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

WiSe 2023/2024
19.11.2023

Angewandte Numerik

Übungsblatt 05

Besprechung in den Tutorien von Montag, 27.11.2023 bis Freitag, 01.12.2023

Für dieses Übungsblatt gibt es 20 Theorie- und 14 Matlab-Punkte, sowie 6 Theorie- und 3 Matlab-Zusatzpunkte. Punkte, die mit einem * gekennzeichnet sind, sind Zusatzpunkte.
Die 70-Prozent-Grenzen liegen aktuell (inklusive Blatt 05) bei 67,9 Theorie- und 59,5 Matlab-Punkten.

Aufgabe 14 *(Programmieraufgabe: Cholesky-Zerlegung für Tridiagonalmatrizen)*
(4T+2T+3T+2T+4M+2M Punkte)

a) Gegeben sei die symmetrisch positiv definite Tridiagonalmatrix

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{2,1} & & & \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{3,2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n,n-1} \\ & & & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

Leiten Sie für eine Cholesky-Zerlegung der Matrix A

$$A = L\,L^T \quad \text{mit} \quad L = \begin{pmatrix} l_{1,1} & & & \\ l_{2,1} & l_{2,2} & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & l_{n,n-1} & l_{n,n} \end{pmatrix}$$

Rekursionsformeln für $l_{j,j}\,(j = 1,\dots,n)$ sowie $l_{j,j-1}\,(j = 2,\dots,n)$ her und geben Sie einen Algorithmus zur Berechnung einer Choleskyzerlegung an.

b) Welchen Aufwand hat die Berechnung der Cholesky-Zerlegung mittels dieser Formeln? Geben Sie den Aufwand auch in $\mathcal{O}$-Notation an.

c) Geben Sie einen Algorithmus zur Lösung eines linearen Gleichungssystems $Ax = b$ bei gegebener Choleskyzerlegung der symmetrisch positiv definiten Matrix A an.

Welchen Aufwand hat Ihr Algorithmus? Geben Sie auch diesen Aufwand in $\mathcal{O}$-Notation an.

d) Lohnt sich die Implementierung spezieller Funktionen zur Berechnung der Cholesky-Zerlegung einer symmetrisch positiv definiten Tridiagonalmatrix und zur Berechnung der Lösung eines linearen Gleichungssystems mit einer symmetrisch positiv definiten Tridiagonalmatrix?

Oder genügt es, Ihre Funktion aus Aufgabe 11 vom letzten Übungsblatt 04 zu verwenden?

Begründen Sie Ihre Antwort.

e) Schreiben Sie eine MATLAB-Funktion `L = choleskyTriDiag(A)`, die die Cholesky-Zerlegung einer symmetrisch positiv definiten Tridiagonal-Matrix `A` mit Ihrem Algorithmus aus Aufgabenteil a) berechnet.

   Speichern Sie dabei die Matrizen `A` und `L` in einem beliebigen Speicherformat Ihrer Wahl, das die spezielle Struktur der beiden Matrizen berücksichtigt.

f) Testen Sie Ihre MATLAB-Funktion `CholeskyTriDiag` an verschiedenen Beispielen.

Aufgabe 15 *(Programmieraufgabe: Fortsetzung Vergleich der Rechenzeiten)* (3M*+2T*+1T Punkte)

a) Erweitern Sie Ihr MATLAB-Skript `laufzeitenA13` aus Aufgabe 13 vom letzten Übungsblatt zu einem MATLAB-Skript `laufzeitenA15` und berechnen Sie Cholesky-Zerlegungen der Matrizen A auch mit Ihrer MATLAB-Funktion `choleskyTriDiag` aus Aufgabe 14.

   Plotten Sie analog zu Aufgabe 13 vom letzten Übungsblatt die hierfür benötigten Zeiten und zeichnen Sie wieder eine geeignete Steigungsgerade ein.

b) Interpretieren Sie Ihr Schaubild. Haben Sich Ihre theoretischen Überlegungen aus Aufgabe 14 bestätigt?

c) Warum ist es in Aufgabe 14 e) wichtig, die Matrizen `A` und `L` in einem Format zu speichern, das die spezielle Struktur der beiden Matrizen berücksichtigt.

Aufgabe 16 *(Programmieraufgabe: Lineares Ausgleichsproblem)* (4T+4M+4M Punkte)

Die Höhe des Wasserstandes in der Nordsee wird hauptsächlich durch die so genannte M_2-Tide bestimmt, deren Periode ca. 12 Stunden beträgt. Die Höhe des Wasserstandes h kann daher durch die Funktion

$$h(t) = x_1 + x_2 \sin\left(\frac{2\pi t}{12}\right) + x_3 \cos\left(\frac{2\pi t}{12}\right)$$

beschrieben werden (t in Stunden). Zur Bestimmung der unbekannten Parameter x_1, x_2 und x_3 sind bei Helgoland folgende Messungen durchgeführt worden:

t_i	0	2	4	6	8	10	Std.
h_i	$\frac{19}{10}$	3	$\frac{13}{5}$	$\frac{11}{10}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{3}{2}$	Meter

a) Formulieren Sie dieses Problem als lineares Ausgleichsproblem $\min \|Ax - b\|_2^2$. Geben Sie die Matrix A und die Vektoren x und b explizit an. Welche Dimensionen haben A, x und b?

b) Lösen Sie dieses lineare Ausgleichsproblem mittels MATLAB. Der MATLAB-Befehl zum Lösen eines linearen Gleichungssystems $Ax = b$ lautet `x = A \ b`. Informieren Sie sich in der MATLAB-Dokumentation über die Bedeutung des MATLAB-Operators \ im Falle eines über- oder unterbestimmten linearen Gleichungssystems $Ax = b$. Fertigen Sie mit MATLAB eine Skizze an, in der die Ausgleichsfunktion und die Messdaten eingezeichnet sind.

c) Zeichnen Sie in Ihre Skizze auch die Fehler der Lösung des Ausgleichsproblems gegenüber den Messwerten ein und berechnen Sie die (minimale) Summe der Fehlerquadrate.

Aufgabe 17 *(Die Gaußschen Normalengleichungen)* (4T+4T* Punkte)

a) Seien $m, n \in \mathbb{N}$ mit $m \geq n$ sowie $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine Matrix mit vollem Rang (also $rgA = n$) und $b \in \mathbb{R}^m$. Erklären Sie, warum und wie man das lineare Ausgleichsproblem $\|Ax - b\|_2 \to \min$ mit Hilfe der Gaußschen Normalengleichungen lösen kann.

   Welches numerische Verfahren, das Sie in der Vorlesung kennen gelernt haben, wenden Sie dabei zur Lösung des auftretenden linearen Gleichungssystems an? Warum?

b) Stellen Sie für das lineare Ausgleichsproblem aus Aufgabe 16 die Gaußschen Normalengleichungen auf und lösen Sie damit das lineare Ausgleichsproblem von Hand. Sie müssen dabei zur Lösung des auftretenden linearen Gleichungssystems nicht das in Aufgabenteil a) genannte Verfahren anwenden.

   Vergleichen Sie Ihre von Hand berechnete Lösung mit der in Aufgabe 16 mit MATLAB berechneten Lösung.

   Hinweis: Verwenden Sie bei allen Rechnungen ausschließlich Brüche und keine Dezimalzahlen und geben Sie alle Zwischenschritte an. Rechnen Sie mit $\sin(\frac{\pi}{3}) = \frac{\sqrt{3}}{2}$.

Hinweise:

Teamarbeit ist bei der Bearbeitung der Übungsblätter erlaubt und erwünscht. Falls Sie die Aufgaben im Team lösen, muss jedes Teammitglied eine eigene Lösung votieren und abgeben. Geben Sie dann bitte auf Ihrer Lösung alle an der Aufgabe beteiligten Teammitglieder an.

Die Programmieraufgaben sind in MATLAB zu lösen. Der Source Code muss strukturiert und dokumentiert sein.

Speichern Sie Ihre Lösungen der Theorieaufgaben, Ihre MATLAB-Programme und Ihre Ergebnisse in einem Directory mit dem Namen **Blatt05_*Vorname_Nachname*** und verpacken Sie dieses in eine `.zip`-Datei. **Spätestens bis Sonntag, 26.11.2023, 23:59 Uhr** müssen Sie diese `.zip`-Datei in Moodle hochladen und für die Aufgabenteile, die Sie vorstellen können, votieren.

Aufgabe 14

a)

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{2,1} & & & \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{3,2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n,n-1} \\ & & & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Leiten Sie für eine Cholesky-Zerlegung der Matrix A

$$A = L\,L^T \quad \text{mit} \quad L = \begin{pmatrix} l_{1,1} & & & \\ l_{2,1} & l_{2,2} & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & l_{n,n-1} & l_{n,n} \end{pmatrix}$$

$$L^T \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & & \\ & l_{22} & \ddots & \\ & & \ddots & l_{n,n-1} \\ & & & l_{nn} \end{pmatrix} \quad l_{n-1,n-2} \quad l_{n-1,n-1}$$

$$A = \begin{pmatrix} l_{11}^2 & l_{11} l_{21} & & & \\ l_{21} l_{11} & l_{21}^2 + l_{22}^2 & l_{2,2} l_{3,2} & & \\ & l_{3,2} l_{22} & l_{32}^2 + l_{33}^2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & l_{n,n-1} l_{n-1,n-1} & l_{n-1,n}^2 + l_{nn}^2 \end{pmatrix}$$

$$l_{j,j} = \sqrt{a_{j,j} - (l_{j,j-1})^2} \quad \text{für } j = 1, \dots, n$$

$$l_{j,j-1} = \frac{a_{j,j-1}}{l_{j-1,j-1}} \quad \text{für } j = 2, \dots, n$$

$L =$

$A =$

Algorithmus:

for $j = 1$

Berechne $l_{j,j}$

Speichere $l_{j,j}$ in der Matrix L

Berechne $l_{j,j-1}$

Speichere Ergebnis in der Matrix L

b) für n-Zeilen: Berechne $l_{j,j}$ und $l_{j,j-1}$

$$\Rightarrow \quad n \cdot (2\,\text{FLOP} + 2\,\text{FLOP}) = 4n \in O(n)$$

c) $A = b\,x \quad \Rightarrow \quad b = L^T (L x)$

$\Rightarrow$ 1. $L y = b$

2. $L^T x = y$

Algorithmus:

Bestimme $L y = b$ durch Vorwärtseinsetzen % $O(n)$

-> Aufwand: FLOPs $= 1 + (n-1) \cdot 3 = 3n - 2$

Bestimme $L^T x = y$ durch Rückwärtseinsetzen % $O(n)$

-> Aufwand: FLOPs $= 1 + (n-1) \cdot 3 = 3n - 2$

$\Rightarrow$ Gesamtaufwand: $3n - 2 + 3n - 2 = 6n - 4 \in O(n)$

d) Es sollten neue Funktionen geschrieben werden, da die vorherigen Methoden extrem viele unnötige Berechnungen durchführen würden.

Die Funktionen aus Blatt 04 sind in $O(n^2)$, was auch hier der Fall wäre.

Da die spezielle Berechnung aber in $O(n)$ liegt, können solche Berechnungen erheblich beschleunigt werden.

Aufgabe 15

c) In einer vollen Matrix wären $n^2-(3n-2)$ Einträge in A und $n^2-(2n-1)$ Einträge in L überflüssig, da diese nur Nullen enthalten.

Aufgabe 16 $\quad h(t) = x_1 + x_2 \sin\left(\frac{2\pi t}{12}\right) + x_3 \cos\left(\frac{2\pi t}{12}\right)$

a) $\quad \min \| Ax - b \|_2^2$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) & \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) \\ 1 & \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) & \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) \\ 1 & \sin(\pi) & \cos(\pi) \\ 1 & \sin\left(\frac{3\pi}{2}\right) & \cos\left(\frac{3\pi}{2}\right) \\ 1 & \sin\left(\frac{5\pi}{3}\right) & \cos\left(\frac{5\pi}{3}\right) \end{pmatrix}$$

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad x \in \mathbb{R}^3$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & \sqrt{3}/2 & 1/2 \\ 1 & \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} 19/10 \\ 3 \\ 13/5 \\ 11/10 \\ 2/5 \\ 3/2 \end{pmatrix}$$

$$A \in \mathbb{R}^{6 \times 3} \qquad b \in \mathbb{R}^6$$

a) $m, n \in \mathbb{N}$ mit $m \geq n$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $\operatorname{rg} A = n$ $b \in \mathbb{R}^m$

Damit die Lösung der Gaußschen Normalengleichung auch tatsächlich die Lösung des linearen Ausgleichsproblem darstellt, muss $F''(x) = A^T A \neq 0$ erfüllt sein. Wenn die Matrix A einen vollen Rang besitzt, ist sie positiv definit, wodurch die hinreichende Bedingung erfüllt ist.

$$F(x) = \| Ax - b \|_2 = (Ax - b, Ax - b) = (Ax - b)(Ax - b)^T$$

$$= (Ax - b)((Ax)^T - b^T) = Ax(Ax)^T - Axb^T - b(Ax)^T + bb^T$$

$$= Axx^T A^T - 2x^T A^T b + bb^T$$

Da wir nach dem Minimum suchen:

$$F'(x) = \frac{d}{dx} F(x) = 2Ax^T A^T - 2A^T b = 0 \quad \Rightarrow \quad Ax^T A^T = A^T b$$

Jetzt können wir diese Gleichung numerisch mithilfe der Cholesky-Zerlegung lösen.