Prof. Dr. Karsten Urban
Dipl.-Math. oec. Klaus Stolle
Institut für Numerische Mathematik
Universität Ulm

SoSe 2017
Blatt 04
14.05.2017

Angewandte Numerik 1

Besprechung in den Tutorien in der Woche vom 22.05.2017 bis 26.05.2017

Für dieses Übungsblatt gibt es 19 Theorie- und 20 Matlab-Punkte, sowie 7 Theorie- und 6 Matlab-Zusatzpunkte. Punkte, die mit einem * gekennzeichnet sind, sind Zusatzpunkte.
Die 60-Prozent-Grenzen liegen aktuell (inklusive Blatt 04) bei 54,0 Theoriepunkten und 40,2 Matlabpunkten.

Aufgabe 16 *(Cholesky-Zerlegung durch Koeffizientenvergleich)* (5T+2T+1T Punkte)

a) Berechnen Sie die Cholesky-Zerlegung von

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 6 & -3 \\ 0 & 1 & -3 & 30 \end{pmatrix}$$

durch Koeffizientenvergleich analog Aufgabe 10 des Übungsblatts 3. Bestimmen Sie also die Koeffizienten der linken unteren Dreiecksmatrix L sukzessive durch Vergleich der Koeffizienten der beiden Matrizen A und $L * L^T$. Verwenden Sie bei allen Rechnungen ausschließlich Brüche und keine Dezimalzahlen und geben Sie alle Zwischenschritte an.

b) Worin unterscheidet sich Ihre Berechnung durch Koeffizientenvergleich vom in der Vorlesung vorgestellten und auf Seite 47 des Skripts angegebenen Algorithmus für das Cholesky-Verfahren.

c) Ist die Cholesky-Zerlegung einer symmetrischen positiv definiten Matrix eindeutig? Begründen Sie Ihre Aussage.

Aufgabe 17 *(Voraussetzungen für die Durchführbarkeit der Cholesky-Zerlegung)* (8T Punkte)

Berechnen Sie, falls möglich, für die folgenden Matrizen die Cholesky-Zerlegung per Hand:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}, \qquad A_3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 8 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix}.$$

Falls die Cholesky-Zerlegung nicht existiert, geben Sie an, warum. Begründen Sie dabei Ihre Vermutungen. Verwenden Sie bei allen Rechnungen ausschließlich Brüche und keine Dezimalzahlen und geben Sie alle Zwischenschritte an.

Aufgabe 18 *(Programmieraufgabe: Cholesky-Verfahren für Bandmatrizen)*

(4M+3M+2M+2M+4T* Punkte)

Die Matrix des linearen Gleichungssystems (1)

$$\begin{pmatrix} 2+h^2\lambda(x_1) & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2+h^2\lambda(x_2) & -1 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2+h^2\lambda(x_3) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2+h^2\lambda(x_{N-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = h^2 \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \end{pmatrix} \tag{1}$$

aus Aufgabe 15 des letzten Übungsblattes ist zumindest für $\lambda(x) > 0$ symmetrisch und positiv definit. Daher bietet sich zur Lösung dieses linearen Gleichungssystems auch das Cholesky-Verfahren für Bandmatrizen an.

a) Schreiben Sie eine Matlab-Funktion `L = choleskyBand(A, m)`, welche zu einer symmetrisch positiv definiten Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit einer Bandmatrixstruktur und Bandbreite $m \in \mathbb{N}$, $m < n$ die Cholesky-Zerlegung bestimmt, also eine untere Dreiecksmatrix L berechnet mit $A = LL^T$. Testen Sie Ihre Funktion mit Hilfe des Skriptes `testCholeskyBand.m`, welches auf der Homepage verfügbar ist.

b) Um die Lösung des Gleichungssystems (1) zu erhalten, müssen Sie nun noch das lineare Gleichungssystem $LL^Tu = h^2f$ durch Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen lösen. Schreiben Sie dazu eine Matlab-Funktion `x = solveCholeskyBand(L, m, b)`, die das Gleichungssystem $LL^Tx = b$ löst und die Lösung `x` zurück gibt. Beachten Sie dabei die spezielle Bandstruktur mit Bandbreite `m` der Matrix L.

c) Schreiben Sie ein Matlab-Skript `testSolveCholeskyBand`, das Ihre Matlab-Funktionen `L = choleskyBand(A, m)` und `x = solveCholeskyBand(L, m, b)` analog zu Aufgabe 15 c) mit dem linearen Gleichungssystem (1) testet. Verwenden Sie wieder $\lambda(x) \equiv 1$ und $f(x) \equiv 1$. Wählen Sie auch andere Werte für λ und f, beispielsweise $f(x) = 10\sin(x)$.

d) Plotten Sie analog zu Aufgabe 15 d) die erhaltene Näherungslösung u. Die Funktionswerte zwischen zwei Punkten x_i und x_{i+1} sollen dabei wieder linear aus den Werten u_i und u_{i+1} interpoliert werden.

e) Vergleichen Sie das Cholesky-Verfahren für Bandmatrizen und Ihren Algorithmus aus Aufgabe 15:

i) Wie viele FLOPs benötigt das Cholesky-Verfahren für Bandmatrizen zur Berechnung der Cholesky-Zerlegung der Matrix aus Gleichung (1)? Zählen Sie dabei Quadratwurzel-Berechnungen getrennt.

ii) Wie viele FLOPs werden für das Vorwärts- und Rückwärts-Einsetzen benötigt?

iii) Welches der beiden Verfahren würden Sie zur Lösung des linearen Gleichungssystems (1) einsetzen? Begründen Sie Ihre Antwort.

Aufgabe 19 *(Programmieraufgabe: Vergleich der Rechenzeiten)* (5M+3T+4M+3M*+3M*+3T* Punkte)

In dieser Aufgabe wollen wir Ihre Überlegungen aus der vorherigen Aufgabe 18 zum Aufwand der beiden Verfahren empirisch überprüfen.

a) Schreiben Sie dazu ein Matlab-Skript `laufzeiten`, in dem Sie für $n \in \{2^i \mid i = 3, \dots, 14\}$ jeweils entsprechend dem linearen Gleichungssystem (1) den Vektor `d` der Diagonalelemente, $d = (2 + h^2\lambda(x_1), 2 + h^2\lambda(x_2), \dots, 2 + h^2\lambda(x_{N-1}))$, und den Vektor `nd` der Elemente der beiden Nebendiagonalen, $nd = (-1, -1, \dots, -1)$, sowie die symmetrische Tridiagonalmatrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und den Vektor $b \in \mathbb{R}^n$ erzeugen und das lineare Gleichungssystem (1) sowohl mit dem Cholesky-Verfahren für Bandmatrizen als auch mit Ihrem Algorithmus aus Aufgabe 15 lösen. Plotten Sie für beide Varianten die zur Lösung des linearen Gleichungssystems benötigten Zeiten (Matlab-Befehle `tic` und `toc`) über die Dimension `n` des Gleichungssystems in einem Schaubild mit logarithmischen Achsen (Matlab-Befehl `loglog`). Zeichnen Sie in Ihr Schaubild geeignete Steigungsgeraden ein.

Beachten Sie, dass Ihr Matlab-Skript je nach Leistungsfähigkeit Ihres Computers zur Berechnung einige Minuten braucht. Um realistische Zeiten zu erhalten, sollten Sie Ihren Computer in der Zeit, in der die Berechnungen laufen, nicht anderweitig nutzen.

b) Interpretieren Sie Ihr Schaubild. Decken sich Ihre numerischen Ergebnisse mit Ihren Überlegungen aus der vorigen Aufgabe 18?

c) Nun möchten Sie sich auch den Laufzeit-Vorteil verdeutlichen, der aus der speziellen Bandstruktur der Matrix A resultiert. Schreiben Sie dazu eine Matlab-Funktion `L = cholesky(A)`, welche zu einer allgemeinen (also ohne Bandstruktur) symmetrisch positiv definiten Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Cholesky-Zerlegung bestimmt, also eine untere Dreiecksmatrix L berechnet mit $A = LL^T$. Testen Sie Ihre Funktion mit Hilfe des Skriptes `testCholesky.m`, welches auf der Homepage verfügbar ist.

d) Erweitern Sie Ihr Matlab-Skript `laufzeiten`. Lösen Sie das Gleichungssystem auch mit Ihrer Matlab-Funktion `L = cholesky(A)`. Schreiben Sie für das Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen eine Matlab-Funktion `x = solveCholesky(L, b)`. Ergänzen Sie das Schaubild mit den für diese Lösungsvariante benötigten Zeiten und zeichnen Sie wieder eine geeignete Steigungsgerade ein.

   Beachten Sie, dass Ihr erweitertes Matlab-Skript `laufzeiten` zur Berechnung möglicherweise deutlich mehr Zeit braucht als Ihr ursprüngliches Skript aus Aufgabenteil a).

e) Zuletzt interessiert Sie auch der Aufwand, den eine LR-Zerlegung im Vergleich zu den oben untersuchten Algorithmen benötigt. Erweitern Sie daher Ihr Matlab-Skript `laufzeiten`. Lösen Sie das Gleichungssystem auch mit Ihren Matlab-Funktionen `[L, R, P] = lrPivot(A)` und `x = solveLR(L, R, b)` vom letzten Übungsblatt 3. Ergänzen Sie das Schaubild mit den für diese Lösungsvariante benötigten Zeiten und zeichnen Sie, falls nötig, eine geeignete Steigungsgerade ein.

f) Interpretieren Sie Ihr Schaubild. Haben Sie aufgrund der Angaben im Skript zu den Aufwänden der verschiedenen Verfahren diese Ergebnisse erwartet?

Hinweise:
Die Programmieraufgaben sind in Matlab zu erstellen. Der Source Code muss strukturiert und dokumentiert sein. Senden Sie **spätestens 24 Stunden vor Ihrem Tutorium** alle Matlab-Files und alle Ergebnisse in einer E-mail mit dem Betreff **Loesung-Blatt04** an **angewandte.numerik@uni-ulm.de**.