

Übungen zur „Einführung in die Numerische Mathematik“

Übungsblatt 9 , Abgabe: 12.01.2007 , 8.00 Uhr

Aufgabe 31: (3 Punkte)

Sei A eine (n, n) -Matrix. Das Eigenwertproblem $Ax = \lambda x$ ist äquivalent zu dem nicht-linearen Gleichungssystem

$$Ax - \lambda x = 0, \quad \|x\|_2^2 - 1 = 0.$$

Stellen Sie das zugehörige Newton-Verfahren auf.

Aufgabe 32: (3+2 Punkte)

Sei A eine positiv definite Matrix. Dann gibt es genau eine positive definite Matrix X mit $X^2 = A$. Man schreibt $X = A^{1/2}$. Zur Berechnung von X löse man das Gleichungssystem $F(X) = 0$ mit $F(X) = X^2 - A$.

- (a) Zeigen Sie, dass das Newton-Verfahren für $F(X) = 0$ die Form

$$X_{k+1}X_k + X_kX_{k+1} = A + X_k^2$$

hat.

- (b) Berechnen Sie eine Approximation X_1 für $\begin{pmatrix} 1 & 0.5 \\ 0.5 & 1 \end{pmatrix}^{1/2}$ durch einen Schritt des Newton-Verfahrens mit der Startnäherung $X_0 = I$ und zeigen Sie, dass

$$\|X_1^2 - A\|_\infty \leq \frac{1}{16}.$$

Aufgabe 33: (Programmieraufgabe, Abgabe: 19.01.2007, 8 Punkte)

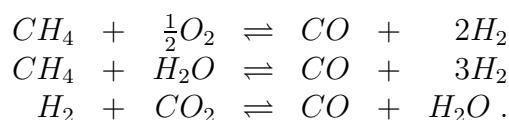
Programmieren Sie das n -dimensionale Newton-Verfahren zur Berechnung der Nullstelle \bar{x} einer C^2 -Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Lösen Sie die folgenden nicht-linearen Gleichungssysteme:

- (a) Für die komplexe Variable $z = x + iy \in \mathbb{C}$, $i^2 = -1$, $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, führt die komplexe Fixpunktgleichung $z = e^z$ auf die äquivalenten reellen Gleichungen

$$e^x \cos y - x = 0, \quad e^x \sin y - y = 0.$$

Startpunkt: $(x_0, y_0) = (1, 1)$. Finden Sie zwei weitere Lösungen.

- (b) Bei der Gewinnung von Wasserstoff aus Methan wird die Gleichgewichtslösung des folgenden chemischen Systems gesucht:



Dies führt auf das Gleichungssystem $f(x_1, \dots, x_7) = 0$ für die Konzentration $x \in \mathbb{R}^7$ mit

$$f(x_1, \dots, x_7) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}x_1 + x_2 + \frac{1}{2}x_3 - \frac{x_6}{x_7} \\ x_3 + x_4 + 2x_5 - \frac{2}{x_7} \\ x_1 + x_2 + x_5 - \frac{1}{x_7} \\ -28837x_1 - 139009x_2 - 78213x_3 + 18927x_4 \\ \quad + 8427x_5 + \frac{13492}{x_7} - 10690\frac{x_6}{x_7} \\ x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 - 1 \\ 400x_1x_4^3 - 1.7837 \cdot 10^5 x_3x_5 \\ x_1x_3 - 2.6058x_2x_4 \end{pmatrix}$$

Nehmen Sie die Startdaten: $x_1 = x_4 = x_6 = 0.5$, $x_2 = x_3 = x_5 = 0$, $x_7 = 2.0$.

(c) Das Minimum der *Rosenbrock*-Funktion

$$h(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2$$

ist offensichtlich der Punkt $(\bar{x}, \bar{y}) = (1, 1)$. Starten Sie die Newton-Iteration für die Gleichung $f(x, y) := \nabla h(x, y) = 0$ im Punkt $(x_0, y_0) = (-0.5, 0.5)$. Prüfen Sie die Hesse-Matrix von $h(x, y)$ auf Positiv-Definitheit.

Hinweise: Setzen Sie für alle Teilaufgaben das Abbruchkriterium $\|f(x)\|_2 \leq 10^{-10}$. Approximieren Sie die Jacobi-Matrix $f'(x^k) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^k) \right)_{1 \leq i, j \leq n}$ durch den zentralen Differenzenquotienten

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^k) \approx \frac{f_i(x^k + he_j) - f_i(x^k - he_j)}{2h}, \quad h > 0, \quad i, j = 1, \dots, n$$

mit der Schrittweite h und dem j -ten Einheitsvektor $e_j \in \mathbb{R}^n$. Beachten Sie ggf. dazu die Programmierhilfe.

Benutzen Sie das Gaußeliminationsverfahren aus Aufgabe 8 oder eine geeignete Matlab-Routine zur Lösung des linearen Gleichungssystems

$$f'(x^k)d^k = -f(x^k), \quad x^{k+1} = x^k + d^k.$$

Wir wünschen allen Teilnehmern ein

Frohes Weihnachtsfest

und einen guten Rutsch ins neue Jahr!