Numerische Mathematik - Projektteil 2

Richard Weiss Florian Schager Christian Sallinger Jakob Guttmann
Paul Winkler Christian Göth

Inhaltsverzeichnis

1 Dünn besetzte Matrizen

Eine häufige Problemstellung in der Numerischen Mathematik lautet lineare Gleichungssysteme mit großen, dünn besetzten Matrizen zu lösen. Dabei kommen meist iterative Verfahren zum Einsatz, die in diesem Projekt effizient implementiert werden.

1.1 Direkter Löser

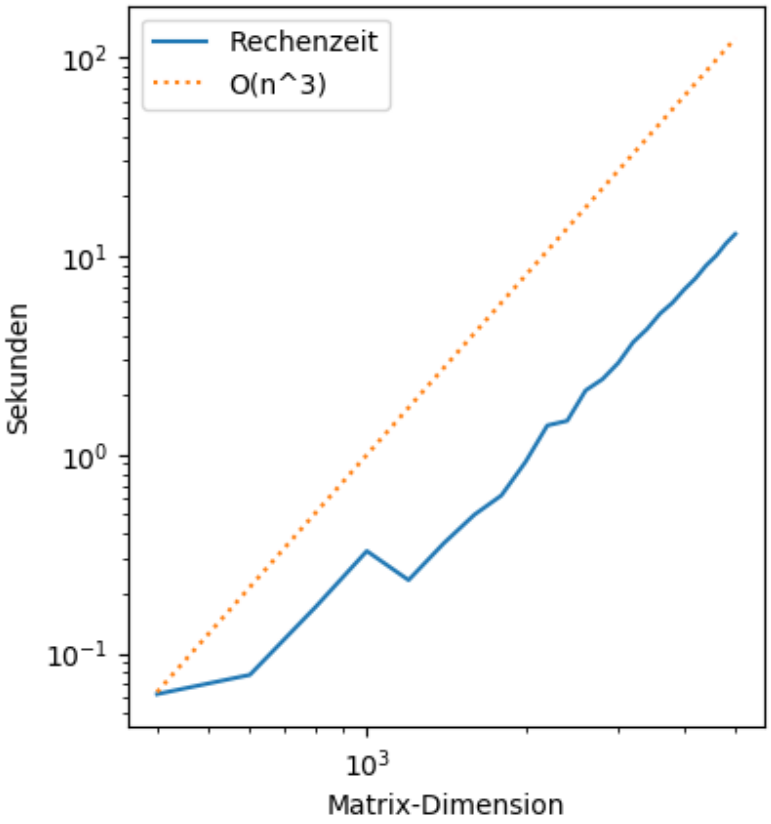
Zuerst testen wir als Basis wie aufwändig der direkte Löser (numpy.linalg.solve) ist um später einen Maßstab für unsere Effizienzsteigerungen zu haben. Wir generieren eine symmetrisch positiv definite Zufallsmatrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, wobei pro Zeile eine fixe Anzahl an Einträgen ungleich Null sind und testen für eine zufällige rechte Seite $b \in \mathbb{R}^n$ bis zu welcher Größe n das lineare Gleichungssystem

$$Ax = b$$

mit einem direkten Löser (numpy.linalg.solve) in akzeptabler Zeit gelöst werden kann.

```
1
2  def zufallsmatrix(n, nonzeros):
3    A = np.concatenate((np.zeros((n,nonzeros)), np.random.rand(n, n-nonzeros)), axis = 1)
4    for i in range(n):
5      np.random.shuffle(A[i])
6    return A + A.T + np.diag(np.random.rand(n)*n)
7
8  A_base = zufallsmatrix(5000,100)
9
10 x = [i for i in range(400,n+1,200)]
11 y = []
12 for n in x:
13   A = A_base[:n,:n]
14   b = np.random.rand(n)
15   start = time.process_time()
16   z = np.linalg.solve(A,b)
17   end = time.process_time()
18   y.append(end-start)
```

Wie in Abbildung 1 ersichtlich verhält sich die Rechenzeit kubisch in Relation zur Problemgröße. Zum Testen wurde eine Zufallsmatrix mit 100 Nicht-Null-Einträgen pro Zeile (nicht exakt, da die Symmetriesierung den Wert pro Zeile verzerrt) und einer Gesamtgröße von 5000 erstellt. Der direkte Löser wurde schließlich auf die $(200k \times 200k)$-dimensionalen Ausschnitte der oberen rechten Ecke angewandt $(2 \leq k \leq 25)$. Wie man sieht erreichen wir damit schon langsam die Grenze des akzeptabel Berechenbaren, für die volle 5000×5000-Matrix braucht der Algorithmus schon über 10 Sekunden.



	Zeit
400	0.0625
600	0.078125
800	0.171875
1000	0.328125
1200	0.234375
1400	0.359375
1600	0.5
1800	0.625
2000	0.921875
2200	1.40625
2400	1.484375
2600	2.109375
2800	2.40625
3000	2.90625
3200	3.6875
3400	4.296875
3600	5.140625
3800	5.828125
4000	6.796875
4200	7.71875
4400	8.96875
4600	10.0625
4800	11.59375
5000	12.9375

Abbildung 1: Rechenzeit abhängig von der Problemgröße

1.2 CG-Verfahren

Um die Effizienz der Problemlösung zu steigern greifen wir also nicht mehr auf den direkten Löser zurück, sondern implementieren eine optimierte Version des CG-Verfahrens.

```
def cg(A,b,x0,tol):
    xt = x0
    r0 = b - np.dot(A,xt)
    d = r0
    while(np.linalg.norm(r0) > tol):
        prod = np.dot(np.transpose(r0),r0)
        prod2 = np.dot(A,d)
        alpha = prod/np.dot(np.transpose(d),prod2)
        xt = xt + alpha*d
        r0 = r0 - alpha*prod2
        beta = np.dot(np.transpose(r0),r0)/prod
        d = r0 + beta*d
    return xt
```

Im Vergleich dazu Algorithmus 8.10 aus dem Numerik-Skript:

$1: t = 0$

$2: r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$

$3: d^{(0)} = r^{(0)}$

$4:$ **while** $\left\| r^{(t)} \right\| >$ **TOL** do

$5: \quad \alpha_t = \dfrac{r^{(t)} * d^{(t)}}{d^{(t)} * Ad^{(t)}}$

$6: \quad x^{(t+1)} = x^{(t)} + \alpha_t d^{(t)}$

$7: \quad t = t + 1$

$8: \quad r^{(t)} = b - Ax^{(t)}$

$9: \quad \beta_{t-1} = -\dfrac{r^{(t)} * Ad^{(t-1)}}{d^{(t-1)} * Ad^{(t-1)}}$

$10: \quad d^{(t)} = r^{(t)} + \beta_{t-1} d^{(t-1)}$

$11:$ **end while**

Die Algorithmen ähneln sich in vielen Schritten, weisen aber durchaus einige Unterschiede auf. Daher müssen wir noch beweisen, dass die beiden Algorithmen wirklich äquivalent sind. Wir führen den Beweis mittels Induktion über die Anzahl der Iterationen.
Dabei bezeichnen wir mit * die Variablen aus unserem Algorithmus und ohne * die Variablen des Algorithmus aus dem Skript.
Starten wir mit dem Induktionsanfang.

$$
\begin{aligned}
&A = A^*, b = b^*, x_0 = x_0^* \\
&r_0 = b - Ax_o = b^* - A^* x_0^* = r_0^* \\
&d_0 = r_0 = r_0^* = d_0^* \\
&\alpha_0 = \frac{r_0^T d_0}{d_0^T A d_0} = \frac{r_0^{*T} d_0^*}{d_0^{*T} A d_0^*} = \frac{r_0^{*T} r_0^*}{d_0^{*T} A d_0^*} = \alpha_0^* \\
&x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = x_0^* + \alpha_0^* d_0^* = x_1^* \\
&r_1 = b - Ax_1 = b^* - A^* x_1^* = b^* - A^* x_0^* - \alpha_0^* A d_0^* = r_0^* - \alpha_0^* A^* d_0^* = r_1^* \\
&\beta_0 = -\frac{r_1^T A d_0}{d_0^T A d_0} = \frac{-r_1^{*T} A d_0^*}{d_0^{*T} A d_0^*} = \frac{-r_1^{*T} A r_0^*}{r_0^{*T} A r_0^*}
\end{aligned}
$$

Unter Ausnutzung der Orthogonalität der Residuen erhalten wir: $r_1^{*T} r_0^* = 0$ und somit können wir den Bruch folgendermaßen erweitern:

$$\frac{-r_1^{*T} A r_0^*}{r_0^{*T} A r_0^*} = \frac{r_1^{*T} r_0^* - \alpha_0^* r_1^{*T} A r_0^*}{\alpha_0^* r_0^{*T} A r_0^*}$$

Nun berechen wir

$$r_1^{*T} r_1^* = r_1^{*T}(r_0^* - \alpha_0^* A d_0^*) = r_1^{*T} r_0^* - \alpha_0^* r_1^{*T} A r_0^*$$

und setzen $\alpha_0^* = \frac{r_0^{*T} r_0^*}{d_0^{*T} A d_0^*}$ ein:

$$\frac{r_1^{*T} r_0^* - \alpha_0^* r_1^{*T} A r_0^*}{\alpha_0^* r_0^{*T} A r_0^*} = \frac{r_1^{*T} r_1^*}{\frac{r_0^{*T} r_0^*}{r_0^{*T} A r_0^*} r_0^{*T} A r_0^*} = \frac{r_1 * T r_1^*}{r_0^{*T} r_0^*} = \beta_0^*$$

$$d_1 = r_1 + \beta_0 d_0 = r_1^* + \beta_0^* d_0^* = d_1^*$$

Damit haben wir die Gleichheit der Variablen nach dem ersten Schleifendurchlauf gezeigt.
Sei nun nach n Schleifendurchläufen die Gleichheit aller vorhergehenden Variablen vorausgesetzt:

$$\alpha_{n-1} = \alpha_{n-1} *, x_n = x_n^*, r_n = r_n^*, \beta_{n-1} = \beta_{n-1}^*, d_n = d_n^*$$

$$\alpha_n = \frac{r_n^T d_n}{d_n^T A d_n} = \frac{r_n^{*T} d_n^*}{d_n^{*T} A^* d_n^*} = \frac{r_n^{*T}(r_n^* + \beta_{n-1}^* d_{n-1}^*)}{d_n^{*T} A^* d_n^*}$$

Jetzt nutzen wir die Eigenschaft: $\forall\ 0 \leq j < m : r_m^T d_j = 0$ und erhalten:

$$\frac{r_n^{*T}(r_n^* + \beta_{n-1}^* d_{n-1}^*)}{d_n^{*T} A^* d_n^*} = \frac{r_n^{*T} r_n^*}{d_n^{*T} A^* d_n^*} = \alpha_n^*$$

$$x_{n+1} = x_n + \alpha_n d_n = x_n^* + \alpha_n^* d_n^* = x_{n+1}^*$$

$$r_{n+1} = b - A x_{n+1} = b - A(x_n + \alpha_n d_n) = b - A x_n - \alpha_n d_n =$$

$$= r_n - \alpha_n A d_n = r_n^* - \alpha_n^* A^* d_n^* = r_{n+1}^*$$

$$\beta_n = -\frac{r_{n+1}^T A d_n}{d_n^T A d_n} = \frac{r_{n+1}^{*T} r_n^* - \alpha_n^* r_{n+1}^{*T} A^* d_n^*}{d_n^{*T} A^* d_n^*} = \frac{r_{n+1} * T r_{n+1}^*}{r_n^{*T} r_n^*} = \beta_n^*$$

$$d_{n+1} = r_{n+1} + \beta_n d_n = r_{n+1}^* + \beta_n^* d_n^* = d_{n+1}^*$$

Und der Beweis ist vollständig.

Nun stellt sich natürlich die Frage, welcher der beiden Algorithmen zu bevorzugen ist. Nachdem sie mathematisch äquivalent sind, bleibt nur noch die Frage nach dem Aufwand zu überprüfen. Am aufwändigsten ist natürlich die Matrix-Vektor-Multiplikation, wovon wir in unserem Algorithmus im Gegensatz zu jenem aus dem Skript nur eine pro Schleifendurchlauf benötigen. Zusätzlich dazu brauchen wir 3 Vektor-Vektor-Multiplikationen und 4 Vektor-Skalar-Operationen.
Damit erhalten wir insgesamt $n^2 + 7n$ Flops pro Durchlauf.
Im Vergleich dazu verwendet der Algorithmus aus dem Numerik-Skript pro Iteration zwei Matrix-Vektor-Multiplikationen und ist daher aus Effizienzgründen unterlegen, da wir damit alleine schon $2n^2$ Flops pro Durchlauf brauchen.

Nachdem geklärt ist, in welcher Version der Algorithmus implementiert werden soll, ist es noch essentiell sich mit der Konvergenztheorie dahinter zu beschäftigen. Die Theorie besagt, dass das CG-Verfahren spätentens

nach n Durchläufen die exakte Lösung liefert und für die Iterierten folgende Fehlerabschätzung gilt:

$$\left\|x^{(t)} - A^{-1}b\right\|_A \leq 2\left(\frac{1-1/\sqrt{\kappa}}{1+1/\sqrt{\kappa}}\right)^t \left\|x^{(0)} - A^{-1}b\right\|_A, \quad t \in \mathbb{N},$$

mit der spektralen Konditionszahl $\kappa = \text{cond}_2(A)$.
Also sollte das Verfahren exponentiell kovergieren ($\mathcal{O}(AB^t)$) mit Konstanten
$A = 2\left\|x^{(0)} - A^{-1}b\right\|_A, \quad B = \frac{1-1/\sqrt{\kappa}}{1+1/\sqrt{\kappa}}$
Wir haben das Verfahren mit diagonaldominanten , symmetrisch, positiv definiten Zufallsmatrizen getestet. Eine weitere Möglichkeit wäre gewesen, eine Zufallsmatrix A zu erstellen und das CG-Verfahren auf $A \cdot A^T$ anzuwenden. Allerdings ist im letzteren Fall die Konditionszahl deutlich schlechter und teilweise erreichen wir die gewünschte Toleranz erst nach über n Schritten, wo wir in der Theorie ohne Rechenfehler bereits exakt sein sollten. Also haben wir uns für erstere Methode entschieden. Interessanterweise konvergiert der Fehler wesentlich schneller gegen 0 als die obere Schranke des theoretischen Fehlerschätzers vermuten lassen würde und unsere vorgegebene Toleranz von 10^{-8} wird bereits nach etwa 400 Iterationen erreicht, noch weit vor dem theoretisch (bis auf Rechenfehler) garantierten exakten Resultat nach $n = 5000$ Durchläufen. Unsere Testwerte:

```
n = 5000
A = zufallsmatrix(n,20)
b = np.random.rand(n)
tol = 10**(-8)
x0 = np.random.rand(n)
```

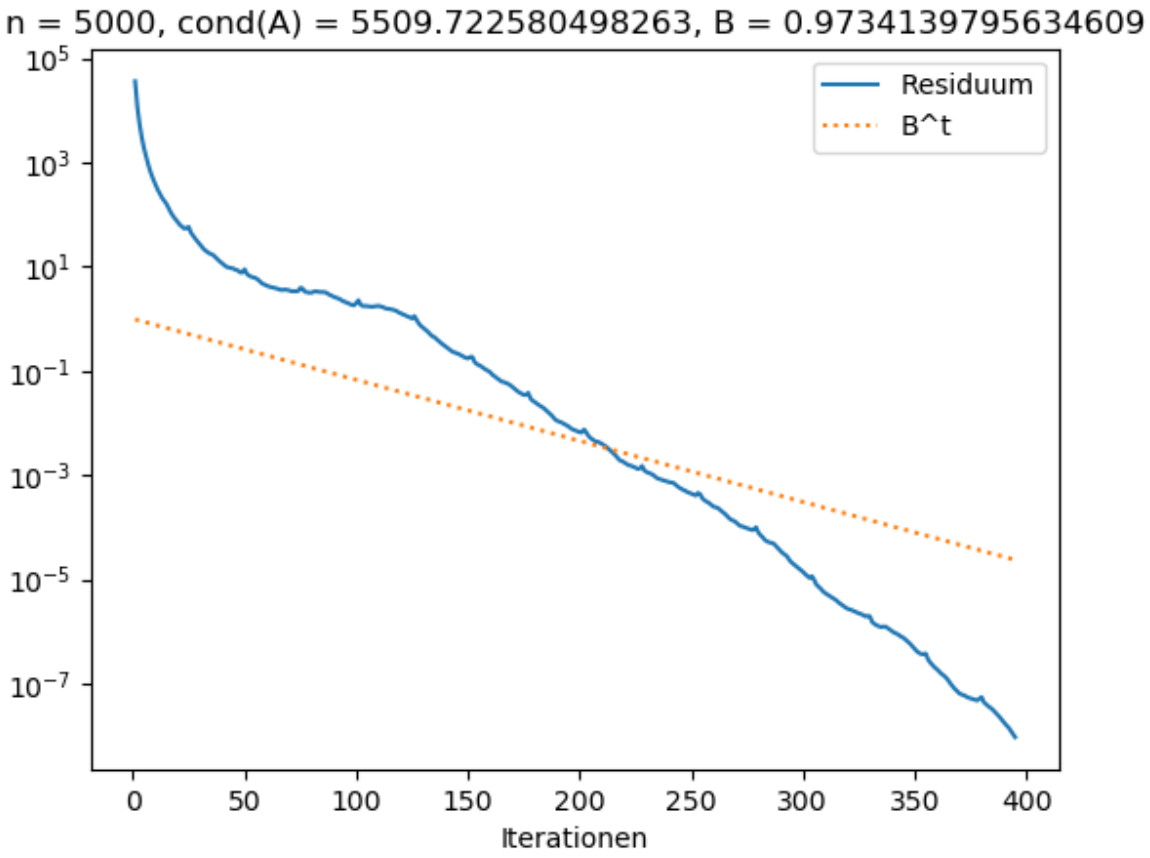


Abbildung 2: Residuum abhängig von der Anzahl an Iterationen

1.3 Sparse-Klasse

Um die Effizienz weiter zu steigern, müssen wir natürlich noch die dünne Besetztheit ausnutzen. Dies bewerkstelligen wir mit einer eigens geschrieben Klasse in Python, welche die Matrix-Vektor-Multiplikation deutlich effizienter ausführen sollte als die Standard-Multiplikation. Dünn besetzte Matrizen erlauben effizientere Implementierungen als voll besetzte, indem beim Speichern und Rechnen nur Einträge die ungleich Null sind berücksichtigt werden. Eine Möglichkeit einer solchen Implementierung ist das sogenannte *compressed sparse row* Format. Anstelle aller Einträge $A_{ij}, i, j = 1, \dots, n$ einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ werden ein Vektor $v \in \mathbb{R}^{n \times n}$ aller Einträge ungleich Null, ein Vektor $J \in \mathbb{N}_0^m$ von Spaltenindizes und ein Vektor $I \in \mathbb{N}_0^{n+1}$ von Zeigern gespeichert. Die i-te Zeile von A ist dann gegeben durch

$$A_{ij} = \begin{cases} v_{k(j)}, & \text{falls } j \in \{J_{I_i}, J_{I_i} + 1, \dots, J_{I_{i+1}} - 1\} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

```python
class Sparse:

    def __init__(self,b,v, J = np.zeros(0), I = np.zeros(0)):
        if b:
            self.v = np.array(v)
            self.J = np.array(J)
            self.I = np.array(I)
            self.n = len(self.I)-1
        else:
            self.v, self.J, self.I = self.fromdense(v)
            self.n = len(self.I)-1

    def __matmult__(self,b):
        d = np.zeros(self.n)
        for i in range(self.n):
            x = np.array(self.J[self.I[i]:self.I[i+1]]).astype(int)
            d[i] = self.v[self.I[i]:self.I[i+1]]@b[x]
        return d


    def todense(self):
        A = np.zeros([self.n,self.n])
        for i in range(self.n):
            for j in range(self.I[i],self.I[i+1]):
                A[i][self.J[j]] = self.v[j]
        return A

    def fromdense(self,A):
        v,J = np.zeros(0), np.zeros(0)
        I = np.array([0])
        c = 0
        for i in range(np.shape(A)[0]):
            for j in range((np.shape(A))[0]):
                if A[i][j] != 0:
                    v = np.append(v,A[i][j])
                    J = np.append(J,j)
                    c += 1
            I = np.append(I,c)
        return v, J, I
```

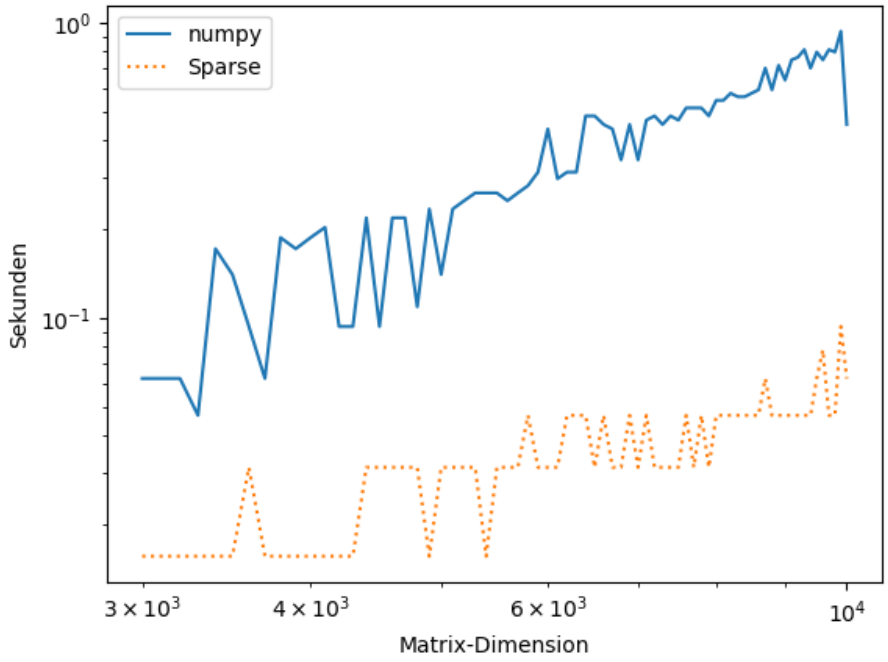


Abbildung 3: Vergleich Numpy Matrixmultiplikation vs. Sparse Matrixmultiplikation

In Abbildung 3 sehen wir, dass die Sparse-Matrix-Vektor-Multiplikation schneller ist, als die Implementierung in numpy. Wir starten erst ab einer Matrixgröße $n = 3000$, da der Messfehler bei einer kleineren Größe überwiegt und der Plot nicht aussagekräftig wäre.

1.4 CG-Verfahren kombiniert mit Sparse-Klasse

Jetzt können wir unsere neue Klasse noch mit der bereits vorhandenen CG-Implementierung kombinieren.

```
def Scg(A,b,x0,tol):
    xt = x0
    r0 = b - A.__matmult__(xt)
    d = r0
    while(np.linalg.norm(r0) > tol):
        prod = np.dot(np.transpose(r0),r0)
        prod2 = A.__matmult__(d)
        alpha = prod/np.dot(np.transpose(d),prod2)
        xt = xt + alpha*d
        r0 = r0 - alpha*prod2
        beta = np.dot(np.transpose(r0),r0)/prod
        d = r0 + beta*d
    return xt
```

Bei dieser CG-Implementierung verwenden wir anstelle der Numpy-Matrix-Vektor-Multiplikation die Implementierung von der Sparse-Klasse. Zu beachten ist, dass die Matrix A ein Objekt der Klasse Sparse sein muss, damit die Funktion durchgeführt werden kann. Ansonsten ist die Implementierung ident zum vorherigen cg-Verfahren.

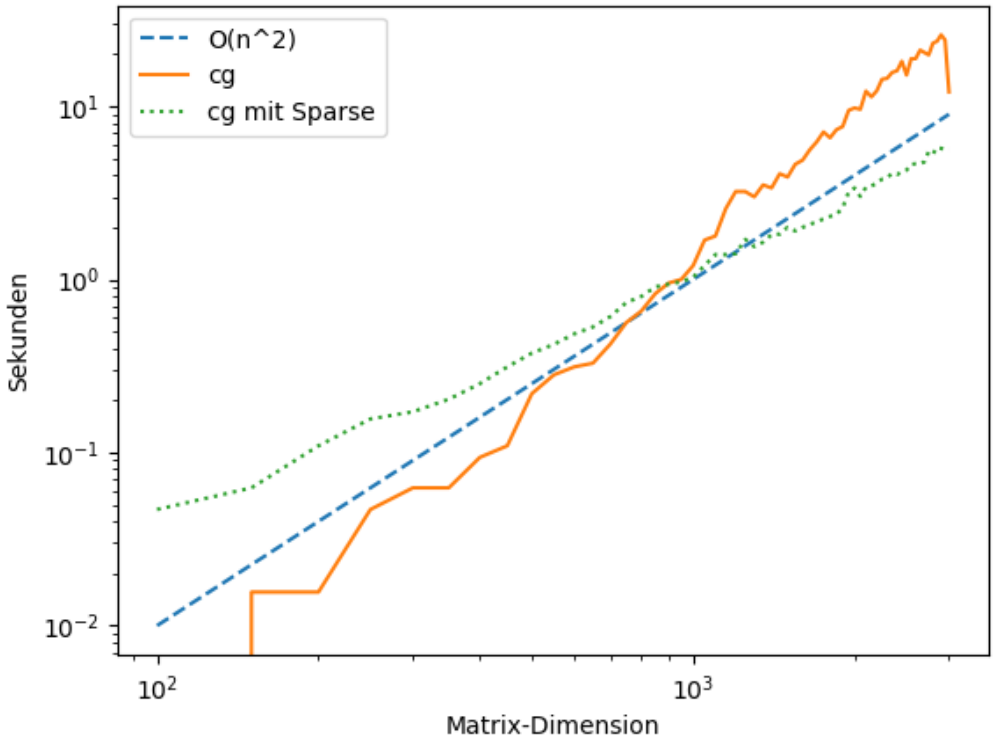


Abbildung 4: cg-Verfahren vs. cg-Verfahren mit Klasse Sparse

Wie erhofft liefert die Kombinierung mit der Sparse-Klasse ab einer gewissen Größe noch einen zusätzlichen Effizienzschub. Ab einer Matrixgröße von ca. 1000 ist das Scg-Verfahren effizienter als die übliche Implementierung. Man sieht außerdem, dass beide Algorithmen eine Laufzeit von etwa $\mathcal{O}(n^2)$ (siehe Abb. 4).

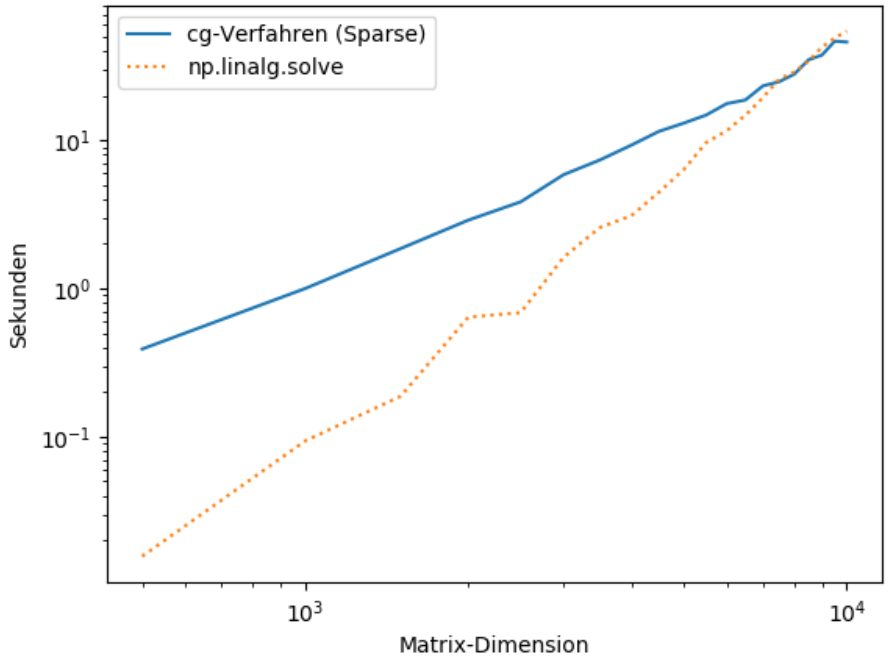


Abbildung 5: Vergleich numpy.linalg.solve mit cg-Verfahren aus Klasse Sparse

In Abbildung 5 sieht man, dass bei kleiner Matrixgröße das Verfahren in numpy deutlich schneller als das cg-Verfahren ist, aber bei zunehmender Größe benötigt das cg-Verfahren weniger Zeit.

1.5 Vorkonditioniertes CG-Verfahren

Der letzte Schritt zur Effizienz-Optimierung ist nun noch die Matrix selbst noch für unsere Zwecke zu verbessern. Die Konvergenzgeschwindigkeit des CG-Verfahrens ist durch die spektrale Konditionszahl $\text{cond}(A)$ der Matrix A bestimmt. Um die Konvergenzgeschwindigkeit zu erhöhen löst man das vorkonditionierte System

$$D^{-1}AD^{-T} = D^{-1}b$$

und gewinnt die Lösung x dann durch $x = D^{-T}y$. Die Matrix D wird dabei so gewählt, dass

- für beliebige Vektoren $z \in \mathbb{R}^n$ der Vektor $D^{-T}D^{-1}z$ einfach zu berechen ist und
- $\text{cond}(D^{-1}AD^{-T}) < \text{cond}(A)$.

Implementierung des vorkonditionierten CG-Verfahrens:

```
    def vcg(A,b,x0,P,tol):
        r0 = b - A.__matmult__(x0)
        P_inv = np.linalg.inv(P)
        z0 = P_inv@r0
        d = z0
        while(np.linalg.norm(r0) > tol):
            prod = np.dot(np.transpose(z0),r0)
            prod2 = A.__matmult__(d)
            alpha = np.dot(np.transpose(r0),z0)/np.dot(np.transpose(d),prod2)
```

```
            x0 = x0 + alpha*d
            r0 = r0 - alpha*prod2
            z0 = P_inv@r0
            beta = np.dot(np.transpose(z0),r0)/prod
            d = z0 + beta*d
    return x0
```

Wenn wir schließlich das vorkonditionierte CG-Verfahren mit $P = \text{diag}(A_{11}, \ldots, A_{nn})$ an strikt diagonaldominanten Zufallsmatrizen mit positiven Diagonaleinträgen und an beliebigen symmetrisch, positiv definiten Zufallsmatrizen testen, sehen wir unseren finalen Effizienzschub in diesem Projekt.
Wie in untenstehenden Grafik ersichtlich konnte mit der Vorkonditionierung die Anzahl der benötigten Iterationen zur Erreichung der erwünschten Toleranz massiv gesenkt werden. Bei bereits strikt diagonaldominanten Matrizen mit positiven Diagonaleinträgen ist die Konditionszahl bereits relativ niedrig und somit kann die Vorkonditionierung nicht mehr so viel verbessern wie bei den normalen symmetrisch, postiv definiten Zufallsmatrizen. Der Zeitgewinn schlägt sich bei den s.s.d. Matrizen leider nicht ganz so deutlich wieder, aber ist dennoch vorhanden und merkbar. Bei den bereits strikt diagonaldominanten Matrizen braucht das vorkonditionierte CG-Verfahren sogar deutlich mehr Zeit, da die Ersparnis der geringeren Anzahl an Schleifendurchläufen in diesem Fall eher minimal ist und allerdings durch die Vorkonditionierung in jedem Iterationsschritt mehr Aufwand steckt.
Unsere Testwerte: Strikt diagonaldominante Matrix mit positiven Diagonaleinträgen:

```
A = np.zeros((n,n))
row_sum = []
for i in range(n):
    non_zeros = np.random.rand(z)
    zeros = np.zeros(n-z)
    A[i] = np.concatenate((non_zeros, zeros))
    np.random.shuffle(A[i])
    row_sum.append(abs(np.sum(A[i]))+1)
A = A + A.T + np.diag(row_sum)
```

Standard s.s.d. Matrix:

```
A = np.zeros((n,n))
for i in range(n):
    non_zeros = np.random.rand(z)
    zeros = np.zeros(n-z)
    A[i] = np.concatenate((non_zeros, zeros))
    np.random.shuffle(A[i])
A = A + A.T + np.diag(np.random.rand(n)*10)
```

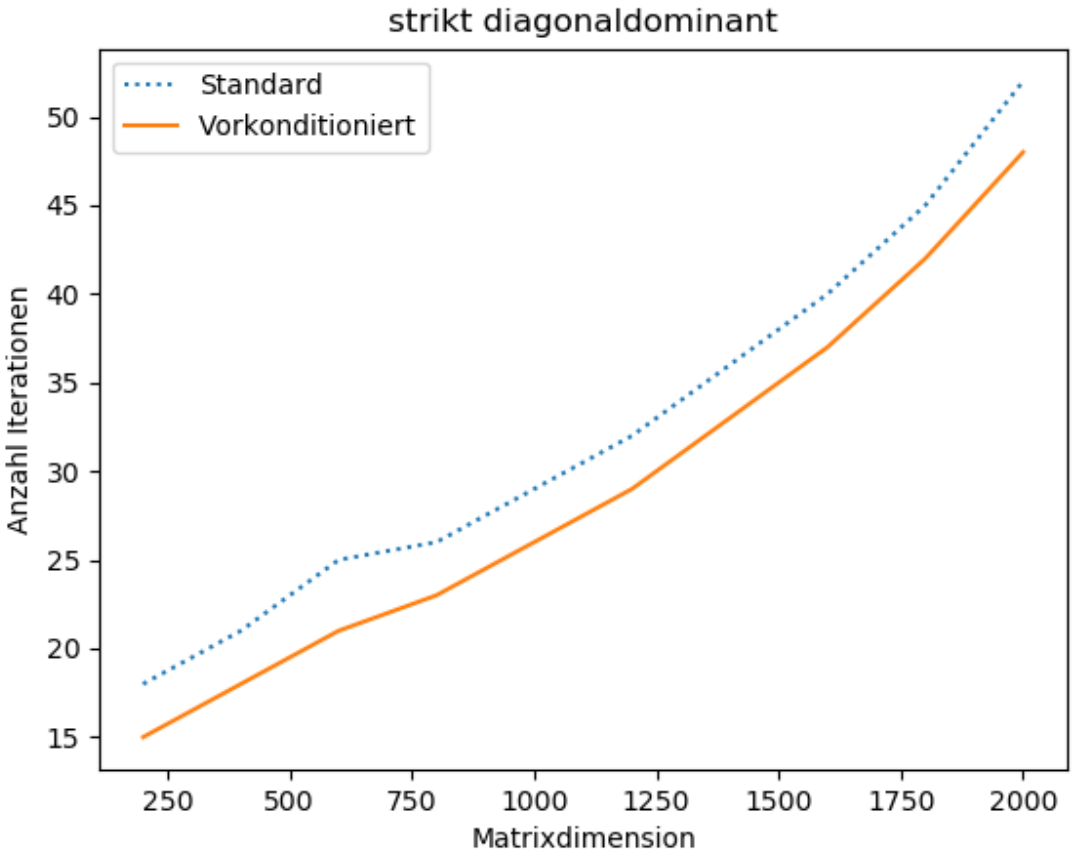


Abbildung 6: strikt diagonaldominante Matrix

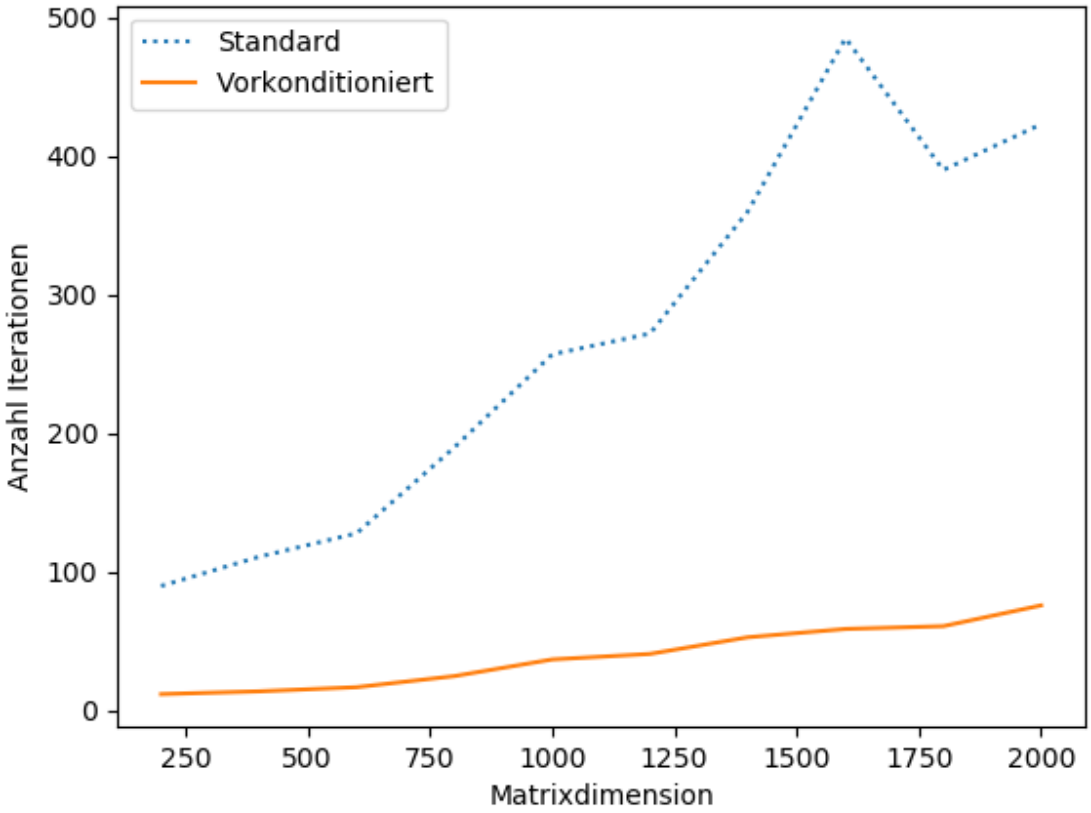


Abbildung 7: s.s.d. Matrix

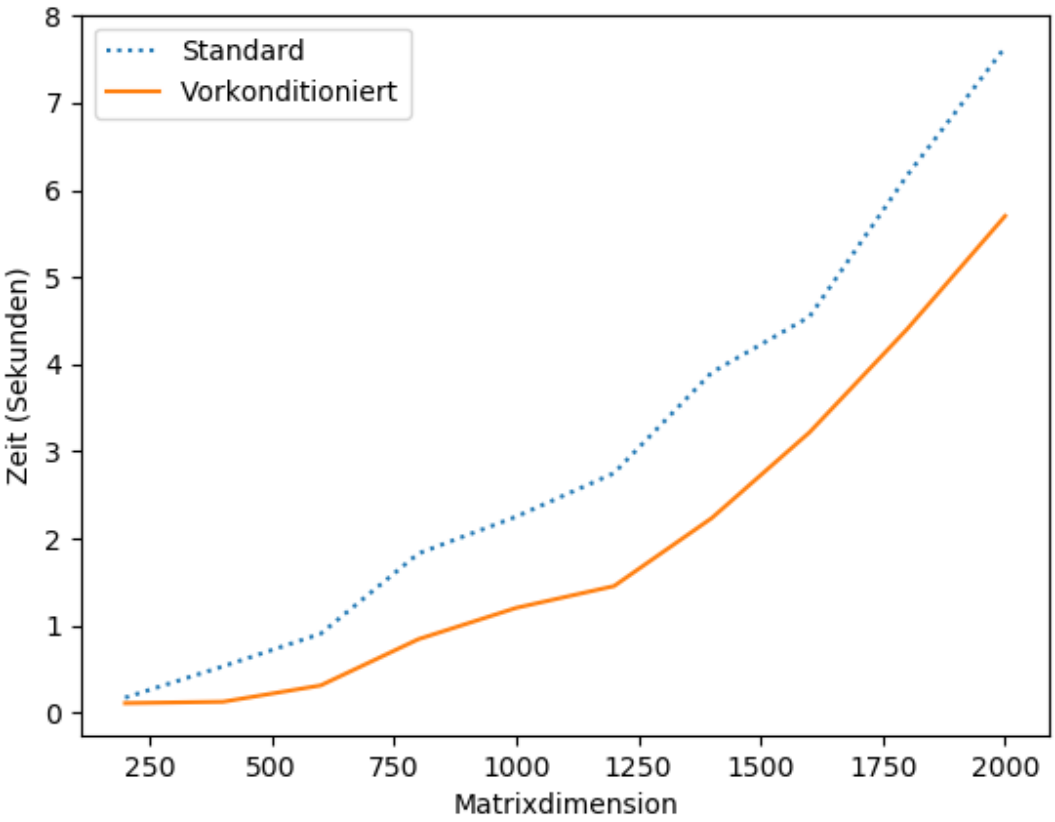


Abbildung 8: Zeitvergleich s.s.d. Matrix

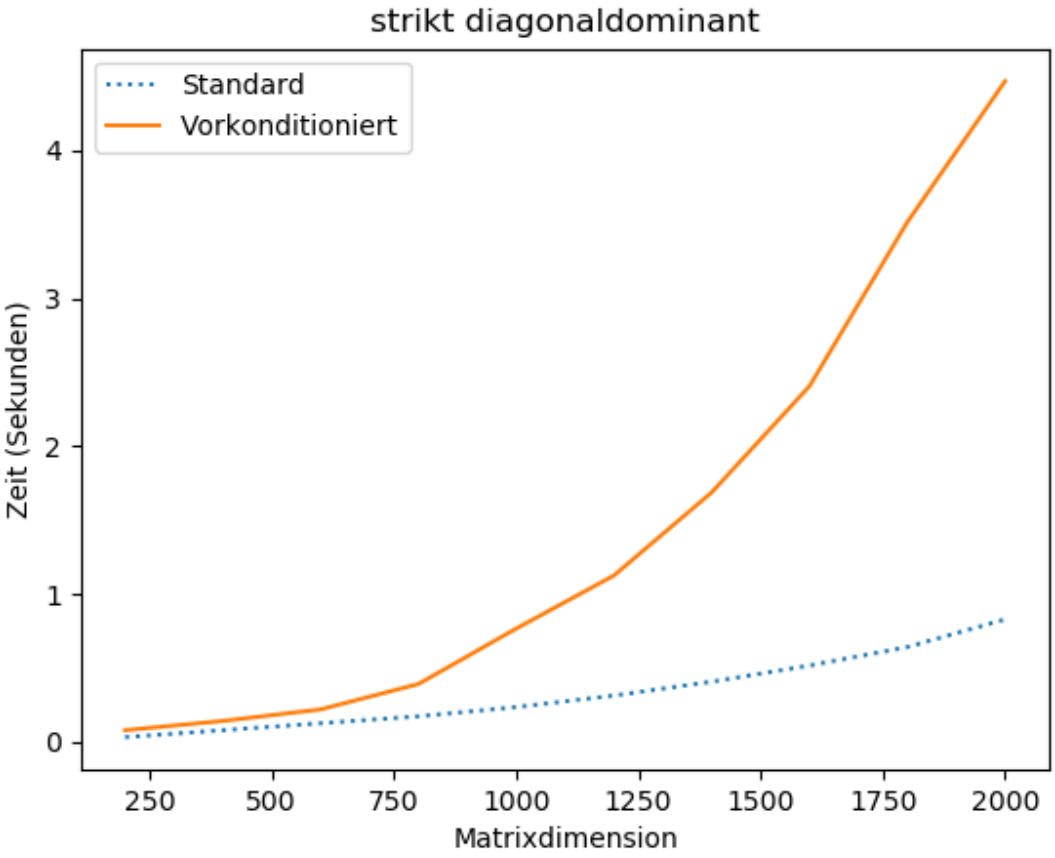


Abbildung 9: Zeitvergleich strikt diagonaldominante Matrix

2 Eigenschwingungen

2.1 Problembeschreibung

Das Projekt beschäftigt sich mit den Eigenschwingeungen einer fest eingespannten Saite. Sei dazu $u(t,x)$ die vertikale Auslenkung der Saite an der Position $x \in [0,1]$ zur Zeit t. u wird näherungsweise durch die sogenannte Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t,x) \tag{1}$$

für alle $x \in (0,1)$ und $t \in \mathbb{R}$ beschrieben, wobei c die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle ist. Wenn die Saite an beiden Enden fest eingespannt ist, so gelten die Randbedingungen

$$u(t,0) = u(t,1) = 0$$

für alle $t \in \mathbb{R}$.

Zur Berechnung der Eigenschwingungen suchen wir nach Lösungen u, die in der Zeit harmonisch schwingen. Solche erfüllen folgenden Ansatz

$$u(x,t) = \Re(v(x)e^{-i\omega t})$$

mit einer festen, aber unbekannten Kreisfrequenz $\omega > 0$ und einer Funktion v, welche nur noch vom Ort x abhängt. Durch Einsetzen erhalten wir für v die sogenannte Helmholz-Gleichung

$$-\mathbf{v}''(x) = \kappa^2 v(x), \qquad x \in (0,1), \tag{2}$$

mit der unbekannten Wellenzahl $\kappa := \frac{\omega}{c}$ und den Randbedingungen

$$v(0) = v(1) = 0. \tag{3}$$

2.2 Analytische Lösung

$$v_\kappa(x) = C_1 \cos(\kappa x) + C_2 \sin(\kappa x), \qquad x \in [0,1], \tag{4}$$

mit beliebigen Konstanten C_1, C_2, löst die Helmholz-Gleichung (2). Das erkennt man durch stumpfes Einsetzen.

$$\begin{aligned} -v_\kappa''(x) &= -\frac{\partial^2}{\partial x^2}(C_1\cos(\kappa x) + C_2\sin(\kappa x)) = -\frac{\partial}{\partial x}(-C_1\kappa\sin(\kappa x) + C_2\kappa\cos(\kappa x)) \\ &= -(-C_1\kappa^2\cos(\kappa x) - C_2\kappa^2\sin(\kappa x)) = \kappa(C_1\cos(\kappa x) + C_2\sin(\kappa x)) = \kappa^2 v_\kappa(x) \end{aligned}$$

Wir fragen uns, für welche $\kappa > 0$, Konstanten C_1 und C_2 existieren, sodass v_κ auch die Randbedingungen (3) erfüllt.

$$0 \overset{!}{=} \begin{cases} v_\kappa(0) = C_1\cos(0) + C_2\sin(0) = C_1 \\ v_\kappa(1) = C_1\cos(\kappa) + C_2\sin(\kappa) = C_2\sin(\kappa) \end{cases}$$

Nachdem $\cos(0) = 1$ und $\sin(0) = 0$ erhält man aus der oberen Gleichung $C_1 = 0$. Mit der unteren Gleichung folgt aber auch $C_2 \sin(\kappa) = 0$. Wenn nun auch $C_2 = 0$, dann erhielte man die triviale Lösung $v_\kappa = 0$. Für eine realistischere Modellierung, d.h. $v_\kappa \neq 0$, müsste $\sin(\kappa) = 0$, also $\kappa \in \pi\mathbb{Z}$.

Das sind die gesuchten $\kappa > 0$. Sei nun eines dieser κ fest. Offensichtlich ist $C_1 = 0$ eindeutig, $C_2 \in \mathbb{R}$ jedoch beliebig.

2.3 Numerische Approximation

Häufig lassen sich solche Probleme nicht analytisch lösen, sodass auf numerische Verfahren zurückgegriffen wird, welche möglichst gute Näherungen an die exakten Lösungen berechnen sollen. Als einfachstes Mittel dienen sogenannte Differenzenverfahren. Sei dazu $x_j := jh$, $j = 0, \dots, n$ eine Zerlegung des Intervalls $[0, 1]$ mit äquidistanter Schrittweite $h = 1/n$. Die zweite Ableitung in (2) wird approximiert durch den Differenzenquotienten

$$\mathbf{v}''(x_j) \approx D_h v(x_j) := \frac{1}{h^2}(v(x_{j-1}) - 2v(x_j) + v(x_{j+1})), \qquad j = 1, \dots, n-1. \tag{5}$$

Es sei angemerkt, dass (5) tatsächlich einen Differenzenquotienten beschreibt. Um das einzusehen, verwenden wir den links- und rechts-seitigen Differenzenquotient erster Ordnung, sowie $x_{j-1} = x_j - h$, $x_{j+1} = x_j + h$. Wir erhalten $\forall\, j = 1, \dots, n-1$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}''(x_j) &= \lim_{h\to 0} \frac{1}{h}(\mathbf{v}'(x_j + h) - \mathbf{v}'(x_j)) \\
&= \lim_{h\to 0} \frac{1}{h}\left(\frac{1}{h}(v(x_j + h) - v(x_j)) - \frac{1}{h}(v(x_j) - v(x_j - h))\right) \\
&= \lim_{h\to 0} \frac{1}{h^2}(v(x_j + h) - 2v(x_j) + v(x_j - h)) \\
&= \lim_{h\to 0} D_h v(x_j)
\end{aligned}$$

2.3.1 Approximationsfehler

Für hinreichend glatte Funktionen v mit einer geeigneten Konstanten $C > 0$ wird der Approximationsfehler quadratisch in h klein, d.h. dass

$$|\mathbf{v}''(x_j) - D_h v(x_j)| \leq Ch^2. \tag{6}$$

Nachdem v hinreichend glatt ist, gilt nach dem Satz von Taylor, dass $\forall\, j = 1, \dots, n-1$:

$$\begin{aligned}
v(x_j + h) &= \sum_{\ell=0}^{n+2} \frac{h^\ell}{\ell!}\mathbf{v}^{(\ell)}(x_j) + \mathcal{O}\big(h^{n+3}\big), \\
v(x_j - h) &= \sum_{\ell=0}^{n+2} \frac{(-h)^\ell}{\ell!}\mathbf{v}^{(\ell)}(x_j) + \mathcal{O}\big(h^{n+3}\big).
\end{aligned}$$

Man beachte, dass sich die ungeraden Summanden, der oberen Taylor-Polynome, gegenseitig aufheben. Damit erhalten wir für den Differenzenquotient $D_h v(x_j)$, $j = 1, \dots, n-1$ eine asymptotische Entwicklung.

$$
\begin{aligned}
D_h v(x_j) &= \frac{1}{h^2}(v(x_j-h)+v(x_j+h)-2v(x_j)) \\
&= \frac{1}{h^2}\left(2v(x_j)+h^2\mathbf{v}''(x_j)+\sum_{\substack{\ell=4\\ \ell\in 2\mathbb{N}}}^{n+2}\frac{h^\ell}{\ell!}\mathbf{v}^{(\ell)}(x_j)(1+(-1)^\ell)-2v(x_j)\right)+\mathcal{O}\big(h^{n+3}\big) \\
&= \mathbf{v}''(x_j)+2\sum_{\ell=1}^{\lfloor\frac{n}{2}\rfloor}\frac{h^{2\ell}}{(2\ell+2)!}\mathbf{v}^{(2\ell)}(x_j)+\mathcal{O}\big(h^{n+1}\big)
\end{aligned}
$$

Daraus folgt unmittelbar die quadratische Konvergenz (6), d.h. $\forall\, j=1,\dots,n-1:$

$$
D_h v(x_j)-\mathbf{v}''(x_j)=\mathcal{O}\big(h^2\big), \qquad h\to 0.
$$

2.3.2 Eigenwertproblem

Wir wollen nun den Differenzenquotienten $D_h v(x_j)$ verwenden, um ein Eigenwertproblem der Form $A\mathbf{v}=\lambda\mathbf{v}$ mit einer Matrix $A\in\mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ zu dem Eigenvektor $\mathbf{v}:=(v(x_1),\dots,v(x_{n-1}))^T)$ und dem Eigenwert $\lambda:=\kappa^2$ herzuleiten. Das soll die Helmholz-Gleichung (2), mit Tupeln und Eigenwerten für die Funktionen v_κ bzw. Vorfaktoren κ, approximieren.

Es wird eine Matrix $-A_n$, $n\geq 2$ gesucht, die den Differenzenquotienten $D_h v(x_j)$ auf den oberen Vektor $\mathbf{v}^{(n)}$ komponentenweise anwendet. Wir rufen in Erinnerung, dass $h=1/n$ und definieren die naheliegende Matrix

$$
-A_n:=\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix}-2 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & -2\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}.
$$

Wenn nun die Randbedingungen (3) gelten sollen, d.h. $v(x_0),v(x_n)=0$, leistet diese Matrix A_n tatsächlich das Gewünschte. Sie approximiert die linke Seite der Helmholz-Gleichung (2).

$$
A_n\mathbf{v}^{(n)}=-\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix}v(x_0)-2v(x_1)+v(x_2)\\ v(x_1)-2v(x_2)+v(x_3)\\ \vdots \\ v(x_{n-3})-2v(x_{n-2})+v(x_{n-1})\\ v(x_{n-2})-2v(x_{n-1})+v(x_{n-0})\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}D_h v(x_1)\\ \vdots \\ D_h v(x_{n-1})\end{pmatrix}\xrightarrow{n\to\infty}-\mathbf{v}''
$$

Die Matrix A_n wurde in der Funktion `my_numpy_matrix` implementiert.

```python
def my_numpy_matrix(n):

    assert n >= 2

    h = 1/n

    a = -2 * np.ones(n-1)
    b = np.ones(n-2)

    A = np.diag(b, -1) + np.diag(a, 0) + np.diag(b, 1)
    A = -A/h**2

    return A
```

Das Eigenwertproblem wurde mit `np.linalg.eig`, für beliebige $n \geq 2$, gelöst. `np.linalg.eig` retourniert die Eigenwerte und Eigenvektoren nicht zwangsläufig, der größe der Eigenwerte nach, sortiert. Nachdem der Zusammenhang zwischen Eigenwert und Eigenvektor nicht verloren gehen soll, erfordert dies einigen logistischen Aufwand. Das ist aber nicht wesentlich und wird daher nicht weiter erklärt. Wir vergleichen lieber die Eigenwerte und Eigenvektoren mit den analytischen Ergebnissen.

In der folgenden Tabelle, sind die 3 Eigenwerte (sollten diese bereits existieren), der Matrizen $A_2, \ldots, A_{10}$, aufgelistet. Diese Tabelle ist analog zu (7) zu verstehen.

	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	8.0	9.0	9.372583	9.54915	9.646171	9.705051	9.743420	9.769795	9.788697
2	NaN	27.0	32.000000	34.54915	36.000000	36.897999	37.490332	37.900800	38.196601
3	NaN	NaN	54.627417	65.45085	72.000000	76.192948	79.016521	81.000000	82.442950

Die Matrix A_n besitzt also scheinbar $n-1$ paarweise verschiedene Eigenwerte $\lambda_{1,n} < \cdots < \lambda_{n-1,n}$, welche jeweils gegen $\lambda_i := (i\pi)^2$, $i \in \mathbb{N}$ konvergieren.

$$\begin{array}{ccccccccc} \lambda_{1,2} & \to & \lambda_{1,3} & \to & \cdots & \to & \lambda_{1,n} & \xrightarrow{n\to\infty} & \lambda_1 = (1\pi)^2 \\ & & \lambda_{2,3} & \to & \cdots & \to & \lambda_{2,n} & \xrightarrow{n\to\infty} & \lambda_2 = (2\pi)^2 \\ & & & & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & & & & \lambda_{i,n} & \xrightarrow[n\to\infty]{} & \lambda_i = (i\pi)^2 \end{array} \tag{7}$$

Nachdem $\left\{\sqrt{\lambda_i} : i \in \mathbb{N}_0\right\} = \pi\mathbb{N}_0 \subsetneq \pi\mathbb{Z}$, könnte man sich nun fragen, wo die andere Hälfte der analytischen Ergebnisse steckt. Die Erklärung ist ganz unspektakulär $\lambda := (\pm\kappa)^2$.

Wir bezeichnen mit $\epsilon_i(n) := |\lambda_i - \lambda_{i,n}|$, $i = 1, \ldots, n-1$ den absoluten Konvergenz-Fehler des i-ten Eigenwertes. In der folgenden Abbildung 10 wurde ϵ_i mit der Vergleich-Geraden id^2, doppelt logarithmisch, geplottet.

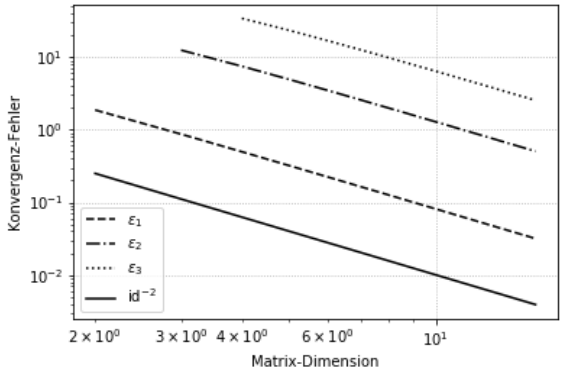
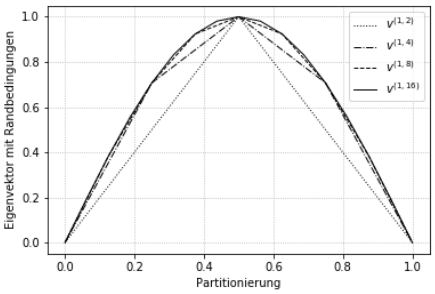


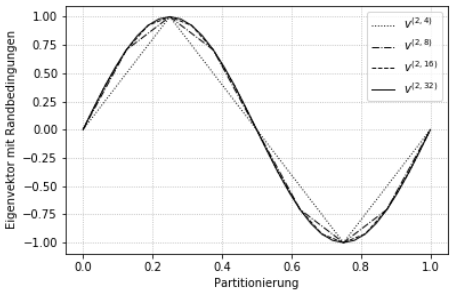
Abbildung 10: Konvergenz-Fehler der Eigenwerte von A_n

Allem Anschein nach, verschwindet ϵ_i quadratisch. Das korreliert mit dem Ergebnis (6). Man beachte, dass der i-te Eigenwert erst ab einer Matrix A_n, $n > i$ existiert. Daher fangen die Plots von ϵ_i desto später an, je größer i ist. Für größeres i ist auch der intitiale Fehler größer. Obwohl dieser ebenfalls quadratisch konvergiert, werden mehr Rechenoperationen für ein genaues Ergebnis benötigt.

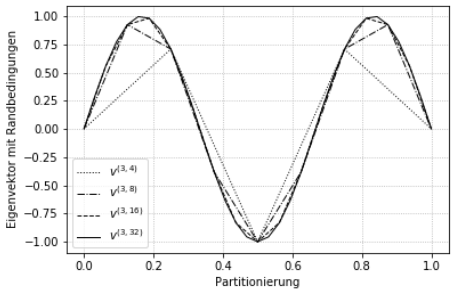
Seien $\mathbf{v}^{(1,n)}, \ldots, \mathbf{v}^{(n-1,n)}$ die Eigenvektoren (modulo Konstante), zu den Eigenwerten $\lambda_{1,n} < \cdots < \lambda_{n-1,n}$, der Matrix A_n. Diese sollten nun gegen die Funktionen v_{κ_i}, $\kappa_i = \sqrt{\lambda_i}$, vielleicht sogar quadratisch, konvergieren. Folgende Abbildungen sollen dies veranschaulichen.



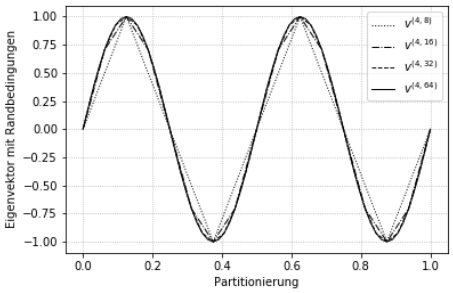
(a) Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(1,n)}$, $n = 2, 4, 8, 32$



(b) Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(2,n)}$, $n = 4, 8, 16, 64$



(c) Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(3,n)}$, $n = 8, 16, 32, 64$



(d) Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(4,n)}$, $n = 8, 16, 32, 64$

Abbildung 11: Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(i,n)}$, $i = 1, \ldots, 4$ der Matrizen A_n

Erstaunlicherweise, gibt es scheinbar keinen Konvergenz-Fehler, da die Eigenvektoren direkt an den Grenzfunktionen liegen. Mit anderen Worten, $\forall\, n \in \mathbb{N}, \forall\, i, j = 1, \dots n-1$:

$$\mathbf{v}_j^{(i,n)} = v_{\kappa_i}(x_j).$$

Anschaulich, erhält man ein zu (7) analoges Schema (8).

$$\begin{array}{ccccccccc} \mathbf{v}^{(1,2)} & \to & \mathbf{v}^{(1,3)} & \to & \cdots & \to & \mathbf{v}^{(1,n)} & \xrightarrow{n\to\infty} & v_{\kappa_1} \\ & & \mathbf{v}^{(2,3)} & \to & \cdots & \to & \mathbf{v}^{(2,n)} & \xrightarrow{n\to\infty} & v_{\kappa_2} \\ & & & & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & & & & \mathbf{v}^{(i,n)} & \xrightarrow[n\to\infty]{} & v_{\kappa_i} \end{array} \tag{8}$$

2.4 Verallgemeinerte Problembeschreibung

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit c in (1) hängt vom Material der Saite ab. Bisher haben wir sie als konstant angenommen, d.h. die Saite bestand aus einem Material. Sei nun für $c_0, c_1 \in \mathbb{R}$

$$c(x) := \begin{cases} c_0, x \in (0, 1/2) \\ c_1, x \in (1/2, 1) \end{cases} \quad . \tag{9}$$

2.5 Verallgemeinerte Analytische Lösung

Zuerst leiten wir eine zur Helmholz-Gleichung (2) ähnliche Gleichung her und geben einen (4) entsprechenden Lösungsansatz an, wenn die Lösung v auf $(0, 1)$ stetig differenzierbar sein soll. Dabei betrachten wir eine angepasste Version der Wellengleichung (1).

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = \frac{1}{c^2(x)} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t, x), \qquad x \in (0, 1), \qquad t \in \mathbb{R}$$

Wir verwenden jedoch den selben Ansatz, wie Vorher. Das war $u(x, t) = \Re(v(x)e^{-i\omega t})$, mit einer festen, aber unbekannten Kreisfrequenz $\omega > 0$ und einer Funktion v, welche nur noch vom Ort x abhängt.

Einsetzen und analoges Nachrechnen, gibt, mit der unbekannten Wellenzahl $\kappa(x) := \frac{\omega}{c(x)}$, die Randbedingungen (3) und

$$-\mathbf{v}''(x) = \kappa^2(x)v(x), \qquad x \in (0, 1).$$

Um Probleme mit der Differenzierbarkeit von κ zu vermeiden, führen wir die Abkürzungen $\kappa_0 := \frac{\omega}{c_0}$, $\kappa_1 := \frac{\omega}{c_1}$ ein, und definieren den Lösungsansatz durch Fallunterscheidung und mit (vorerst) beliebigen Konstanten $C_{01}, C_{02}, C_{11}, C_{12}$.

$$v(x) := \begin{cases} C_{01} \cos(\kappa_0 x) + C_{02} \sin(\kappa_0 x), & x \in (0, 1/2) \\ C_{11} \cos(\kappa_1 x) + C_{12} \sin(\kappa_1 x), & x \in (1/2, 1) \end{cases}$$

Durch Berücksichtigung der Randbedingungen (3), erhält man (fast analog zu Vorher)

$$C_{01} = 0, \qquad C_{11} \cos(\kappa_1) + C_{12} \sin(\kappa_1) = 0.$$

Soll v auf $1/2$ stetig fortgesetzt werden, so müssen dessen links- und rechts-seitiger Grenzwert übereinstimmen.

$$C_{02}\sin(\kappa_0/2) = \lim_{x\to 1/2-} v(x) = \lim_{x\to 1/2+} v(x) = C_{11}\cos(\kappa_1/2) + C_{12}\sin(\kappa_1/2)$$

Um stetige Differenzierbarkeit zu erhalten, muss auch die Ableitung

$$\mathbf{v}'(x) = \begin{cases} C_{02}\kappa_0\cos(\kappa_0 x), & x \in (0, 1/2) \\ -C_{11}\kappa_1\sin(\kappa_1 x) + C_{12}\kappa_1\cos(\kappa_1 x), & x \in (1/2, 1) \end{cases}$$

auf $1/2$ stetig fortgesetzt werden.

$$C_{02}\kappa_0\cos(\kappa_0/2) = \lim_{x\to 1/2-} \mathbf{v}'(x) = \lim_{x\to 1/2+} \mathbf{v}'(x) = -C_{11}\kappa_1\sin(\kappa_1/2) + C_{12}\kappa_1\cos(\kappa_1/2)$$

Aus den Randbedingungen und stetigen Fortsetzungen, ergibt sich also das homogene lineare Gleichungssystem $R\mathbf{C} = 0$, mit

$$R := \begin{pmatrix} \sin(\kappa_0/2) & -\cos(\kappa_1/2) & -\sin(\kappa_1/2) \\ \kappa_0\cos(\kappa_0/2) & \kappa_1\sin(\kappa_1/2) & -\kappa_1\cos(\kappa_1/2) \\ 0 & \cos\kappa_1 & \sin\kappa_1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3}, \qquad \mathbf{C} := \begin{pmatrix} C_{02} \\ C_{11} \\ C_{12} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 1}.$$

Sei $R \in \mathrm{GL}_3(\mathbb{R})$ regulär, so ist deren Kern trivial, d.h. $\ker R = \{0\}$, und somit auch die Lösung $\mathbf{C} = 0$. Dieser Trivialfall wurde jedoch vorhin bereits ausgeschlossen. Darum betrachten wir $\det R = 0$. Mit SymPy berechnet man

$$\begin{aligned} \det R &= \sin\left(\frac{\kappa_0}{2}\right)\cos\left(\frac{\kappa_1}{2}\right)\kappa_1 + \sin\left(\frac{\kappa_1}{2}\right)\cos\left(\frac{\kappa_0}{2}\right)\kappa_0 \\ &= \sin\left(\frac{\omega}{2c_0}\right)\cos\left(\frac{\omega}{2c_1}\right)\frac{\omega}{c_1} + \sin\left(\frac{\omega}{2c_1}\right)\cos\left(\frac{\omega}{2c_0}\right)\frac{\omega}{c_0} =: f_c(\omega) \end{aligned} \tag{10}$$

Für feste c_0, c_1, lässt sich das gewünschte ω, als (nicht eindeutige) Nullstelle dieser Funktion f_c, charakterisieren.

2.6 Verallgemeinerte Semi-Analytische Lösung

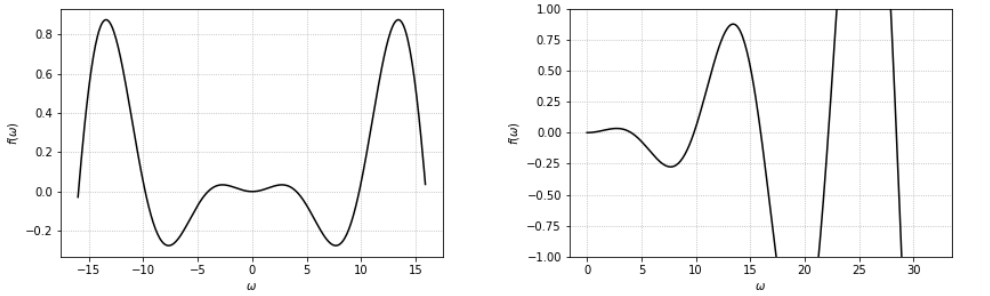
Das Ergebnis aus (10) wurde, in Form von folgender Funktion, implementiert.

```
# c ... pair of propagation speeds

def get_zero_function(c):

    # allocate some sympy symbols:
    omega = sp.Symbol('\omega')
    kappa = sp.IndexedBase('\kappa')

    # implement the matrix R (properly):
    R = sp.Matrix([[ sp.sin(kappa[0]/2),  kappa[0]*sp.cos(kappa[0]/2), 0],
                   [-sp.cos(kappa[1]/2),  kappa[1]*sp.sin(kappa[1]/2), sp.cos(kappa[1])],
                   [-sp.sin(kappa[1]/2), -kappa[1]*sp.cos(kappa[1]/2), sp.sin(kappa[1])]])
    R = R.T

    # calculate R's determinant (properly):
    det = sp.det(R)
```

```
    det = sp.simplify(det)

    # substitute for kappa_0 and kappa_1:
    kappa_0 = omega/c[0]
    kappa_1 = omega/c[1]
    substitution = {kappa[0]: kappa_0, kappa[1]: kappa_1}
    det = det.subs(substitution)

    # transform expression det into proper numpy function:
    zero_function = sp.lambdify(omega, det, 'numpy')

    return zero_function
```

Nun können wir f_c für fixe c_0, c_1 plotten lassen. Dann bekommen wir ein besseres Verständnis dafür, welchen Startwert wir wählen sollen, um die Gleichung $f_c(\omega) = 0$, mit `scipy.optimize.fsolve` lösen zu lassen.

Für die folgenden Plots in Abbildung 12, wurden die arbiträren Werte $c_0 = 100$, $c_1 = 1$ gewählt. Die davon abhängige Funktion f_c ist scheinbar gerade. Das liegt an (10), sowie dass cos gerade und sin ungerade ist.



(a) auf dem Intervall $(-16, 16)$ (b) auf dem Intervall $(0, 30)$ und herangezoomt

Abbildung 12: Plots von f_c für $c_0 = 100$, $c_1 = 1$

Dementsprechend, können passende Startwerte $\tilde{\omega}$ für iterative Verfahren gewählt werden. Die jeweils ersten Ergebnisse ω vom, bereits erwähnten, `scipy.optimize.fsolve` sind in der folgenden Tabelle. Die Quadrate ω^2 dieser Ergebnisse sind Approximationen der Grenzwerte der Eigenwerte, die wir im nächsten Unterkapitel betrachten.

	1	2	3	4	5	6
$\tilde{\omega}$	5.000000	10.000000	15.000000	20.000000	25.000000	30.000000
ω	4.057425	9.826058	15.956815	22.170349	15.956815	28.413934
ω^2	16.462695	96.551423	254.619961	491.524375	254.619961	807.351663

2.7 Verallgemeinertes Eigenwertproblem

Wir wollen nun den Differenzenquotienten $D_h v(x_j)$ verwenden, um ein verallgemeintertes Eigenwertproblem der Form $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ mit Matrizen $A, B \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ herzuleiten.

Sei abermals $x_j := jh$, $j = 0, \ldots, n$ unsere Zerlegung des Intervalls $[0, 1]$ mit äquidistanter Schrittweite $h = 1/n$. Die Matrix $-A_n$, für den Differenzenquotienten $D_h v(x_j)$, und der Vektor $\mathbf{v}^{(n)} := (v(x_1), \ldots, v(x_{n-1}))^T$,

bleiben ebenfalls nach wie vor so, wie sie waren.

$B_n\lambda$ soll nun, analog zu Vorher, κ^2 repräsentieren. Diesmal, ist κ jedoch als (stückweise konstante) Funktion zu verstehen. Also wird die Matrix B_n deren Fallunterscheidungen übernehmen und λ konstant bleiben. Es läuft darauf hinaus, dass

$$B_n := \begin{cases} \operatorname{diag}^{-2}(c_0, \ldots, c_0, c_1, \ldots, c_1,), & n-1 \in 2\mathbb{N} \\ \operatorname{diag}^{-2}(c_0, \ldots, c_0, \frac{c_0+c_1}{2}, c_1, \ldots, c_1,), & n-1 \in 2\mathbb{N}+1 \end{cases}, \qquad \lambda := \omega^2,$$

wobei c_0, c_1 in $B_n \in \mathrm{GL}_{n-1}(\mathbb{R})$ jeweils $\left\lfloor \frac{n-1}{2} \right\rfloor$-mal vorkommen. Dabei sei vorausgesetzt, dass $c_0, c_1 \neq 0$ und $c_0 + c_1 \neq 0$. Die Wahl von B_n lässt sich wie folgt begründen.

Seien $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ Vektoren mit gleich vielen Komponenten. Dann ist die Matrix-Vektor-Multiplikation $\cdot$, mit einer erzeugten Diagonalmatrix, äquivalent zur komponentenweisen Multiplikaiton $\odot$.

$$\operatorname{diag}(\mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \odot \mathbf{b} = \mathbf{b} \odot \mathbf{a} = \operatorname{diag}(\mathbf{b}) \cdot \mathbf{a} \tag{11}$$

Bei dem vorherigen Eigenwertproblem wäre B_n als Einheits-Matrix I_n zu interpretieren. Der Eigenwert λ konnte gleich ganz κ^2 approximieren, weil dieser Wert konstant war. Man hätte aber freilich auch mit der Skalarmatrix $(I_n c)^{-2}$ und ω^2 anstelle von κ^2 arbeiten können. Da κ^2 nun aber, als Funktion, zwei unterschiedliche Werte

$$\left(\frac{\omega}{c_0}\right)^2, \left(\frac{\omega}{c_1}\right)^2$$

annehmen kann, müssen wir die obere Eigenschaft (11) von Diagonalmatrizen ausnutzen. Damit realisieren wir die Fallunterscheidung zwischen $x_j < 1/2$ und $x_j > 1/2$. Für $x_j = 1/2$, was genau bei $n-1 \in 2\mathbb{N}$ auftritt, wird gemittelt.

Nachdem die Inverse einer Diagonalmatrix genau die Matrix selbst mit komponentenweise Kehrwerten ist, lassen sich gleich B_n und B_n^{-1} leicht implementieren. Die zuständigen Funktionen besitzen die kreativen Namen `my_other_numpy_matrix` bzw. `my_other_numpy_matrix_inverse`.

```
def my_other_numpy_matrix_inverse(n, c):

    times = np.floor((n-1)/2)
    times = int(times)

    lower = [c[0]]*times
    upper = [c[1]]*times

    middle = [(c[0] + c[1])/2]

    if n%2 != 0:
        B_inverse = np.diag(lower + upper)**2
        return B_inverse
    else:
        B_inverse = np.diag(lower + middle + upper)**2
        return B_inverse

def my_other_numpy_matrix(n, c):
    return 1/my_other_numpy_matrix_inverse(n, c)
```

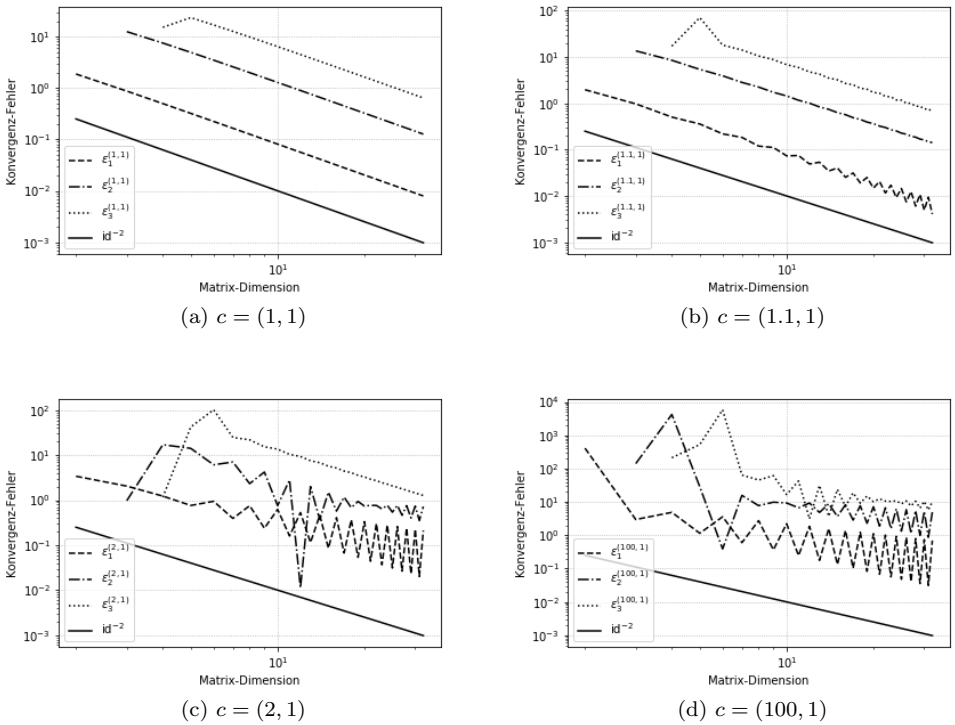
Das verallgemeinerte Eigenwertproblem $A_n\mathbf{v} = \lambda B_n\mathbf{v}$ werden wir zunächst auf $B_n^{-1}A_n\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ umformulieren. Dieses kann nun ebenfalls mit `np.linalg.eig`, für beliebige $n \geq 2$, gelöst werden.

Die Matrix $B_n^{-1}A_n$ besitzt hoffentilch wieder $n-1$ paarweise verschiedene Eigenwerte $\lambda_{1,n}^c < \cdots < \lambda_{n-1,n}^c$, die jeweils konvergieren.

Um einen ersten Eindruck des möglichen Konvergenz-Verhaltens zu bekommen, vergleichen wir die Eigenwerte mit den oberen semi-analytischen Ergebnissen mit $c_0 = 100$, $c_1 = 1$. Es folgt eine zur oberen analoge Tabelle mit Eigenwerten. Die Ergebnisse lassen zwar zu wünschen übrig, aber immerhin pendelt sich die Größenordnung rasch ein.

	2	3	4	5	6
1	20402.0	13.499662	21.329378	15.313793	20.048572
2	NaN	180004.500338	56813.374144	68.017688	96.940091
3	NaN	NaN	344805.296478	250012.501563	102552.962302
4	NaN	NaN	NaN	750004.166956	422576.319931

Wir bezeichnen (optimistischerweise) mit $\epsilon_i^c(n) := |\lambda_i^c - \lambda_{i,n}^c|$, $i = 1, \ldots, n-1$ den absoluten Konvergenz-Fehler des i-ten Eigenwertes. λ_i^c erhalten wir durch ω^2 von `scipy.optimize.fsolve`, wobei $\tilde{\omega} := \sqrt{\lambda_{i,n}^c}$ als Startwert für das iterative Verfahren gewählt wird. Theoretisch hängt λ_i^c also noch von n ab. In der folgenden Abbildung 13 wurde ϵ_i^c mit der Vergleich-Geraden id^2, doppelt logarithmisch, geplottet.

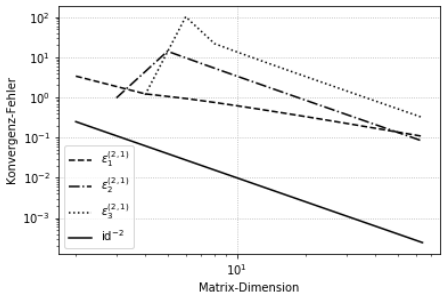


(a) $c = (1, 1)$ (b) $c = (1.1, 1)$

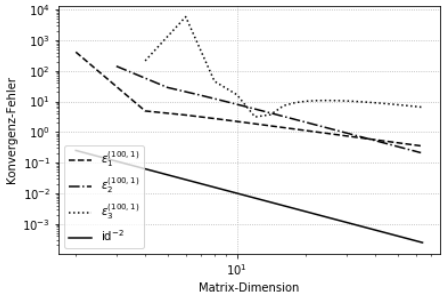
(c) $c = (2, 1)$ (d) $c = (100, 1)$

Abbildung 13: Konvergenz-Fehler der Eigenwerte von $B_n^{-1}A_n$, für $n = 2, \ldots, 32$ und

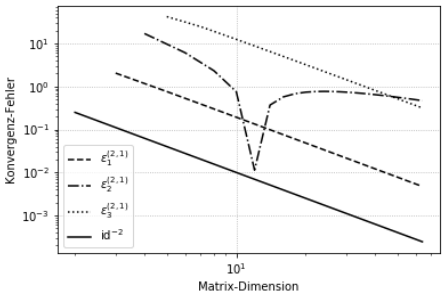
Es macht Sinn, dass Abbildung 13a mit Abbildung 10 korreliert. Diese „Bergsteiger-Konvergenz“ steigt anscheinend mit dem Verhältnis c_0/c_1 (no pun intended). Etwas Aufschlussreicher werden 13c und 13d, wenn man gerade und ungerade n unterscheidet. Diese Abbildung 13 bleibt übrigens unverändert, wenn man die Komponenten von c vertauscht.



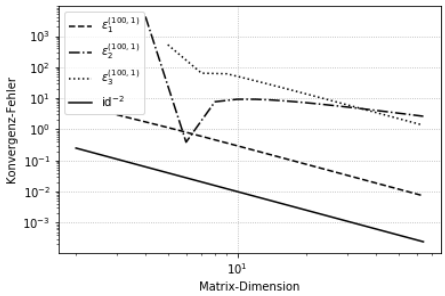
(a) $c = (2, 1)$, $n \in 2\mathbb{N}$



(b) $c = (100, 1)$, $n \in 2\mathbb{N}$



(c) $c = (2, 1)$, $n \in 2\mathbb{N} + 1$



(d) $c = (100, 1)$, $n \in 2\mathbb{N} + 1$

Abbildung 14: Konvergenz-Fehler der Eigenwerte von $B_n^{-1}A_n$, für $n = 2, \dots, 64$ und

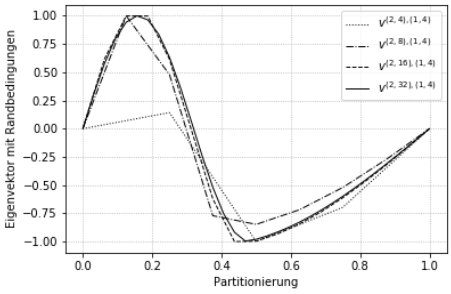
Wenn man für $c = (100, 1)$ gerade und ungerade betrachtet, so bemerkt man, dass $\epsilon_2^{(100,1)}$ bei Abbildung 14b konvergiert und $\epsilon_1^{(100,1)}, \epsilon_3^{(100,1)}$ bei Abbildung 14d. Dies lässt vermuten, dass im Allgemeinen die besten Approximationsstrategie ist, Teifolgen zu betrachten.

$$\text{Benutze } \begin{cases} (\lambda_{i,n}^c)_{n\in 2\mathbb{N}} & \text{für } i \in 2\mathbb{N}, \\ (\lambda_{i,n}^c)_{n\in 2\mathbb{N}+1} & \text{für } i \in 2\mathbb{N}+1. \end{cases}$$

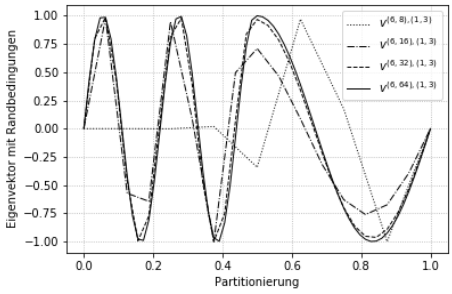
Seien $\mathbf{v}^{(1,n),c}, \dots, \mathbf{v}^{(n-1,n),c}$ die Eigenvektoren (modulo Konstante), zu den Eigenwerten $\lambda_{1,n}^c < \cdots < \lambda_{n-1,n}^c$, der Matrix $B_n^{-1}A_n$. Wir antizipieren ein weniger schönes Konvergenz-Verhalten, als das der Eigenvektoren der Matrizen $(A_n)_{n\in\mathbb{N}}$. Dennoch wurden die Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(i,n_i),c}$, normiert bzgl. $\|\cdot\|_\infty$, geplottet, wobei

$$\begin{aligned} &c_{\max} = 4, && c \in \{(c_0, c_1) : c_0, c_1 = 1, \dots, c_{\max}\}, \\ &i = 1, \dots, 2c_{\max}, && n_i \in \left\{2^{p_{\min}+p_{\text{add}}} : p_{\min} = \lceil \log_2(i+1) \rceil,\ p_{\text{add}} = 0, \dots, 3\right\} =: N_i. \end{aligned}$$

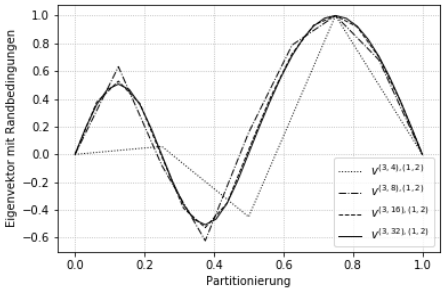
Dabei wurden die Vektoren $\left\{\mathbf{v}^{(i,n),c} : n \in N_i\right\}$ jeweils zu einem Bild zusammengefasst. Nachdem wir dadurch auf 128 Bilder kommen, werden wir nicht alle herzeigen. Außerdem, sieht nur ein Bruchteil davon „schön“ aus.



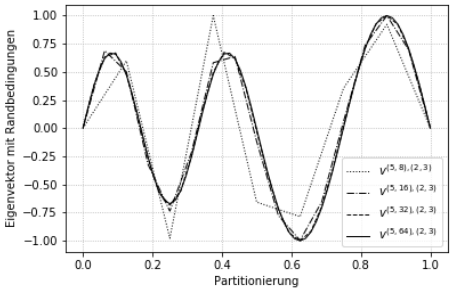
(a) mit $i = 2$, $n = 4, 8, 16, 32$, und $c = (1, 4)$



(b) mit $i = 6$, $n = 8, 16, 32, 64$, und $c = (1, 3)$



(c) mit $i = 3$, $n = 4, 8, 16, 32$, und $c = (1, 2)$



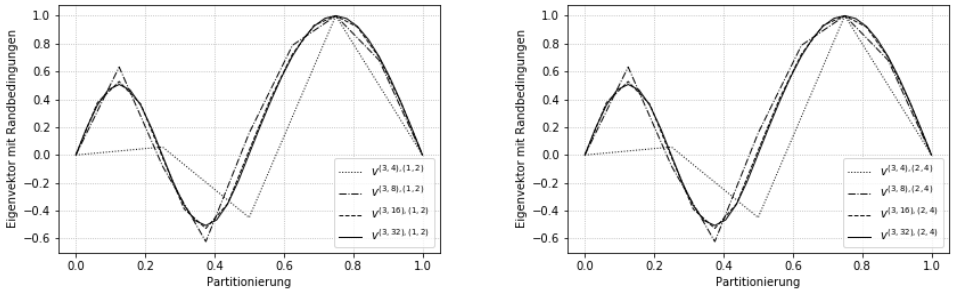
(d) mit $i = 5$, $n = 8, 16, 32, 64$, und $c = (2, 3)$

Abbildung 15: Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(i,n),c}$ der Matrizen $B_n^{-1} A_n$

Mit „schön“ ist gemeint, dass die Grenzfunktionen bzgl. n der Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(i,n),c}$ seinen letzte (halbe) Schwingungs-Periode vollenden kann, bevor die nächste Ausbreitungsgeschwindigkeit übernimmt. Mit anderen Worten, die beiden Funktionshälften treffen sich an der x-Achse. Man fragt sich nun vielleicht, für welche Ausbreitungsgeschwindigkeiten c und Eigenpaar-Nummerierung i diese Grenzfunktionen „schön“ aussehen.

Dazu bemerken wir zuerst, dass die selben Plots herauskommen, wenn $c^{(1)}, c^{(2)}$ bis auf eine Konstante übereinstimmen. Wegen der Normierung bzgl. $\|\cdot\|_\infty$, sieht man das durch hinschauen (auf $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$), also eigentilch auch bereits a priori.

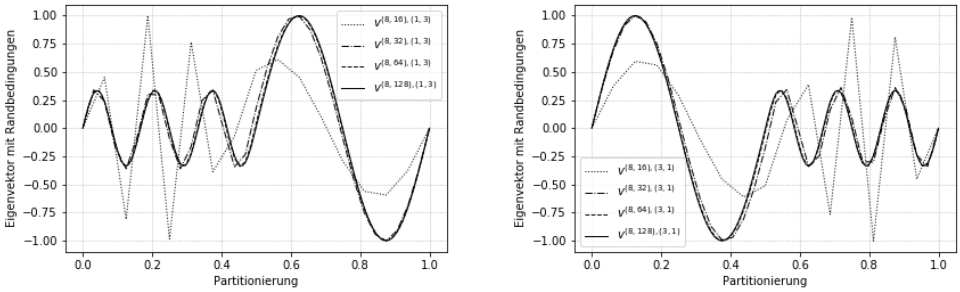
$$\mathbf{v}^{(i,n),c^{(1)}} = \mathbf{v}^{(i,n),c^{(2)}}, \text{ für } c^{(1)} \equiv c^{(2)} \bmod \text{Konstante}.$$



(a) $c = (1, 2)$ (b) $c = (2, 4)$

Abbildung 16: Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(3,n),c}$ der Matrizen $B_n^{-1}A_n$, mit $n = 8, 16, 32, 64$ und

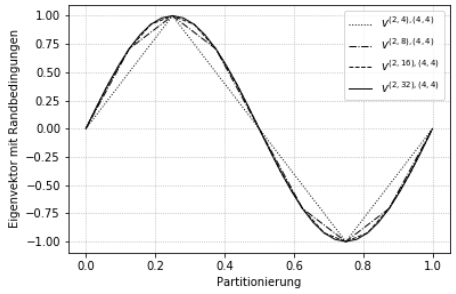
A posteriori hingegen, bemerken wir, dass zwei Plots mit (c_0, c_1) bzw. (c_1, c_0) auch graphisch zusammenhängen. Die erste und zweite Hälft der Grenzfunktionen tauschen, wenn man zwischen den Plots wechselt.



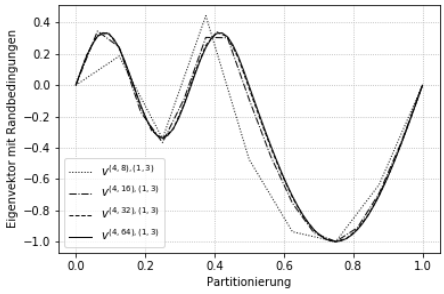
(a) $c = (1, 3)$ (b) $c = (3, 1)$

Abbildung 17: Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(8,n),c}$ der Matrizen $B_n^{-1}A_n$, mit $n = 16, 32, 64, 128$ und

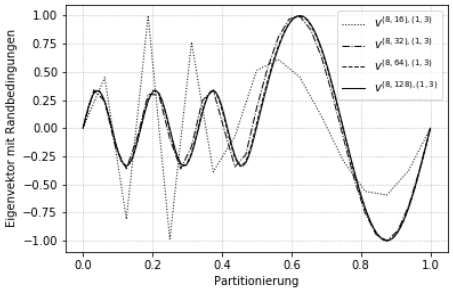
Es sticht aber noch etwas Anderes ins Auge. Wenn man irgendeinen dieser Plots betrachtet, dann geht die Grenzfunktion genau dann durch den ausgezeichneten Punkt $(1/2, 0)$, wenn $\tilde{c_0} + \tilde{c_1} \,|\, i$, wobei $\tilde{c_0} : \tilde{c_1} = c_0 : c_1$ und $\tilde{c}$ vollständig gekürzt ist.



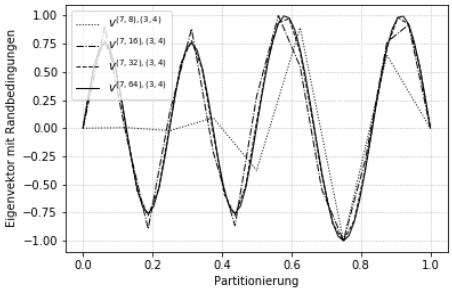
(a) mit $i = 2$, $n = 4, 8, 16, 32$, und $c = (4, 4)$



(b) mit $i = 4$, $n = 8, 16, 32, 64$, und $c = (1, 3)$



(c) mit $i = 8$, $n = 8, 16, 32, 64$, und $c = (1, 3)$



(d) mit $i = 7$, $n = 8, 16, 32, 64$, und $c = (3, 4)$

Abbildung 18: Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(i,n),c}$ der Matrizen $B_n^{-1}A_n$

Das kann man heuristisch so begründen, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeiten c, gemeinsam mit i, für die relativen Anzahlen der Schwingungsperioden verantwortlich sind; d.h, diese stehen diese im reziproken Verhältnis zu einander. Für $i = 4$, $c = (1, 3)$ aus Abbildung 18b zum Beispiel, schwingt die erste Hälfte doppelt so schnell, wie die zweite. Dasselbe geschieht für $i = 8$, wobei die Grenzfunktion als Ganzes doppelt so schnell schwingt, wie bei $i = 4$. Durch dieses Zwischenspiel von c und i, finden wir die meisten „schönen“ Funktionen.

Was ist aber mit dem „künstlich verallgemeinerten“ Fall $c = (1, 1) = \cdots = (c_{\max}, c_{\max})$, $i \in \mathbb{N} - 1$? Wieso sieht der so „schön“ aus? Um eine Erklärung zu finden, verallgemeinern wir fröhlich weiter und betrachten die Material-Funktion $c = (c_0, \ldots, c_m) \in (\mathbb{Q}^+)^{m+1}$, wobei diese, analog zu (9), bzgl. $1/(m + 1)$ äquidistant zu verstehen ist.

$$c(x) := \begin{cases} c_0, & x \in (0, 1/(m+1)) \\ \vdots & \vdots \\ c_m, & x \in (m/(m+1), 1) \end{cases}$$

Wir stellen fest, dass sich die naheliegende Verallgemeinerung der oberen Regel für diese Fälle gilt. Die Grenzfunktion geht genau dann durch die ausgezeichneten äquidistanten Punkte $\{k/(m + 1)\}_{k=0}^{m+1}$, wenn $|\tilde{c}| := \tilde{c_0} + \cdots + \tilde{c_m} \mid i$, wobei $\tilde{c_0} : \cdots : \tilde{c_m} = c_0 : \cdots : c_m$ und $\tilde{c}$ als Ganzes vollständig gekürzt ist.

Tatsächlich gibt es im „künstlich verallgemeinerten“ Fall mit beliebigem i ein m, sodass für $c \in (\mathbb{Q}^+)^{m+1}$ gilt $|\tilde{c}| = m + 1 \mid i$. Dieser Fall liefert übrigens, wegen der bereits angesprochenen Skalarmatrix, immer dasselbe Resultat.

2.8 Vektor-Iteration

Sei $\rho > 0$. Wir Verwenden die Vektor-Iteration angewendet auf das Eigenwertproblem

$$(A - \rho B)^{-1} B\tilde{\mathbf{v}} = \mu\tilde{\mathbf{v}} \tag{12}$$

mit den Matrizen A und B aus dem vorigen Unterkapitel.

Das macht man, weil die Vektor-Iteration in ihrer einfachsten Form, `vector_iteration_simple`, nur den Eigenvektor mit dem betragsgrößten Eigenwert liefert.

```
# m ... number of iterations

def vector_iteration_simple(M, m):

    # some random (non zero) vector
    randy = np.random.rand(M.shape[0])
    # normalize
    randy = randy/np.linalg.norm(randy)

    for _ in range(m):

        # apply matrix
        randy = M @ randy
        # normalize
        randy = randy/np.linalg.norm(randy)

    return randy
```

Es besteht ein Zusammenhang zwischen den Eigenpaaren $(\mu, \tilde{\mathbf{v}})$ und den Eigenpaaren $(\lambda, \mathbf{v})$ aus der vorigen Aufgabe. Für $\mu \neq 0$, ist dieser $\lambda = \rho + \frac{1}{\mu}$, weil dann

$$A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v} \Leftrightarrow A\mathbf{v} = \left(\rho + \frac{1}{\mu}\right) B\mathbf{v} \Leftrightarrow B\mathbf{v} = \mu(A - \rho B)\mathbf{v} \Leftrightarrow (A - \rho B)^{-1} B\mathbf{v} = \mu\mathbf{v}.$$

Bei der Vektor-Iteration wird der potentielle Eigenvektor $\mathbf{v}$ ständig normiert. Damit kann man wegen $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ sehr rasch auf den zugehörigen Eigenwert λ kommen.

$$\langle A\mathbf{v}, \mathbf{v}\rangle = \langle \lambda\mathbf{v}, \mathbf{v}\rangle = \lambda\|\mathbf{v}\|^2 = \lambda$$

Jetzt können wir auch ein schlauereres Abbruch-Kriterium wählen. Die Vektor-Iteration soll terminieren, wenn die Änderung der Eigenwerte hinreichend klein ist. Die Implementierung, die diese Überlegungen beherzigt, folgt mit `vector_iteration_unshifted`.

```
def vector_iteration_unshifted(M, tol):

    # some random (non zero) vector
    randy = np.random.rand(M.shape[0])
    # normalize
    randy = randy/np.linalg.norm(randy)

    # stop iteration when differences are small enough
    eigen_randy_old = -tol
    eigen_randy_new = tol

```

```
    while abs(eigen_randy_old - eigen_randy_new) > tol:

        # get eigen values of randy
        eigen_randy_old = np.dot(M @ randy, randy)

        # apply matrix
        randy = M @ randy
        # normalize
        randy = randy/np.linalg.norm(randy)

        # get eigen values of randy
        eigen_randy_new = np.dot(M @ randy, randy)

    # use best approximation of eigen value
    eigen_randy = eigen_randy_new

    # get eigen pair
    eigen_pair = (eigen_randy, randy)

    return eigen_pair
```

Die untere Implementierung, `vector_iteration_shifted`, der Vektor-Iteration des geshifteten Eigenwertproblems (12), ist ein gutes Beispiel eines sinnvollen Einsatzes der LU-Zerlegung. Diese ist zwar aufwändig, aber nachdem sie in jedem Iterationsschritt verwendet werden kann, zahlt sich dieser einmalige Aufwand aus.

```
from scipy.linalg import lu, solve_triangular

def vector_iteration_shifted(n, c, rho, tol):

    # some random (non zero) vector
    randy = np.random.rand(n-1)
    # normalize
    randy = randy/np.linalg.norm(randy)

    # get matrices
    A = my_numpy_matrix(n)
    B = my_other_numpy_matrix(n, c)
    B_inverse = my_other_numpy_matrix_inverse(n, c)
    B_inverse_A = B_inverse @ A

    # calculate lu-decomposition and apply permutation matrix
    M = A - rho*B
    P, L, U = lu(M)

    # used to get eigen value of randy
    M = np.linalg.inv(A - rho*B) @ B

    # stop iteration when differences are small enough
    eigen_randy_old = -tol
    eigen_randy_new = tol

    while abs(eigen_randy_old - eigen_randy_new) > tol:

        # get eigen values of randy
        eigen_randy_old = np.dot(M @ randy, randy)

        # apply first part of matrix to randy
        randy = P @ B @ randy

        # solve L @ forwards = randy via forwards substitution
        forwards  = solve_triangular(L, randy,    lower = True)
        # solve U @ backwards = forwards per backwards substitution
        backwards = solve_triangular(U, forwards, lower = False)
```

```
39
40          # apply second part of matrix to randy
41          randy = backwards
42          # normalize
43          randy = randy/np.linalg.norm(randy)
44
45          # get eigen values of randy
46          eigen_randy_new = np.dot(M @ randy, randy)
47
48      # use best approximation of eigen value
49      eigen_randy = eigen_randy_new
50
51      # get eigen pair of shifted problem
52      eigen_pair_shifted = (eigen_randy, randy)
53
54      # get eigen pair of unshifted problem
55      eigen_randy_unshifted = 1/eigen_randy + rho
56      eigen_pair_unshifted  = (eigen_randy_unshifted, randy)
57
58      return eigen_pair_shifted, eigen_pair_unshifted
```

Angenommen, wir wüssten bereits, dass all unsere Eigenwerte $\lambda^c_{1,n} < \cdots < \lambda^c_{n-1,n} \in \mathbb{R}^+$ reell und positiv sind. `vector_iteration_simple` liefert uns den Eigenvektor mit dem betragsgrößten Eigenwert und `vector_iteration_shifted` den Eigenvektor mit dem Eigenwert, der am nähesten bei ρ liegt. Nun können wir mit einer binären Suche, ähnlich zum Bisektionsverfahren, alle Eigenwerte finden und ein eigenes `np.linalg.eig` programmieren.

```
1  from timeit import default_timer as timer
2
3  def recursion(n, c, tol, eigen_pairs, bound_lower, bound_upper):
4
5      bound_middle = rho = (bound_lower + bound_upper)/2
6
7      print("searching for eigen pair with eigen value near", rho, "...")
8      start = timer()
9      eigen_pair_middle = vector_iteration_shifted(n, c, rho, tol)[1]
10     end = timer()
11     bound_middle = eigen_pair_middle[0]
12     print("found eigen value", bound_middle, "in", end-start, "seconds", "\n")
13
14     if abs(bound_middle - bound_lower) < 10 or bound_middle <= bound_lower:
15         print("bound_lower ~ bound_middle")
16         print(bound_lower, "~", bound_middle)
17         print("or")
18         print("bound_middle <= bound_lower")
19         print(bound_middle, "<=", bound_lower)
20         print("stopping persuit", "\n")
21         return False
22     if abs(bound_upper - bound_middle) < 10 or bound_upper <= bound_middle:
23         print("bound_middle ~ bound_upper")
24         print(bound_middle, "~", bound_upper)
25         print("or")
26         print("bound_upper <= bound_middle")
27         print(bound_upper, "<=", bound_middle)
28         print("stopping persuit", "\n")
29         return False
30
31     eigen_pairs.update([eigen_pair_middle])
32     print("eigen_pair_middle (new one) =", eigen_pair_middle, "\n")
33
34     if len(eigen_pairs) == n-1:
35         print("len(eigen_pairs) == n-1")
```

```
        print(len(eigen_pairs), "=", n-1)
        print("All eigen pairs found", "\n")
        return True

    print("repeating recursion with:")
    print("bound_lower =", bound_lower)
    print("bound_middle =", bound_middle, "\n")
    recursion(n, c, tol, eigen_pairs, bound_lower, bound_middle)

    if len(eigen_pairs) == n-1:
        print("len(eigen_pairs) == n-1")
        print(len(eigen_pairs), "=", n-1)
        print("All eigen pairs found", "\n")
        return True

    print("repeating recursion with:")
    print("bound_middle =", bound_middle)
    print("bound_upper =", bound_upper, "\n")
    recursion(n, c, tol, eigen_pairs, bound_middle, bound_upper)

    return True

def get_my_eigen_pairs_with_vector_iteration(n, c, tol):

    print("Starting search with n =", n, "...", "\n")

    B_inverse_A = my_general_numpy_matrix(n, c)
    eigen_pairs = {}

    rho = 0

    eigen_pair_upper = vector_iteration_unshifted(B_inverse_A, tol)
    bound_upper = eigen_pair_upper[0]

    eigen_pairs.update([eigen_pair_upper])
    print("eigen_pair_upper =", eigen_pair_upper, "\n")

    if len(eigen_pairs) == n-1:
        print("len(eigen_pairs) == n-1")
        print(len(eigen_pairs), "=", n-1)
        print("All eigen pairs found", "\n")
        return eigen_pairs

    eigen_pair_lower = vector_iteration_shifted(n, c, rho, tol)[1]
    bound_lower = eigen_pair_lower[0]

    eigen_pairs.update([eigen_pair_lower])
    print("eigen_pair_lower =", eigen_pair_lower, "\n")

    if len(eigen_pairs) == n-1:
        print("len(eigen_pairs) == n-1")
        print(len(eigen_pairs), "=", n-1)
        print("All eigen pairs found", "\n")
        return eigen_pairs


    print("bound_lower =", bound_lower)
    print("bound_upper =", bound_upper, "\n")
    recursion(n, c, tol, eigen_pairs, bound_lower, bound_upper)

    return eigen_pairs
```

Das Abbruch-Kriterium ist aber anscheinend noch immer suboptimal, weil die damit berechneten Eigenwerte, sogar für `tol = 1e-15`, nicht ganz denen von `np.linalg.eig` entsprechen.

	2	3	4	5	6
1	20402.0	13.499662	21.329378	15.313793	20.048572
2	NaN	180004.500338	56813.374137	68.003831	96.940090
3	NaN	NaN	344805.296478	180595.546136	102552.962297
4	NaN	NaN	NaN	750004.166956	392219.488916

Zum Vergleich, zeigen wir nochmal die Eigenwerte via `np.linalg.eig`. Betrachtet man die Eigenwerte $\lambda_{3,5}^{(100,1)}, \lambda_{4,6}^{(100,1)}$, so merkt man, dass Ungenauigkeiten beim vorletzten Eigenpaar, d.h. Eigenpaar mit betragsmäßig zweitgrößten Eigenwert, auftreten, wenn n groß ist. Offensichtlich, lässt sich diese Eigenwertsuche noch optimieren, das würde aber den Rahmen dieses Projektes sprengen.

	2	3	4	5	6
1	20402.0	13.499662	21.329378	15.313793	20.048572
2	NaN	180004.500338	56813.374144	68.017688	96.940091
3	NaN	NaN	344805.296478	250012.501563	102552.962302
4	NaN	NaN	NaN	750004.166956	422576.319931

Zuletzt, wollen wir noch wissen, ob die Eigenwerte unserer Matrix $B_n^{-1}A_n$ tatsächlich alle positiv und reell sind. Sonst wäre der Algorithmus ja, aus mathematische Sicht, wertlos. Eine Möglichkeit bietet die explizite Darstellung von Eigenpaaren von Tridiagonalmatrizen. Wir wissen aber, dass das Gewünschte genau dann gilt, wenn $B_n^{-1}A_n$ positiv definit ist. Das können wir mit dem Hauptminoren-Kriterium locker überprüfen.

$$A'_n := \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Zuerst berechnen wir die Determinante der Matrix A'_n. Dazu induzieren wir $\det(A'_n) = n$. Der Induktionsanfang, $n = 2, 3$, ist trivial. Für den Induktionsschritt muss man einmal nach der letzten Spalte und dann Zeile entwickeln (oder umgekehrt).

Nun gilt aber $A_n = \frac{1}{h^2}A'_n$ und $\det(B_n^{-1}) > 0$, da wir nur c_0, c_1 mit denselben Vorzeichen betrachten. Sont wäre die Matrix indefinit und es würden auch negative Eigenwerte auftreten, also negative Kreisfrequenz, was wir aber ausschließen. Weil die Determinante dieser Matrizen bloß das Produkt ihrer Komponenten ist, sind alle Hauptminoren unserer Matrizen positiv. Sie sind also tatsächlich positiv definit. Deren Produkt und Vielfaches A_n ist es also auch, weil

$$0 < \mathbf{x}^*A\mathbf{x}, \mathbf{x}^*B\mathbf{x} \Rightarrow 0 < \mathbf{x}^*A\mathbf{x}\mathbf{x}^*B\mathbf{x} = \mathbf{x}^*A\langle\mathbf{x},\mathbf{x}\rangle B\mathbf{x} = \mathbf{x}^*A\|\mathbf{x}\|^2B\mathbf{x} \Rightarrow 0 < \mathbf{x}^*AB\mathbf{x}.$$

3 Cholesky-Zerlegung schwachbesetzter Matrizen

3.1 Projektbeschreibung

Sei A eine symmetrische, positiv definite Matrix. Von einer *Cholesky-Zerlegung* der Matrix spricht man, wenn eine untere Dreiecksmatrix L vorliegt mit $A = LL^T$; die Matrix L und ihre Transponierte nennt man dann *Choleskyfaktoren* von A. Ziel dieses Projekts ist die Optimierung von Algorithmen zur Berechnung einer solchen Zerlegung für schwach besetzte Matrizen (*sparse matrices*).

3.2 Lösung linearer Gleichungssysteme mit Vorwärts- und Rückwärtssubstitution

Der Sinn dieser Zerlegung ist als Spezialfall einer LU-Zerlegung, dass sich das Problem $Ax = y$ auf die zwei Gleichungssysteme

$$Lz = y \quad \text{und} \quad L^T x = z$$

reduzieren lässt. Mit L bzw. L^T liegt nun eine untere bzw. obere Dreiecksmatrix vor, die wir bekannterweise mit Vorwärts- bzw. Rückwärtssubstitution effizient handhaben können. Diese effizienten Algorithmen zur Lösung linearer Gleichungssysteme wollen wir nun speziell für den Choleskyfaktor L implementieren. Da wir mit Python eine Programmiersprache nutzen, die Matrizen zeilenweise speichert, arbeiten wir auch mit dieser Art der Speicherung und nicht mit unteren Dreiecksmatrizen im Standardspaltenformat.

```
def vorw(L,b):
    n = len(b)

    x = np.zeros(n)

    for i in range(n):
        sum = 0
        for j in range(i):
            sum += L[i][j]*x[j]
        x[i] = (b[i]-sum)/L[i][i]
    return x
```

Listing 1: Vorwärtssubstitution

Die Rückwärtssubstitution bekommt in unserem Fall auch die untere Dreiecksmatrix L als Input, arbeitet dann allerdings mit der Tatsache, dass mit L^T eine obere Dreiecksmatrix vorliegt.

```
def rueckw(L,b):
    n = len(b)

    x = np.zeros(n)

    for i in [n-1-k for k in range(n)]:
        sum = 0
        for j in range(i,n):
            sum += L[j][i]*x[j]  ##L transponiert ist obere Dreiecksmatrix
        x[i] = (b[i]-sum)/L[i][i]

    return x
```

Listing 2: Rückwärtssubstitution

3.3 Berechnung der Cholesky-Zerlegung

3.3.1 Zwei Varianten der Zerlegung

Nun wollen wir für eine symmetrische, positiv definite Matrix A ihren Choleskyfaktor L berechnen. Hierfür stehen uns zwei Möglichkeiten zur Verfügung.

In der Vorlesung wurde ein Algorithmus in der folgenden Variante angegeben:

1 **for** $k = 1, ..., n$
2 $\quad L_{kk} = \sqrt{A_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} L_{kj}^2}$
3 $\quad$ **for** $i = k+1, ..., n$
4 $\quad\quad L_{ik} = (A_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} L_{ij} L_{kj})/L_{kk}.$

Diese Variante kann folgendermaßen implementiert werden, wobei die Summe $\sum_{j=1}^{k-1} L_{kj}^2$ aus Zeile 2 dem Skalarprodukt der k-ten Zeile der bisherigen Matrix L mit sich selbst entspricht:

```
1 def chol1(A):
2     n = len(A)
3     L = np.zeros((n,n))
4     for k in range(n):
5         L[k][k] = np.sqrt((A[k][k] - L[k]@L[k]))
6         for i in range(k+1,n):
7             L[i][k] = (A[i][k] - L[i]@L[k])/L[k][k]
8     return L
```

Listing 3: Zerlegung eintragsweise ohne Überschreiben

Eine zweite Möglichkeit für die Berechnung der Choleskyfaktoren ist folgende:

1 **for** $k = 1, ..., n$
2 $\quad A_{kk} = \sqrt{A_{kk}}$
3 $\quad$ **for** $i = k+1, ..., n$
4 $\quad\quad A_{ik} = A_{ik}/A_{kk}$
5 $\quad$ **for** $i = k+1, ..., n$
6 $\quad\quad$ **for** $j = i, ..., n$
7 $\quad\quad\quad A_{ji} = A_{ji} - A_{jk}A_{ik}.$

Dieser Algorithmus überschreibt den linken unteren Teil der Matrix A direkt mit ihrem Choleskyfaktor und agiert nur auf Spalten. Das ist so zu verstehen, dass die for-Schleife in Zeile 3-4 die Division der k-ten Spalte (unterhalb der Hauptdiagonale) durch den Eintrag A_{kk} ist. Auch die for-Schleife in Zeile 6-7 beschreibt, dass von der i-ten Spalte (unterhalb der Hauptdiagonale) die entsprechende k-te Spalte mal A_{ik} abgezogen wird.

```
1 def chol2(A):
2     n = len(A)
3     J = nuller(A)
4     for k in range(n):
5         A[k][k] = np.sqrt(A[k][k])
6         A[k+1:n,k] = A[k+1:n,k]/A[k][k]
7         for i in range(k+1,n):
8             A[i:,i] -= A[i,k]*A[i:,k]
9
10    for i in range(n):
11        for j in range(i+1,n):
12            A[i][j] = 0
13    return A
```

Listing 4: Zerlegung spaltenweise mit Überschreiben

Es bleibt noch zu zeigen, dass der zweite Algorithmus das Gleiche leistet wie der erste. Diese Äquivalenz zeigen wir mithilfe von Induktion für die Spalten $1, ..., n$ (die Zeilenangaben beziehen sich dabei auf den nummerierten Code):
Die erste Spalte wird im zweiten Algorithmus nur einmal verändert. Dabei wird der Eintrag A_{11} mit seiner Wurzel überschrieben und alle Einträge unter der Hauptdiagonale werden durch das neue A_{11} dividiert. Die gesamte erste Spalte von A entspricht also nun der ersten Spalte von L aus Algorithmus 1, da in diesem die Summen für $k = 1$ jeweils leer sind.
Betrachten wir nun eine beliebige Spalte $m \leq n$ und nehmen als Induktionsvoraussetzung an, dass für jedes $k < m$ die k-te Spalte schon der k-ten Spalte von L aus dem ersten Algorithmus entspricht (vor Anwendung auf die m-te Spalte). In jeder Schleife wird also von jedem Eintrag A_{jm} der m-ten Spalte $L_{jk}L_{mk}$ abgezogen (Zeile 7). Diese $m-1$ Subtraktionen entsprechen $-\sum_{k=1}^{m-1} L_{jk}L_{mk}$ bzw. speziell für $j = m$ der Summe $-\sum_{k=1}^{m-1} L_{mk}^2$ aus Zeile 4 bzw. 2 des ersten Algorithmus.
In der m-ten Schleife wird nun wieder das bis dahin berechnete Diagonalelement $A_{mm}^{(1)} = A_{mm} - \sum_{k=1}^{m-1} L_{mk}^2$ mit der Wurzel überschrieben und die jeweiligen $A_{jm}^{(1)}$ durch das neue, korrekte Diagonalelement geteilt. Nun entspricht also auch die m-te Spalte von A der m-ten Spalten des Choleskyfaktors.

3.3.2 Vergleich des Aufwands

Beim Vergleich der Effizienz beider Varianten stellt sich heraus, dass die erste Variante schneller ist. Würden wir mit Matrizen im Standardspaltenformat arbeiten, könnten wir uns eine verbesserte Effizienz durch die zweite Variante erwarten. Da uns aber wie bereits erwähnt mit Python zeilenweise gespeicherte Matrizen vorliegen, ist der Aufwand durch den Zugriff auf gesamte Spalten sogar größer.
Daher haben wir uns entschieden, das Projekt mit der ersten Variante der Cholesky-Zerlegung weiterzuführen.

3.4 Steigerung der Effizienz bei gegebenen Blockmatrizen

Unseren Code möchten wir nun testen, indem wir das Gleichungssystem $Mx = b$ für beliebige rechte Seiten b mittels Choleskyzerlegung lösen. Dabei sei $M \in \mathbb{R}^{n^2 \times n^2}$, $n \in \mathbb{N}$ eine Blockmatrix

$$M = \begin{pmatrix} A & B & & \mathbf{0} \\ B & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & B \\ \mathbf{0} & & B & A \end{pmatrix}$$

bestehend aus den Blöcken $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & -1 & 4 \end{pmatrix} \text{ und } B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Da M strikt diagonaldominant ist, ist sie auch positiv definit. Die Symmetrie ist offensichtlich.
Bei der Berechnung der Cholesky-Zerlegung der Matrix M sticht ein interessantes Muster ins Auge; für ein beliebiges $n \in \mathbb{N}$ ist der Choleskyfaktor L stets von folgender Bauart:

$$L = \begin{pmatrix} C & & & \mathbf{0} \\ * & * & & \\ & \ddots & \ddots & \\ \mathbf{0} & & * & * \end{pmatrix}$$

mit einer unteren Dreiecksmatrix $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$.
Das bedeutet, dass es in der ersten Spalte nur $n+1$ Einträge ungleich 0 gibt. Insbesondere hat das nur aus Nullern bestehende linke untere Dreieck eine Schenkellänge von $n^2 - n - 1$; für große n ist das der Großteil der gesamten Matrix. Wir beobachten, dass dieses Dreieck aus Nullern auch in der ursprünglichen Matrix M zu finden ist. Wir müssen diese Einträge also nicht mehr berechnen und können so die Effizienz des Algorithmus steigern.
In der folgenden effizienteren Variante der Cholesky-Zerlegung nutzen wir also aus, dass wir in jeder Spalte nur maximal n Einträge unter der Hauptdiagonale berechnen müssen (umgesetzt in der for-Schleife Zeile 7 und 8 – falls weniger als n Einträge unter der Hauptdiagonale vorhanden sind, wollen wir natürlich nur bis zum Ende der Matrix gehen).

```
1 def efficientCholBlock(n):
2     A = M(n)
3     L = np.zeros((n*n,n*n))
4     for k in range(n*n):
5         L[k][k] = np.sqrt((A[k][k] - L[k]@L[k]))
6         m = min(k+n,n*n-1)
7         for i in range(k+1,m+1):
8             L[i][k] = (A[i][k] - L[i]@L[k])/L[k][k]
9     return L
```

Listing 5: Effiziente Cholesky-Zerlegung der Blockmatrizen

Wie man der folgenden Tabelle entnehmen kann, wirkt sich der Verzicht auf die Berechnung der unnötigen Einträge stark auf die Effizienz des Algorithmus aus:

Tabelle 1: Vergleich des Aufwands beider Implementierungen

n	$\frac{\textbf{Aufwand verbesserter Algorithmus}}{\textbf{Aufwand allgemeiner Algorithmus}}$
4	0.895
8	0.339
16	0.122
32	0.059
64	0.031

Für $n = 64$, also eine Blockmatrix mit ca. 16 Millionen Einträgen, reduziert sich der Aufwand demnach um fast 97 Prozent.

3.5 Theoretische Überlegungen zu schwach besetzten Matrizen

Die obigen Beobachtungen lassen vermuten, dass im Allgemeinen schwach besetzte Matrizen auch schwach besetzte Choleskyfaktoren besitzen. Dies gilt nicht notwendigerweise, allerdings ist es in bestimmten Fällen möglich, die Besetzungsstruktur der Matrix auszunutzen, um den Aufwand der Zerlegung zu reduzieren. Als theoretische Grundlage dazu dient folgende Überlegung:

Lemma. *Sei A eine symmetrische, positiv definite Matrix und die untere Dreiecksmatrix L ihr Choleskyfaktor. Sei $J_i(A) := \min\{j : A_{ij} \neq 0\}$ der erste Spaltenindex einer Zeile, an dem A nicht Null ist. Dann ist $L_{ij} = 0$ für $j < J_i(A)$. In L bleiben also führende Nuller in Zeilen erhalten.*

Proof. Es gilt $A_{ij} = \sum_{k=1}^{j} L_{ik} L_{kj}^T = \sum_{k=1}^{j} L_{ik} L_{jk}$. Der Eintrag A_{ij} kann also als kanonisches Skalarprodukt der i-ten und j-ten Zeile von L interpretiert werden. A ist als positiv definite Matrix insbesondere regulär; aus dem Multiplikationssatz für Determinanten folgt sofort die Regularität von L und daraus die Tatsache, dass alle Diagonaleinträge von L ungleich Null sind. Wir zeigen nun $L_{ij} = 0$ für alle $j < J_i(A)$. Ist $j < J_i(A)$

und ist die Behauptung bereits für alle $k < j$ erfüllt, so gilt

$$0 = A_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik}L_{jk} + L_{ij}L_{jj} = 0 + L_{ij}L_{jj} = L_{ij}L_{jj}.$$

Aus $L_{jj} \neq 0$ schließen wir $L_{ij} = 0$. □

3.6 Cholesky-Zerlegung von „Pfeil-Matrizen“

Gegeben seien die Matrizen $M, N \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit den Besetzungsstrukturen

$$M = \begin{pmatrix} * & * & \dots & * \\ * & * & & \\ \vdots & & \ddots & \\ * & & & * \end{pmatrix} \text{ und } N = \begin{pmatrix} * & & & * \\ & \ddots & & \vdots \\ & & * & * \\ * & \dots & * & * \end{pmatrix}.$$

Mithilfe unserer implementierten Zerlegung stellen wir fest, dass die Besetzungsstrukturen der jeweiligen Choleskyfaktoren unseren Überlegungen entsprechend aussehen:

$$L_M = \begin{pmatrix} * & & & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ * & \dots & \dots & * \end{pmatrix} \text{ und } L_N = \begin{pmatrix} * & & & \mathbf{0} \\ & \ddots & & \\ & & * & \\ * & \dots & * & * \end{pmatrix}.$$

Während der Choleskyfaktor von M vollbesetzt ist, ist der von N von der Gestalt eines halben Pfeils und besteht nach wie vor zum Großteil aus Nullern.
Haben wir eine Matrix der Form M gegeben, möchten wir also nicht ihre dünne Besetzungsstruktur verschwenden, indem wir direkt eine Cholesky-Zerlegung durchführen. Sinnvoll wäre es, die Matrix durch Permutationen auf die Form einer Matrix N zu bringen und erst im Anschluss zu zerlegen.
Offensichtlich leistet die Permutationsmatrix $P = \begin{pmatrix} & & 1 \\ & \iddots & \\ 1 & & \end{pmatrix}$ genau $M = P^{-1}NP$.
Die Implementierung dieser Permutation mithilfe einer Matrix P würde natürlich unnötigen Speicher verbrauchen, daher bemerken wir, dass die Permutation der Umnummerierung $N_{ij} = M_{n+1-i,n+1-j}$ entspricht.

3.7 Cholesky-Zerlegung von beliebigen schwach besetzten Matrizen

Sei M eine beliebige schwach besetzte, positiv definite symmetrische Matrix. Ähnlich wie bei den Pfeilmatrizen suchen wir eine Strategie, um durch Permutationen möglichst viele der Nuller „linksbündig“ zu machen, um schwach besetzte Choleskyfaktoren zu erhalten und so bei der Zerlegung Aufwand zu sparen.
Folgende Strategie erfüllt dieses Ziel sehr gut:

1. Wir suchen die Spalte mit den meisten Nullern. Diese wird mit der ersten Spalte getauscht.
2. Wir suchen die Spalte mit den meisten Nullern an den Stellen, an denen die neue erste Spalte auch eine Null hat. Diese wird mit der zweiten Spalte getauscht.
3. Wir suchen die Spalte mit den meisten Nullern an den Stellen, an denen die zweite Spalte auch eine Null hat. Diese wird mit der dritten Spalte getauscht.

   ⋮

Die jeweiligen Vertauschungen speichern wir als Tupel in einem Vektor ab, der als Äquivalent zur Permutationsmatrix gesehen werden kann.

```
def sort(A):
    p=[]
    n = len(A)
    for i in range(n):
        j = i # Spalte, die spaeter an die Stelle i gesetzt wird
        max = 0
        for k in range(i,n):
            c = 0
            for l in range(0,n):
                if(i != 0):
                    if(A[l][k] == 0 and A[l][i-1] == 0):
                        c += 1
                if(i == 0):
                    if(A[l][k] == 0):
                        c += 1

            if(c > max):
                max = c
                j = k

        if(i != j):
            p += [(i,j)]
        tmp = np.copy(A[:,i])
        A[:,i] = np.copy(A[:,j])
        A[:,j] = np.copy(tmp)
        tmp2 = np.copy(A[i,:])
        A[i,:] = np.copy(A[j,:])
        A[j,:] = np.copy(tmp2)
    return A, p
```

Listing 6: Permutation einer Matrix nach obigem Schema

Offenbar ist die Inverse einer Permutationsmatrix P genau ihre Transponierte.
Wegen $x^T(P^{-1}NP)x = x^T(P^TNP)x = (Px)^TN(Px)$ bleibt die Definitheit einer Matrix N unter einer solchen Transformation erhalten (weil Permutationsmatrizen regulär sind, ist $Px \neq 0$ für $x \neq 0$). Die permutierte Matrix ist wegen $(P^TNP)^T = P^TN^TP = P^TNP$ auch wieder symmetrisch.
Haben wir nun eine permutierte Version von M, die uns eine günstige Berechnung der Choleskyfaktoren ermöglicht, müssen wir uns noch überlegen, wie wir erreichen, dass nur die notwendigen Einträge berechnet werden.
Die Schwierigkeit ist, dass wir nicht wie bei den Blockmatrizen einfach nur bis zu einem gewissen Index der Spalte gehen können, da die linksbündigen Nuller nur zeilenweise geordnet sind. Da unser Algorithmus die Matrix allerdings spaltenweise durchläuft, benötigen wir eine Funktion, die uns für jede Spalte die Indizes liefert, deren Einträge nicht Null sind.

```
def nichtnuller(A):
    n = len(A)
    J = []
    for i in range(n):
        c = 0
        j = 0
        while(A[i][j] == 0):
            c += 1
            j += 1
        J += [c]
    I = []
    for k in range(n):
        Ik = []
        for j in range(k+1,n):
            if J[j] <= k:
                Ik += [j]
```

```
17          I += [Ik]
18      return I
```

Listing 7: Output ist eine Liste I, die zu jeder Spalte k eine Liste I_k mit den Zeilenindizes der Nichtnulleinträge von k enthält

Mithilfe dieser Funktion können wir also eine effiziente Variante entwickeln, eine bereits sortierte, schwach besetzte Matrix zu zerlegen:

```
1 def efficientChol(A):
2     n = len(A)
3     L = np.zeros((n,n))
4     I = nichtnuller(A)
5     for k in range(n):
6         L[k][k] = np.sqrt((A[k][k] - L[k]@L[k]))
7         for i in I[k]:
8             L[i][k] = (A[i][k] - L[i]@L[k])/L[k][k]
9     return L
```

Listing 8: Berechnung des Choleskyfaktors unter Ausnützung führender Nuller

Der Code entscheidet sich vom ursprünglichen lediglich durch den Kopf der for-Schleife in Zeile 7.
Wir testen nun unsere Implementierungen für schwach besetzte Matrizen. Dazu generieren wir zufällige positiv definite, symmetrische $n \times n$-Matrizen, die ungefähr $2n$ Nichtnulleinträge haben. Die folgende Tabelle zeigt die gemittelten Werte von zehn Tests; in der dritten Spalte kann man den Anteil der benötigten Zeit des naiven Algorithmus an der Zeit, die der verbesserte Algorithmus benötigt hat, ablesen.

Tabelle 2: Vergleich des Aufwands der beiden Algorithmen

n	$\frac{\textbf{Anzahl Nuller}}{\textbf{n}}$	$\frac{\textbf{Aufwand verbesserter Algorithmus}}{\textbf{Aufwand ursprünglicher Algorithmus}}$
4	1.500	0.728
8	2.500	0.734
16	2.000	0.686
32	2.250	0.628
64	2.250	0.512
128	2.172	0.516
256	2.258	0.332
512	2.355	0.418
1024	2.248	0.425
2048	2.234	0.406
4096	2.213	0.364

Der zweite Algorithmus schneidet also wie erwartet besser ab. Wir hätten auch folgende Strategie wählen können, um die Matrix zu permutieren:

1. Wir suchen die Spalte mit den meisten Nullern. Diese wird mit der ersten Spalte getauscht.
2. Wir suchen die Spalte mit den meisten Nullern an den Stellen, an denen die neue erste Spalte auch eine Null hat. Diese wird mit der zweiten Spalte getauscht.
3. Wir suchen die Spalte mit den meisten Nullern an den Stellen, an denen **alle vorherigen** Spalten (in unserer Variante: nur die Spalte direkt davor) auch eine Null haben. Diese wird mit der dritten Spalte getauscht.

   ⋮

In den Tests zeigt sich, dass dadurch eine noch deutlichere Steigerung der Effizienz bei der Berechnung der Choleskyzerlegung möglich ist, der größere Aufwand für das Sortieren macht diese aber wieder wett. Deshalb haben wir uns für die erste Strategie entschieden.

Zuletzt möchten wir noch zusammenfassen, wie ein ganzes lineares Gleichungssystem mithilfe der dargestellten Methoden nun gelöst werden kann:
Sei $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine beliebige schwach besetzte symmetrisch positiv definite Matrix. Gesucht ist die Lösung des linearen Gleichungssystems $Mx = b$. Wir finden eine Permutationsmatrix P, sodass gilt $M = P^{-1}NP$ mit N geeignet für eine günstige Cholesky-Zerlegung. Wir können das Gleichungssystem also umschreiben in

$$Mx = b \quad \Leftrightarrow \quad P^{-1}N \underbrace{Px}_{=: \widetilde{x}} = b \quad \Leftrightarrow \quad N\widetilde{x} = \underbrace{Pb}_{=: \widetilde{b}}.$$

Die Gleichung $N\widetilde{x} = \widetilde{b}$ können wir nun wie zu Beginn besprochen mithilfe der Cholesky-Zerlegung von N und anschließender Vorwärts- und Rückwärtssubstitution lösen.[1] Den Lösungsvektor $\widetilde{x}$ müssen wir nun lediglich wieder mit der Matrix P^{-1} rückpermutieren, um unsere gesuchte Lösung x zu finden.

[1] Die Vorwärts- und Rückwärtssubstitution könnte in diesem Fall mit unserem Wissen über die Besetzungsstruktur der Choleskyfaktoren natürlich auch noch effizienter implementiert werden. Darauf soll allerdings in diesem Projekt nicht eingegangen werden.