Übungsblatt 1 – Cerberus

Aufgabe 1

a)

Bei den hier vorliegenden Gittervektoren handelt es sich um eine hexagonale einatomige Gitterstruktur.

b)

Es soll nun folgendes Gleichungssystem $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ mithilfe der LU-Zerlegung gelöst werden:

$$\begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} .$$

Die **P**-, **L**- und **U**-Matrizen werden mit `Eigen::PartialPivLU` aus der Eigen-Bibliothek bestimmt und lauten:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.57735 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0.866025 & 0.866025 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Nun lässt sich $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ als $\mathbf{P}(\mathbf{L}(\mathbf{U}\vec{x})) = \vec{b}$ schreiben, wobei

$$\mathbf{P}\vec{z} = \vec{b} \tag{1}$$
$$\mathbf{L}\vec{y} = \vec{z} \tag{2}$$
$$\mathbf{U}\vec{x} = \vec{y} \tag{3}$$

gilt. Gleichung (1) wird durch

$$\vec{z} = \mathbf{P}^{\mathrm{T}}\vec{b}$$

gelöst. Die Lösung von Gleichung (2) erfolgt rekursiv über

$$y_1 = \frac{z_1}{L_{11}}$$
$$y_i = \frac{1}{L_{ii}} \left(z_i - \sum_{j=1}^{i-1} L_{ii} y_i \right) .$$

Gleichung (3) wird ähnlich wie Gleichung (2) gelöst, wobei die Elemente aber absteigend angefangen mit dem letzten Element x_{n} berechnet werden

$$x_{\mathrm{n}} = \frac{y_n}{U_{nn}}$$
$$x_i = \frac{1}{U_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} U_{ij} x_i \right) .$$

Der Ergebnisvektor lautet schließlich

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

c)

Da sich die Basis nicht ändert, kann die mit Eigen berechnetet LU-Zerlegung, die einen Aufwand von $\mathcal{O}(N^3)$ hat, weiterverwendet werden und es muss nur noch die Berechnung von Gleichung (1) bis (3) erfolgen. Diese enthalten jeweils $\mathcal{O}(N^2)$ Operationen. Der Ergebnisvektor lautet

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

d)

Die LU-Zerlegung für die neue Basis

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & -1/2 & 1/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

lautet

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -0.57735 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.866025 & 0.866025 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die **L**- und **U**-Matrizen unterscheiden sich im Wesentlichen durch durch je eine zyklische Vertauschung der Zeilen und der Spalten, während sich die **P**-Matrizen nur durch eine zyklische Vertauschung der Zeilen unterscheiden.

e)

Wenn die primitiven Gittervektoren paarweise orthogonal sind ist $\mathbf{A}$ regulär und es gilt $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$.

Aufgabe 2

x	y
0.0	4.0
2.5	4.3
−6.3	−3.9
4.0	6.5
−3.2	0.7
5.3	8.6
10.1	13.0
9.5	9.9
−5.4	−3.6
12.7	15.1

Für den vorliegenden Datensatz soll eine lineare Regression der Form

$$y = mx + n$$

durchgeführt werden, die den quadratischen Fehler minimiert.
Zunächst lässt sich das lineare Gleichungssystem $A\vec{x} = \vec{b}$ aufstellen als

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2.5 & 1 \\ -6.3 & 1 \\ 4 & 1 \\ -3.2 & 1 \\ 5.3 & 1 \\ 10.1 & 1 \\ 9.5 & 1 \\ -5.4 & 1 \\ 12.7 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m \\ n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4.3 \\ -3.9 \\ 6.5 \\ 0.7 \\ 8.6 \\ 13 \\ 9.9 \\ -3.6 \\ 15.1 \end{pmatrix}$$

Durch multiplizieren mit der Transponierten der Matrix A wird wandelt sich das System zu $A^T A\vec{x} = A^T\vec{b} = \vec{b}'$, mit der quadratischen Matrix

$$A^T A = \begin{pmatrix} 482.98 & 29.2 \\ 29.2 & 10 \end{pmatrix}$$

und dem neuen Ergebnisvektor

$$\vec{b}' = \begin{pmatrix} 541.22 \\ 54.6 \end{pmatrix}.$$

Eine numerische LU-Zerlegung $A^T A = PLU$ liefert die Pivotisierungs-Matrix

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

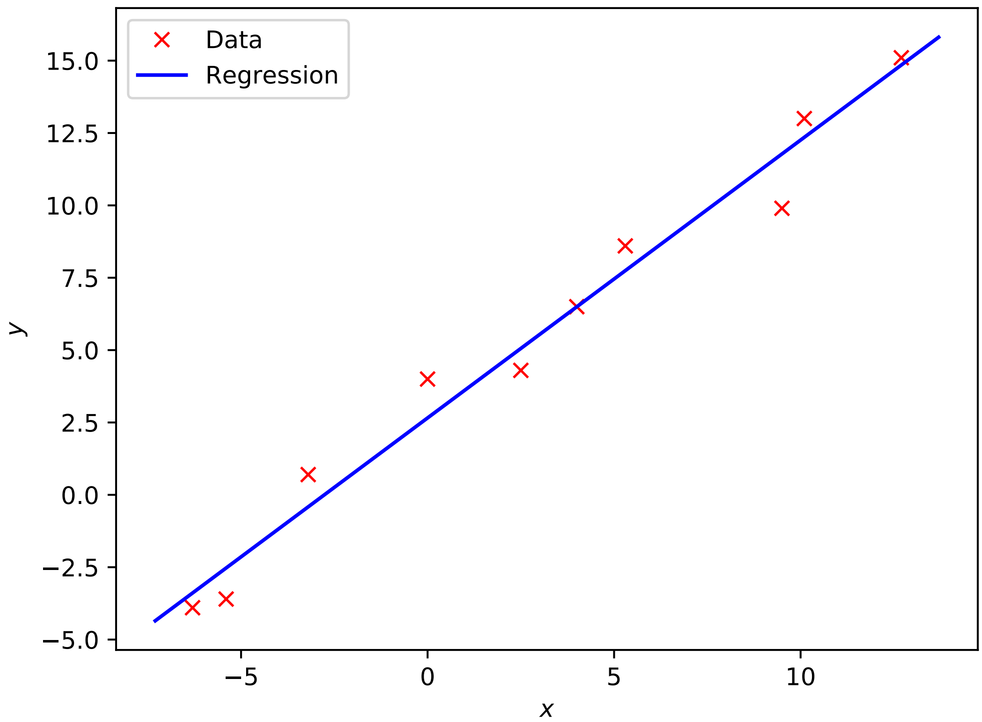

Figure 1: Lineare Regression zum Datensatz.

die L-Matrix

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.060458 & 1 \end{pmatrix}$$

und die U-Matrix

$$U = \begin{pmatrix} 482.98 & 29.2 \\ 0 & 8.23463 \end{pmatrix} .$$

Damit ergibt sich die Lösung für die lineare Regression zu

$$y = 0.959951 \cdot x + 2.65694 \; .$$

In Abbildung 1 ist diese Ausgleichsgerade und die zugehörigen Daten zu sehen.