Aufgabe 1 (11 Punkte)

Gegeben sei das lineare Gleichungssystem $A\,x = b$ mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & -6 & 0 \\ 4 & 0 & 12 & 0 & 12 \\ 0 & -6 & 0 & 10 & 0 \\ 1 & 0 & 12 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad b = \begin{pmatrix} 33 \\ -4 \\ 124 \\ 28 \\ 65 \end{pmatrix}.$$

a) Berechnen Sie die Cholesky–Zerlegung (LDL^T–Zerlegung) von A und geben Sie L und D explizit an.

b) Warum ist A nicht (symmetrisch) positiv definit?

c) Warum ist die in a) berechnete Zerlegung durchführbar, obwohl A nicht (symmetrisch) positiv definit ist? Welche Probleme **können** bei nicht (symmetrisch) positiv definiten Matrizen gegebenenfalls auftreten?

d) Berechnen Sie die Determinante von A.

e) Lösen Sie das lineare Gleichungssystem $A\,x = b$ mit Hilfe der in a) berechneten Zerlegung.

Teil a) Die Berechnung der k–ten Spalte erfolgt mit Hilfe der Formeln (siehe Skript S. 54)

$$\begin{aligned} d_{k,k} &= a_{k,k} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{k,j}^2\, d_{j,j}, \\ l_{i,k} &= \left(a_{i,k} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{i,j}\, d_{j,j}\, l_{k,j} \right) / d_{k,k}, \qquad i = k+1, \ldots, n. \end{aligned}$$

Das lineare Gleichungssystem $A\,x = b$ läßt sich entkoppeln in zwei Teile, wobei der erste Teil aus den Elementen mit ungeraden Zeilen– und Spaltenindizes und der zweite Teil aus den Elementen mit geraden Zeilen– und Spaltenindizes besteht. Daher kann man sich leicht überlegen, daß die Matrix L nur dort nichtverschwindende Elemente $l_{i,k}$ haben kann, für die $a_{i,k} \neq 0$ gilt. Das sind genau die Elemente $l_{i,k}$, für die $i+k$ eine gerade Zahl ergibt. Also „dünnen" sich die obigen Formeln für die k–te Spalte wie folgt aus:

$$\begin{aligned} d_{k,k} &= a_{k,k} - \sum_{\substack{j=1 \\ k+j \text{ gerade}}}^{k-1} l_{k,j}^2\, d_{j,j}, \\ l_{i,k} &= \left(a_{i,k} - \sum_{\substack{j=1 \\ k+j \text{ gerade}}}^{k-1} l_{i,j}\, d_{j,j}\, l_{k,j} \right) / \, d_{k,k}, \qquad i = k+1, \ldots, n \text{ für gerades } i+k. \end{aligned}$$

Daher sind statt zehn Berechnungen nur vier für L erforderlich, die gegenüber der originalen Version noch reduziert sind.

In folgender Reihenfolge erhalten wir damit die einzelnen nichtverschwindenden Einträge von L und D:

$$\begin{aligned} d_{1,1} &= 1, \\ l_{3,1} &= \frac{4}{1} = 4, \\ l_{5,1} &= \frac{1}{1} = 1, \\[1em] d_{2,2} &= 2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
l_{4,2} &= \frac{-6}{2} \;=\; -3, \\[2ex]
d_{3,3} &= 12 - 4^2 \cdot 1 \;=\; -4, \\
l_{5,3} &= \frac{1}{-4}\,(12 - 1 \cdot 1 \cdot 4) \;=\; -2, \\[2ex]
d_{4,4} &= 10 - (-3)^2 \cdot 2 \;=\; -8, \\[2ex]
d_{5,5} &= 1 - 1^2 \cdot 1 - (-2)^2 \cdot (-4) \;=\; 16.
\end{aligned}$$

Das ergibt die Matrizen

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 4 & 0 & 1 & & \\ 0 & -3 & 0 & 1 & \\ 1 & 0 & -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad D = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 2 & & & \\ & & -4 & & \\ & & & -8 & \\ & & & & 16 \end{pmatrix}.$$

Teil b) Nach Satz 3.5.3 des Skriptes (S. 52) ist eine symmetrische Matrix genau dann positiv definit, wenn $d_{i,i} > 0$ gilt für $i = 1, \ldots, n$ für die Matrix D der Cholesky–Zerlegung. Hier gilt jedoch

$$d_{3,3} = -4 < 0, \qquad d_{4,4} = -8 < 0,$$

damit ist A nicht positiv definit.

Teil c) Zur reinen Durchführbarkeit des Algorithmus' der Cholesky–Zerlegung ist nur erforderlich, daß

$$d_{i,i} \neq 0, \qquad i = 1, \ldots, n-1,$$

erfüllt ist, was für A gilt.

Im Fall, daß für mindestens einen Eintrag $d_{j,j} < 0$ gilt, können jedoch möglicherweise Stabilitätsprobleme auftreten (müssen aber nicht).

Teil d) Es gilt

$$\det(A) = \det(L\,D\,L^T) = \det(L) \cdot \det(D) \cdot \det(L^T) = 1 \cdot \det(D) \cdot 1 = d_{1,1} \cdot d_{2,2} \cdot d_{3,3} \cdot d_{4,4} \cdot d_{5,5} = 1024.$$

Teil e) Die Lösung des Gleichungssystems $A\,x = b$ ist äquivalent zur Lösung der Sequenz $L\,z = b$ (mittels Vorwärtseinsetzen), $D\,y = z$, $L^T\,x = y$ (mittels Rückwärtseinsetzen). Es ergeben sich in dieser Reihenfolge

$$\begin{aligned}
z^T &= (33,\ -4,\ -8,\ 16,\ 16)^T, \\
y^T &= (33,\ -2,\ 2,\ -2,\ 1)^T, \\
x^T &= (16,\ -8,\ 4,\ -2,\ 1)^T.
\end{aligned}$$

Aufgabe 2 (10 Punkte)

Gegeben sind die vier Meßwerte

$$\begin{array}{c|cccc} x_i & -1.6 & -0.9 & 0.75 & 2.7 \\ \hline y_i & 1.6 & -0.9 & 1.0 & -1.0 \end{array},$$

die der Theorie nach zu einer Ellipse der Form

$$\alpha\, x^2 + \beta\, x\, y + \gamma\, y^2 - 10 = 0$$

gehören.

a) Stellen Sie das zugehörige lineare Ausgleichsproblem $\|A\,x - b\|_2 \to \min$ auf. Geben Sie A und b explizit an.

b) Die Behandlung obigen Ausgleichsproblems $(A|b)$ für vier Meßwerte führt bei der Lösung mittels orthogonaler Transformationen auf ein oberes Dreieckssystem $(R|Q\,b)$.
Nun erhaltene Sie eine weitere Meßung (x_5, y_5). Das dazu gehörige lineare Ausgleichsproblem unter Verwendung von $(R|Q\,b)$ sei dann

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -7.8 & 3.2 & -1.9 & -14 \\ 0 & -2.2 & 0.74 & -4.4 \\ 0 & 0 & -2.2 & -13 \\ 0 & 0 & 0 & -0.26 \\ 5.85 & -2.4 & 0.98 & 10 \end{array}\right).$$

Lösen Sie dieses (Givens-Rotationen) und geben Sie $\alpha\,, \beta$ und γ sowie das Residuum explizit an.

---

a) Für das lineare Ausgleichsproblem $\|A\,x - b\|_2 \to \min$ ist eine Zeile gegeben als $(x_i^2 \quad x_i y_i \quad y_i^2 \mid 10)$, also

$$A = \begin{pmatrix} 2.56 & -2.56 & 2.56 \\ 0.81 & 0.81 & 0.81 \\ 0.5625 & 0.750 & 1.00 \\ 7.29 & -2.70 & 1.00 \end{pmatrix} \quad , \quad b = \begin{pmatrix} 10 \\ 10 \\ 10 \\ 10 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}.$$

b) (Wir benutzen die Variante aus dem neueren Skript: $r = \sqrt{a^2 + b^2}$, $c = \dfrac{a}{r}$ und $s = \dfrac{b}{r}$.)

Eliminiere a_{51} : $r = 9.75 \to c = -0.8$ und $s = 0.6$

$$\to \left(\begin{array}{ccc|c} 9.75 & -4 & 2.108 & 17.2 \\ 0 & -2.2 & 0\,.74 & -4.4 \\ 0 & 0 & -2.2 & -13 \\ 0 & 0 & 0 & -0.26 \\ 0 & 0 & 0.356 & 0.4 \end{array}\right)$$

Eliminiere a_{53} : $r = 2.228618 \to c = -0.987159$ und $s = 0.15974$

$$\to \left(\begin{array}{ccc|c} 9.75 & -4 & 2.108 & 17.2 \\ 0 & -2.2 & 0.74 & -4.4 \\ 0 & 0 & 2.228618 & 12.896964 \\ 0 & 0 & 0 & -0.26 \\ 0 & 0 & 0 & 1.68176 \end{array}\right)$$

Rückwärtseinsetzen ergibt dann $x = (2.1320, 3.9465, 5.7870)^T$, also erhalten wir für die Ellipse

$$2.1320\, x^2 + 3.9465\, x\, y + 5.7870\, y^2 - 10 = 0.$$

Das Residuum ist $r = 1.7017$.

Aufgabe 3 (9 Punkte)

Zur Bestimmung des Integerals $I = \int_a^b f(x)\,dx$ sei folgende Quadraturformel mit 2 Stützstellen gegeben ($H = b - a$):

$$I \approx I_2(f) = \frac{H}{2}\left[f\left(a + \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right) H\right) + f\left(a + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right) H\right)\right]. \tag{1}$$

Der Fehler dieser Formel ist gegeben durch

$$E_2(f) = I - I_2(f) = \frac{H^5}{4320} f^{(4)}(z), \qquad z \in (a, b). \tag{2}$$

a) Leiten Sie für die Quadraturformel (1) die summierte Formel für n Teilintervalle mit der Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ her und geben Sie für diese eine Fehlerabschätzung unter Benutzung von (2) an.

b) Wenden Sie die summierte Formel aus a) an auf das Integral

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x}\,dx \qquad (= \ln 2)$$

mit $n = 2$ und schätzen Sie den Fehler ab.

c) Wieviel Teilintervalle sind erforderlich, um mit der in a) aufgestellten Formel das Integral bis auf einen Fehler von $\varepsilon = 0.5 \cdot 10^{-6}$ zu bestimmen?

Teil a) Auf jedem Teilintervall $[x_i, x_{i+1}]$ mit $x_i = a + i\,h$, $h = \frac{b-a}{n}$, lautet die Quadraturformel (1)

$$\frac{h}{2}\left[f\left(x_i + \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right) h\right) + f\left(x_i + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right) h\right)\right] = \frac{h}{2}\left[f(s_i) + f(t_i)\right],$$

wobei

$$s_i := a + \left(i + \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right) h, \qquad t_i := a + \left(i + \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right) h.$$

Damit ergibt sich aufsummiert für alle Intervalle $i = 0, 1, \ldots, n-1$

$$I_2^{sum}(f) = I_2^{sum}(f, h, n) = \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}(f(s_i) + f(t_i)). \tag{3}$$

Für den Fehler gilt auf jedem Teilintervall $[x_i, x_{i+1}]$

$$\frac{h^5}{4320} f^{(4)}(z_i), \qquad z_i \in (x_i, x_{i+1}),$$

also aufsummiert

$$E_2^{sum}(f) = E_2^{sum}(f, h, n) = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h^5}{4320} f^{(4)}(z_i) = \frac{h^5}{4320}\sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(z_i).$$

Wir schätzen die 4. Ableitung jeweils gegen das auf $[a, b]$ globale Maximum $M_4 := \max_{z\in[a,b]} |f^{(4)}(z)|$ ab und erhalten

$$|E_2^{sum}(f)| \le \frac{h^5}{4320} \cdot n \cdot M_4 = \frac{b-a}{4320} \cdot h^4 \cdot M_4 = \frac{(b-a)^5}{4320} \cdot \frac{1}{n^4} \cdot M_4. \tag{4}$$

Teil b) Für das angegebene Integral wählen wir die Parameter

$$f(x) = \frac{1}{1+x}, \qquad a = 0, \qquad b = 1, \qquad n = 2, \qquad h = \frac{b-a}{n} = \frac{1}{2}.$$

Das ergibt die Stützstellen $x_0 = a = 0,\ x_1 = a + 1 \cdot h = 0.5,\ x_2 = a + 2 \cdot h = b = 1$ sowie die in (3) benötigten Zwischenstellen

$$s_0 = 0.10566, \qquad t_0 = 0.39434, \qquad s_1 = 0.60566, \qquad t_1 = 0.89434$$

mit den Funktionswerten

$$f(s_0) = 0.90444, \qquad f(t_0) = 0.71719, \qquad f(s_1) = 0.62280, \qquad f(t_1) = 0.52789.$$

Eingesetzt in (3) ergibt sich

$$I_2^{sum}(f) = I_2^{sum}(f, h, n) = I_2^{sum}(f, 0.5, 2) = \frac{h}{2}\left(f(s_0) + f(t_0) + f(s_1) + f(t_1)\right) = 0.69308.$$

Für die Fehlerabschätzung berechnen wir die Ableitungen von f:

$$f'(x) = \frac{-1}{(1+x)^2}, \qquad f''(x) = \frac{2}{(1+x)^3}, \qquad f'''(x) = \frac{-6}{(1+x)^4}, \qquad f^{(4)}(x) = \frac{24}{(1+x)^5}.$$

Die 4. Ableitung ist auf $[0, 1]$ positiv und streng monoton fallend; ihr Betrag nimmt daher ihr Maximum am linken Intervallrand an, also

$$M_4 = f^{(4)}(0) = 24.$$

Eingesetzt in (4) ergibt sich daher

$$|E_2^{sum}(f)| \leq \frac{b-a}{4320} \cdot h^4 \cdot M_4 = 0.348 \cdot 10^{-3}.$$

Das Ergebnis ist damit auf 3 Stellen genau.

Teil c) Für den Fehler gilt gemäß (4)

$$|E_2^{sum}(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{4320} \cdot \frac{1}{n^4} \cdot M_4 \overset{!}{\leq} \varepsilon = 0.5 \cdot 10^{-6}.$$

Aufgelöst nach n ergibt sich

$$n \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5\, M_4}{4320\, \varepsilon}} = 10.2\ldots,$$

also aufgerundet

$$n \geq 11.$$

Aufgabe 4 (10 Punkte)
Gegeben ist die Anfangswertaufgabe

$$y''(t) + 2\,y'(t) + \sin(t)\,y(t) = 0 \quad \text{mit} \quad y(0.4) = y'(0.4) = 1.$$

Bestimmen Sie mit dem verbesserten Euler-Verfahren eine Näherung für $y'(1)$. Wählen Sie h dazu so, daß Sie 3 Schritte benötigen.

Zunächst ist $y''(t) = -2\,y'(t) - \sin(t) = f(t, y(t), y'(t))$. Die Substitution $y = y_1$, $y' = y_2$ führt auf das System (wir nutzen für das explizite Verfahren die Linearität nicht aus)

$$\boldsymbol{y}' = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} y_2 \\ f(t, y_1, y_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ -2y_2 - \sin(t)y_1 \end{pmatrix} \quad , \quad \boldsymbol{y}_0 = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}_0 = \begin{pmatrix} y_1(0.4) \\ y_2(0.4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Das verbesserte Eulerverfahren lautet

$$\begin{aligned} \boldsymbol{k}_1 &= f(t_i, \boldsymbol{y}_i) \\ \Big(\ \boldsymbol{y}_{i+1/2} &= \boldsymbol{y}_i + \tfrac{h}{2}\boldsymbol{k}_1\ \Big) \\ \boldsymbol{k}_2 &= f(t_i + \tfrac{h}{2}, \boldsymbol{y}_i + \tfrac{h}{2}\boldsymbol{k}_1) \\ \boldsymbol{y}_{i+1} &= \boldsymbol{y}_i + h\,\boldsymbol{k}_2 \end{aligned}$$

Wir starten mit $t_0 = 0.4$. Bei drei Schritten ergibt sich $h = 0.2$, um von 0.4 bis 1 zu kommen.
Die Berechnung ergibt die folgenden Werte:

i	t_i	$\boldsymbol{k}_1$	$\boldsymbol{y}_{i+1/2}$	$\boldsymbol{k}_2$	$\boldsymbol{y}_{i+1}$
0	0.4	$\begin{pmatrix} 1.0 \\ -2.3894 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.1 \\ 0.76106 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.76106 \\ -2.0495 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.1522 \\ 0.59010 \end{pmatrix}$
1	0.6	$\begin{pmatrix} 0.59010 \\ -1.8308 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.2112 \\ 0.40702 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.40702 \\ -1.5943 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.2336 \\ 0.27124 \end{pmatrix}$
2	0.8	$\begin{pmatrix} 0.27124 \\ -1.4274 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.2607 \\ 0.12849 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.12849 \\ -1.2446 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.2593 \\ 0.022324 \end{pmatrix}$

Als gesuchtes Resultat erhalten wir $y'(1) \approx y_{3,2} = 0.022324$.