Universität Marburg **Sommersemester 2017**
Fachbereich Mathematik u. Informatik
Prof. S. Dahlke, Prof. T. Surowiec

Praktikum zur Numerik und Optimierung

Aufgabe 1 (Glättungs-Spline): Bei der Approximation von Meßwerten $(x_i, y_i),\ i = 0, \ldots, n$, mit $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ durch Funktionen will man meist neben einer guten Approximation der Daten auch einen glatten Verlauf dieser Funktion haben. Beide Forderungen kann man dadurch berücksichtigen, dass man mit einem festen Parameter $\omega \in (0, 1)$ das gewichtete Funktional

$$J(f) := \omega \sum_{j=0}^{n} \Big(f(x_i) - y_i\Big)^2 + (1-\omega) \int_a^b \Big[f^{(m)}(t)\Big]^2 \, dt$$

in $C^m[a, b]$ minimiert. Im Fall $m = 2$ ist jede Minimalstelle von J tatsächlich ein natürlicher kubischer Spline mit den Knoten $x_i,\ i = 0, \ldots, n$. Mit einer Basisdarstellung

$$s(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j B_j(x),$$

des Minimalsplines durch B-Splines, erhält das Funktional J die Form $J(g) = \omega\|y - Wa\|^2 + (1-\omega)a^T Ga$ mit den Vektoren $y = (y_0, \ldots, y_n)^T,\ a = (a_0, \ldots, a_n)^T$ und das Minimum ist Lösung des Gleichungssystems

$$\Big(\omega W^T W + (1-\omega)G\Big)\, a = \omega W^T y.$$

Die Matrix hier ist symmetrisch positiv definit und besitzt Bandstruktur mit 7 Diagonalen, die Lösung kann daher mit einer Band-Cholesky-Zerlegung berechnet werden.

Testen Sie die Approximation mit den Tages-Maximaltemperaturen der HLUG-Wettermeßstation Marburg für die Monate Juni bis August letzten Jahres. Variieren Sie dabei das Gewicht $\omega \in (0, 1]$ und stellen Sie den Interpolationsfehler $\sum_{j=0}^{n} \Big(f(x_i) - y_i\Big)^2$ als Funktion von ω dar.

Literatur: Carl deBoor, A practical guide to splines, Kap. XIV

Aufgabe 2 (Nichtlineare Regression): Bei Messungen realer Phänomene können Modell-Ungenauigkeiten oder Meßfehler dazu führen, dass die Interpolationsbedingungen für ein nichtlineares Modell der Form

$$y(t) = x_1 + x_2 e^{x_3 t} + x_4 e^{x_5 t}, \quad t \in \mathbb{R},$$

(mit $x_3, x_5 < 0$) nicht exakt erfüllt werden können. Dies gleicht man durch eine erhöhte Anzahl von Messungen aus. Dadurch bekommt man ein überbestimmtes *nichtlineares* Gleichungssystem $F(x) = 0$ mit $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ mit $m > n$ ist. Da aber, wie gesagt, die Bedingung $F(x) = 0$ i.d.R. nicht erfüllbar ist, betrachtet man die Kleinste-Quadrate-Lösung $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$, für die

$$\|F(\hat{x})\|_2^2 = min_x \|F(x)\|_2^2$$

gilt. Zur Lösung verwendet man das *Gauß-Newton-Verfahren*, eine Kombination von Newton-Iteration und linearer Ausgleichsrechnung (vgl. Literatur). Bestimmen Sie damit die Koeffizienten des obigen Modells zu den Daten

t_i	0	0.5	1.0	1.5	2.0	3.0	5.0	8.0	10.0
y_i	3.85	2.95	2.63	2.33	2.24	2.05	1.82	1.80	1.75

Startwert für die Iteration sein $x^{(0)} = (1.75, 1.20, -0.5, 0.8, -2)$. Zeichnen Sie die Meßdaten in einem Diagramm zusammen mit der gefunden Funktion $y(t)$.

Literatur: Deuflhard/Hohmann, Numerische Mathematik, §4.3.