac{3}{\pi} + \frac{5}{2}
\end{aligned}
$$

und folglich ist

$$
\max_{x \in [0, \frac{3}{2}\pi]} \frac{|f'''(x)|}{3!} = \frac{1}{2\pi} + \frac{5}{12}.
$$

Man erhält also die Abschätzung

$$
\begin{aligned}
\max_{x \in I} |P(f|x_0, x_1, x_2)(x) - f(x)| &\leq \underbrace{\max_{x \in I} |w(x)|}_{< \frac{41}{5}} \cdot \underbrace{\max_{x \in I} \frac{|f'''(x)|}{3!}}_{= \frac{1}{2\pi} + \frac{5}{12}} \\
&= \frac{41}{10\pi} + \frac{41}{12} \\
&= 4.72174
\end{aligned}
$$