

## 6. Übungsblatt zur Numerik I

**Abgabe (einschließlich Aufgabe 23): Dienstag, 03.06.2008, vor der Vorlesung**

### Aufgabe 20: *Ausgleichsprobleme*

In der Chemie werden häufig sogenannte Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten  $K_i$  ( $i = 1, \dots, m$ ) bei Messtemperaturen  $T_i$  mit einer absoluten Messgenauigkeit (Toleranz)  $\delta K_i$  gemessen. Mit Hilfe des Arrhenius-Gesetzes

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

bestimmt man daraus im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate die beiden Parameter, den präexponentiellen Faktor  $A$  und die Aktivierungsenergie  $E$ , wobei die allgemeine Gaskonstante  $R$  vorgegeben ist.

Formulieren Sie das gestellte nichtlineare Problem als **lineares** Ausgleichsproblem. Welche Vereinfachungen erhält man für die beiden Spezialfälle

- a)  $\delta K_i = \varepsilon K_i$     (konstanter relativer Fehler)
- b)  $\delta K_i = \varepsilon$     (konstanter absoluter Fehler)

(Hinweis: Da unterschiedliche Messgenauigkeiten  $\delta K_i$  auftreten können, ist das gewichtete Ausgleichsproblem

$$\sum_{i=1}^m \left( \frac{K_i - \varphi(T_i, A, E)}{\delta K_i} \right)^2 = \min$$

zu lösen.)

(6)

### Aufgabe 21: *Fixpunktiteration*

Zeigen Sie: Das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} 6x_1 &= 2 \sin(x_1) + \log(x_2^2 + 1) \\ 7x_2 &= \cos(x_1) + \exp(x_2^2) \end{aligned}$$

besitzt in  $[0, 1]^2$  genau eine Lösung. Geben Sie ein Iterationsverfahren an, das diese Lösung näherungsweise bestimmt! Wie viele Iterationsschritte sind notwendig, um eine Näherung mit einer Genauigkeit von mindestens  $10^{-2}$  in der  $\|\cdot\|_\infty$ -Norm zu gewinnen?

(8)

**Bitte wenden!**

**Aufgabe 22:** *Konvergenzordnung des modifizierten Newton-Verfahrens*

Sei  $f \in C^3[a, b]$  und  $x^* \in (a, b)$  eine Nullstelle der Ordnung 2, d.h.

$$f(x^*) = f'(x^*) = 0 \neq f''(x^*).$$

Weiter sei  $f''(x) \neq 0$  auf  $[a, b]$ .

Zeigen Sie: Das modifizierte Newton-Verfahren

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - 2 \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

konvergiert bei geeigneter Wahl von  $x^{(0)}$  mindestens quadratisch gegen  $x^*$ . Welche Auswirkung hätte die zusätzliche Eigenschaft  $f'''(x^*) = 0$  auf die Konvergenzordnung? (8)

**Programmieraufgabe 23:** *Skalares Newton-Verfahren*

- i) Implementieren Sie das skalare Newton-Verfahren aus Abschnitt 5.3.1 der Vorlesung.
- ii) Bestimmen Sie experimentell den Einzugsbereich des Newton-Verfahrens für die Nullstelle  $x^* = 0$  der Funktion  $g(x) := \arctan x$ .
- iii) Vergleichen Sie den in ii) ermittelten Einzugsbereich mit dem des modifizierten Newton-Verfahrens  $x^{(k+1)} := x^{(k)} - \lambda \frac{g(x^{(k)})}{g'(x^{(k)})}$  für geeignete Werte  $\lambda \approx 1$ . Wie wird die Konvergenzgeschwindigkeit durch die Wahl  $\lambda \neq 1$  beeinflusst?

(5+3+4)

**Organisatorisches:**

- **Klausurtermin:** Dienstag, 24.06.2008, 11.00 Uhr, HG 116, Hörsaalgebäude. Dauer: 150 Minuten, ohne Hilfsmittel.
- **Die Anmeldung zur Klausur kann in der Vorlesung oder bei Manuel Werner, Raum D6425, Lahnberge, noch bis Dienstag, den 10.06.2008 geschehen.**