Computational Physics

Übungsblatt 1

Miriam Simm
miriam.simm@tu-dortmund.de

Katrin Bolsmann
katrin.bolsmann@tu-dortmund.de

Mario Alex Hollberg
mario-alex.hollberg@tu-dortmund.de

Abgabe: 24.April.2020

Aufgabe 1: Basiswechsel mit LU-Zerlegung

a) Die Basen deuten auf ein hexagonales Kristallsystem hin.

b) Geben sind drei Basis-Vektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$, die zusammen die Matrix $A = (\vec{a}_1\ \vec{a}_2\ \vec{a}_3)$ ergeben:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Eine Fehlstelle befindet sich bei $\vec{x} = (2,0,2)^T$ und es sollen nun die Koordinaten $\vec{x'}$ bezüglich der Basen $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$ bestimmten werden. Dazu wird das lineare Gleichungssystem

$$A\vec{x'} = \vec{x}$$

unter Verwendung der Bibliothek `Eigen` gelöst, wobei die Matrix A mit `Eigen::PartialPivLu` zerlegt wird (LU-Zerlegung: $A = P{\cdot}L{\cdot}U$). Bei der Zerlegung ergeben sich eine Permutations-Matrix P, eine Untere Dreiecksmatrix L und eine Obere Dreiecksmatrix U:

$$P_A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.57735 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$U_A = \begin{pmatrix} 0.866025 & 0.866025 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Somit erhalten wir von der `solve`-Funktion die Koordinaten

$$\vec{x'} = (2,-2,2)^T \quad .$$

c) Erneut sollen zunächst die Koordinaten $\vec{y'}$ einer Fehlstelle bei $\vec{y} = (1, 2\sqrt{3}, 3)^T$ bestimmt werden:

$$\vec{y'} = (3,1,3)^T$$

Die LU-Zerlegung von $A = P \cdot L \cdot U$ kann als Zwischenergebnis benutzt werden, sodass nur mittels der `solve`-Funktion das LGS gelöst werden kann.
Die Komplexität des Verfahrens ist jetzt n^2, da der Aufwand für die Zerlegung ($\frac{n^2}{3}$) wegfällt, weil diese Zerlegung bereits durchgeführt ist und erneut verwendet werden kann.

d) Erneut wird eine LU-Zerlegung gemacht, allerdings mit der Matrix

$$B = (\vec{a}_3\ \vec{a}_2\ \vec{a}_1) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Es ergeben sich die Matrizen:

$$P_B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$L_B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -0.57735 & 1 \end{pmatrix},$$

$$U_B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.866025 & 0.866025 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Im Vergleich zu den P, L und U Martizen aus Aufgabenteil b) fällt auf besonders die P-Matrix auf. Offensichtlich werden in der `Eigen::PartialPivLu`-Modul zunächst die (betragsmäßig) größte Zahl getauscht. Vergleiche erste Spalte der beiden P-Matrizen:

P_A: Die erste Zeile ($\frac{1}{2}$-Eintrag) wird mit der dritten Zeile ($\frac{\sqrt{3}}{2}$-Eintrag) getauscht. Die letzte Spalte braucht hingegen nicht mehr getausch werden.

P_B: Die erste Zeile (Null-Eintrag) wird mit der dritten Zeile (1-Eintrag) getauscht. Die mittlere Spalte bleibt an ihrem Ort.

Das Vorgehen soll absichern, dass durch keine Null geteilt wird. Effektiv werden A und B aber gleich oft getauscht. Dies führt zu unterschiedlichen Matrizen L und U.

Aufgabe 2: Ausgleichsrechnung

Gegeben seien die folgenden (x, y)-Datenpunkte:

x	0	2,5	−6,3	4	−3,2	5,3	10,1	9,5	−5,4	12,7
y	4	4,3	−3,9	6,5	0,7	8,6	13	9,9	−3,6	15,1

Für diese soll eine Ausgleichsgerade

$$y(x) = mx + n$$

berechnet werden, welche den quadratischen Fehler

$$R = \sum_i (m\,x_i + n - y_i)^2$$

minimiert.

a) Formulierung des überbestimmten Gleichungssystems

R soll minimiert werden

4.1

$$\vec{0} \stackrel{!}{=} \vec{\nabla}_{m,n} \cdot R = \begin{pmatrix} \sum_i 2(mx_i + n - y_i)x_i \\ \sum_i 2(mx_i + n - y_i) \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \sum_i (mx_i + n) = \sum_i y_i$$

Somit lautet das überbestimmte Gleichungssystem

$$\Rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} \vec{x} & \vec{1} \end{pmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{pmatrix} m \\ n \end{pmatrix}}_{\vec{n}} = \vec{y} \qquad .$$

Wobei $\vec{1}$ ein Vektor ist, welcher nur Einsen beinhaltet und die gleiche Dimension wie $\vec{x}$ hat. Somit handelt es sich bei A um eine 10×2 - Matrix.

b) Überführung in ein quadratisches Problem

Mit der Matrix $P = A^T A$ kann das Systen folgendermaßen in ein quadratisches Gleichungssystem überführt werden:

$$A\vec{n} = \vec{y} \qquad | \cdot A^T$$
$$\Leftrightarrow P\vec{n} = A^T\vec{b}$$

c) Lösen des Gleichungssystems

Das symmetrische Problem kann nun mittels einer LU-Zerlegung gelöst werden (siehe Aufgabe2.cpp). Für die Steigung m und den y-Achsenabschnitt n ergeben sich die Werte

$$m = 0.959951$$
$$n = 2.65694$$

d) Graphische Darstellung der Ausgleichsgeraden

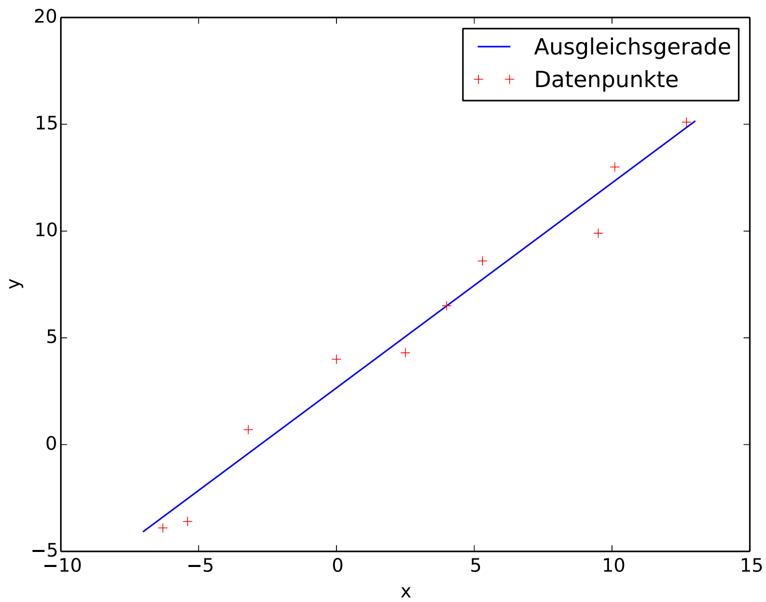

Abbildung 1: Aufgabe 2d: Ausgleichsgerade mit der Steigung $m = 0.959951$ und dem y-Achsenabschnitt $n = 2.65694$

Index der Kommentare

4.1 Sehr schön!