Universität Tübingen
Mathematisches Institut
Prof. Dr. Andreas Prohl Tübingen, den 19.05.2008

3. Übungsblatt zur Numerischen Mathematik für Bioinformatiker

Aufgabe 7:

Gegeben seien n Punktepaare $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$, $1 \le i \le n$. Die x_i seien paarweise verschieden. Gesucht ist die Gerade $y = mx + c$, für die $\left(\sum_{i=1}^n (y_i - (mx_i + c))^2\right)^{\frac{1}{2}}$ minimal wird.
Beweisen Sie, dass diese Gerade existiert und eindeutig bestimmt ist, und dass die Koeffizienten m und c das folgende (Normal-) Gleichungssystem erfüllen:

$$\begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{pmatrix}.$$

Bestimmen Sie die Werte von m und c zu den Messdaten

x_i	-3	0	1	4
y_i	-5	3	-3	3

.

Aufgabe 8:

Bestimmen Sie mit Hilfe des Householder-Algorithmus eine QR-Zerlegung der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -3 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Minimieren Sie nun mit Hilfe dieser QR-Zerlegung (ohne Verwendung des Normalgleichungssystems) $\|Ax - b\|_2$, wobei $b^T = (-5, 3, -3, 3)$.

Aufgabe 9:

Betrachten Sie das Gleichungssystem $Ax = b$ der Form

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & -4 \\ 3 & 9 & -2 \\ 4 & 12 & -6 \\ 2 & 6 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

(1) Ist das System lösbar (Begründung)?
(2) Bestimmen Sie eine Lösung nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate.
(3) Ist diese Lösung eindeutig?
(4) Ist die Matrix $A^T A$ positiv definit?

Aufgabe 10:

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit. Zeigen Sie mittels der Eindeutigkeit der LR-Zerlegung, dass die Matrix A eine sogenannte *Cholesky-Zerlegung*

$$A = LDL^T = CC^T$$

besitzt, wobei L eine untere Dreiecksmatrix mit $l_{ii} = 1$, D eine Diagonalmatrix mit $d_{ii} > 0$ und $C = L\tilde{D}$ ($\tilde{d}_{ij} \ge 0$, $\tilde{D}^2 = D$) ist.

Zeigen Sie, dass zur Berechnung der Matrix C mittels des Algorithmus von Cholesky $\frac{n^3}{6} + \mathcal{O}(n^2)$ Operationen benötigt werden. (Algorithmus: siehe Programmieraufgabe 6).

Bitte wenden

Programmieraufgabe 5 :

Schreiben Sie ein Unterprogramm, das die QR-Zerlegung einer Matrix A mit m Zeilen und n Spalten ($m \geq n$) berechnet (ohne Spaltentausch). Geben Sie eine Fehlermeldung aus, wenn der Algorithmus vorzeitig wegen Rang$(A) < n$ abbricht. Schreiben Sie außerdem ein Unterprogramm, welches die Lösung des linearen Ausgleichsproblems $||Ax - b||_2 = \min!$ liefert, falls A maximalen Rang hat.

Verwenden Sie diese Unterprogramme, um die Parabel $c_1 + c_2 x + c_3 x^2$ zu bestimmen, die im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate am besten die Werte

x_i	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y_i	0.10	0.15	0.23	0.58	0.45	0.60

approximiert.

Programmieraufgabe 6 :

Der sogenannte *Algorithmus von Cholesky* (siehe auch Aufgabe 10) zur Berechnung der Zerlegungsmatrix $C = (c_{ij})_{1 \leq i,j \leq n}$ geht direkt von der Beziehung $A = CC^T$ aus, die man als ein System von $n(n+1)/2$ Gleichungen für die Größen c_{ij}, $j \leq i$, auffassen kann. Ausmultiplizieren von

$$\begin{pmatrix} c_{11} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ c_{n1} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & \cdots & c_{n1} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & c_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

liefert die Bedingungsgleichungen

$$\sum_{k=1}^{j} c_{ik} c_{jk} = a_{ij}, \quad 1 \leq j \leq i \leq n.$$

Daraus ergibt sich folgendes Schema: Berechne zuerst

$$c_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad c_{i1} = \frac{a_{i1}}{\sqrt{a_{11}}}, \quad 2 \leq i \leq n.$$

Dann die nächsten Spalten von C $(2 \leq j \leq n)$ gemäß

$$c_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} c_{jk}^2 \right)^{1/2}, \quad c_{ij} = c_{jj}^{-1} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} c_{ik} c_{jk} \right), \quad j+1 \leq i \leq n.$$

---

(1) Schreiben Sie ein Unterprogramm, das die Cholesky-Zerlegung durchführt.
(2) Berechnen Sie damit, wenn möglich, die Cholesky-Zerlegung der Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & 29 & -1 \\ -3 & -1 & 19 \end{pmatrix}, \quad N = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

sowie der Bandmatrix

$$C = \begin{pmatrix} B & -I & & \\ -I & B & -I & \\ & -I & B & -I \\ & & -I & B \end{pmatrix}, \text{mit} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \text{und} \quad B = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & \\ & -1 & 4 & -1 \\ & & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

(3) Berechnen Sie, wenn möglich, für diese Matrizen auch die LR- und QR-Zerlegung. Vergleichen Sie die Ergebnisse.

Besprechung der Aufgaben in den Übungen am 02.06.2008.