Prof. Dr. H. Maurer, Dipl. Math. Maike Schulte WS 06/07

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

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

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 $\overline{x}$ einer C^2-Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. 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

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

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

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

$$\begin{array}{rcccccc} CH_4 & + & \frac{1}{2}O_2 & \rightleftharpoons & CO & + & 2H_2 \\ CH_4 & + & H_2O & \rightleftharpoons & CO & + & 3H_2 \\ H_2 & + & CO_2 & \rightleftharpoons & CO & + & H_2O\,. \end{array}$$

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

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

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 $\|f(x)\|_2\le 10^{-10}$. Approximieren Sie die Jacobi–Matrix $f'(x^k)=\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^k)\right)_{1\le i,j\le n}$ durch den zentralen Differenzenquotienten

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

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

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

Wir wünschen allen Teilnehmern ein

Frohes Weihnachtsfest

und einen guten Rutsch ins neue Jahr!