Technische Universität Chemnitz
Fakultät für Mathematik
Professur Mathematik in Industrie und Technik

Sommersemester 2009
Prof. Dr. Peter Benner
Dipl.-Math. Jens Saak
Dipl.-Ing. Martin Bernauer

Numerische Mathematik– 8. Hausaufgabe

Abgabetermin: 3./4.6.2009
(in der jeweiligen Übungsgruppe)

Theoretische Aufgaben

Aufgabe 1 (2 Punkte) (QR mit Givens-Rotationen)

a) Zeigen Sie, wie mit Hilfe von Givens-Rotationen (siehe Übung 8) eine QR-Zerlegung einer gegebenen Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ berechnet werden kann. (Die Herleitung sollte konstruktiv sein, d.h. direkt als Algorithmus interpretierbar.)

b) Leiten Sie eine Abschätzung für den Aufwand dieses Verfahrens her. (*Hinweis:* Es reicht die Anzahl der Quadratwurzeln und der Multiplikationen getrennt zu zählen. Betrachten Sie insbesondere die beiden Fälle $m \gg n$ und $m \approx n$.)

Aufgabe 2 (3 Punkte) (Verallgemeinerte Inverse)

Sei $A \in \mathbb{R}^{m,n}$ mit $\operatorname{rang}(A) = p \leq n < m$.

a) Zeigen Sie, dass die *Moore-Penrose-Bedingungen*
   (i) $AX = (AX)^T$
   (ii) $XA = (XA)^T$
   (iii) $XAX = X$
   (iv) $AXA = A$

   genau eine Lösung $X \in \mathbb{R}^{n,m}$ zulassen.

b) Verifizieren Sie, dass die Matrix $A^+ := (A^T A)^{-1} A^T$ für $p = n$ die Moore-Penrose Bedingungen erfüllt.

c) Weisen Sie nach, dass im Fall $m = n = \operatorname{rang}(A)$ diese Matrix A^+ gerade die Inverse von A ist.

Aufgabe 3 (3 Punkte) (Lineare Ausgleichsprobleme)

Für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und einen Vektor $b \in \mathbb{R}^m$ betrachten wir das Ausgleichsproblem

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2.$$

a) Welche Situation tritt ein, wenn A quadratisch und invertierbar ist?

b) An den Stellen $x_1, x_2, \ldots, x_m \in \mathbb{R}$ seien die Werte $y_1, y_2, \ldots, y_m \in \mathbb{R}$ gegeben. Diese Punkte sollen durch eine Gerade approximiert werden, so dass die Summe der Fehlerquadrate minimiert wird. Formulieren Sie das entsprechende Ausgleichsproblem.

c) Das Arrhenius Gesetz

$$K_i = A \exp\left(-\frac{E}{RT_i}\right) \tag{1}$$

beschreibt in der Chemie den Zusammenhang zwischen Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten K_i und Messtemperaturen T_i. R ist eine allgemeine und bekannte Gaskonstante. Die beiden Parameter A und E müssen normalerweise aus Messungen bestimmt werden. Dies führt auf Grund der Nichtlinearität von (1) in E auf ein nichtlineares Ausgleichsproblem. Als Alternative dazu kann man aber auch (1) umformulieren, sodass am Ende wieder nur ein lineares Ausgleichsproblem zu lösen ist. Wie?

Programmieraufgaben

Aufgabe 1 (3 Punkte) (QR-Zerlegung mit Householder-Reflexionen)

Implementieren sie die QR-Zerlegung mittels Householder-Reflexionen in MATLAB ohne den Befehl `qr` zu verwenden. Ihre Funktion sollte eine Schnittstelle der Form

```
function [A, b] = qr_hh(A, b)
```

haben, wobei b ein Vektor mit geeigneten Dimensionen ist, der im Laufe der Rechnung ebenfalls transformiert werden soll, so dass b am Ende das Produkt $Q^\top b$ enthält. A soll am Ende die Matrix R sowie die Householder-Vektoren enthalten. Achten Sie bei der Programmierung insbesondere auf eine effiziente Umsetzung: Speichern Sie nie die Transformationsmatrizen explizit ab. Zur Berechnung der Householder-Vektoren verwenden Sie die Vorschrift (siehe VL)

$$\begin{aligned}
v &:= x \\
\mu &:= \sqrt{x^\top x} \\
\gamma &:= x_1 + \operatorname{sign}(x_1)\,\mu \\
v_1 &:= \gamma \\
v &:= \frac{1}{\gamma}\,v
\end{aligned}$$

Laden Sie zum Testen des Programms den Datensatz `ha08p1.mat` von der Homepage der VL herunter und lösen Sie das LLS-Problem für das Modell

$$y = a_1\,x_1 + a_2\,x_2 + a_3\,x_3^2.$$

Zusatz **2 Punkte**

Modifizieren Sie ihr Programm dahingehend, dass auch die Matrix Q berechnet wird, falls nur ein Eingabeparameter (also nur die Matrix) A übergeben wird. Testen Sie das Programm mit den Matrizen aus Hausaufgabe 4, Programmieraufgabe 1, und vergleichen Sie die Ergebnisse wieder mit der in MATLAB vorimplementierten QR-Zerlegung.

Aufgabe 2 (3 Punkte) (Lösen von LLS)

Laden Sie sich von der Homepage der VL den Datensatz `ha08p2.mat` herunter. Dieser enthält äquidistante Werte $t_1, t_2, \dots, t_n$ an denen die Messdaten $y(t_1), \dots, y(t_n)$ aufgenommen wurden.

a) Approximieren Sie die Daten im Sinne der kleinsten Quadrate durch eine Gerade $y(t) = \beta_1 + \beta_2 t$ und stellen Sie das Ergebnis grafisch dar: Plotten Sie die Daten (z.B. mit `plot` und dem Marker `'o'`) und die berechnete lineare Approximation als Gerade. Zeichnen Sie in einem zweiten Plot die Residuen $y_k - y(t_k)$. Sie sollten beobachten, dass das Residuum bei einem Datenpunkt viel größer ist als bei den übrigen. Das ist wahrscheinlich ein Ausreißer.

b) Eliminieren Sie den Ausreißer und führen Sie eine lineare Approximation wie in a) noch mal durch. Fügen Sie die nun erhaltene lineare Approximation als Gerade in den ersten der beiden Plots aus a) ein. Plotten Sie die Residuen erneut (in einem neuen Plot). Lässt sich dabei ein Muster erkennen?

c) Approximieren Sie die Daten (ohne den Ausreißer) diesmal durch ein Modell der Form

$$y(t) = \beta_1 + \beta_2 t + \beta_3 \sin(t).$$

Plotten Sie dieses Modell auf dem Intervall $[0, 26]$. Verwenden Sie dabei ein feines Gitter für t und den Linienstil '-'. Stellen Sie in diesem Plot auch die Daten (mit dem Marker 'o') und den Ausreißer (mit dem Marker '*') dar.

Zum Lösen der Ausgleichsprobleme verwenden Sie entweder die QR-Zerlegung aus der ersten Programmieraufgabe oder den MATLAB-Befehl `qr`. Die Lösung dieser Aufgabe sollte als **ein** MATLAB-Skript zusammengefaßt werden. Beschriften Sie die Plots mit Titeln und erstellen Sie auch eine Legende für die erste und die letzte Grafik.