

Herleitung des LGS und Analyse der Sparse-Matrizen Anhand einer eingespannten Saite

Serie 2 – Teil 2

Oliver Bandel (556 648) Kei Thoma (574 613)

12. Dezember 2018

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Theoretischer Hintergrund	3
2.1	Approximierung der Ableitungen durch die Taylorreihe	3
2.2	Diskretisierung des Gebiets	4
2.3	Herleitung des linearen Gleichungssystems	5
2.4	Speicherplatzbedarf von Sparse Matrizen	9
3	Experimente	10

1 Einleitung

Sei eine ausgelenkte Saite fest eingespannt an zwei Enden. Wir bezeichnen die auf die Saite wirkende Kraft $f(x)$ mit x als der Ort und sei das gegebene Gebiet $[0, 1]^d$ mit d als die Raumdimension. f ist, nach vernachlässigung der Masse, gleich der zweiten Ableitung der Auslenkung, das heißt es gilt $f(x) = -\Delta u$ in $\Omega := (0, 1)^d$, wobei u die Auslenkung. In diesem Bericht wollen wir anhand dieses Modells das lineare Gleichungssystem (LGS) für f herleiten und Optimierungsmöglichkeiten im Speicherplatzbedarfs der errechneten Matrizen untersuchen.

2 Theoretischer Hintergrund

2.1 Approximierung der Ableitungen durch die Taylorreihe

Bevor wir jedoch in das kalte Wasser der partielle Differentialgleichungen springen, sind einige Vorarbeiten notwendig. Die erste, die wir leisten werden, ist die Approximierung der ersten zwei Ableitungen durch die Taylorreihe. Für eine beliebig oft differenzierbare Funktion $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ kann die Taylorreihe an einer Stelle $x_0 \in I$ entwickelt werden [1, S. 133]. Nach Definition ist die Taylorreihe

$$T(f, x_0)(x) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^n(x_0)}{n!} (x - x_0)^n \quad (1)$$

$$= f(x). \quad (2)$$

Diese Reihe kann verwendet werden um eine Approximation für die Ableitungen zu bilden.

$$T(f, x)(x + h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^n(x + h)}{n!} (h)^n \quad (3)$$

$$= f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \dots \quad (4)$$

Die erste Ableitung ist dann

$$f'(x) = \underbrace{\frac{f(x + h) - f(x)}{h}}_{=: D_h^{(1)}(x)} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x)}{n!} h^{n-1} = D_h^{(1)}(x) + \mathcal{O}(h) \quad (5)$$

$$\Rightarrow D_h^{(1)}(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h}, \quad (6)$$

beziehungsweise die zweite Ableitung ist

$$f''(x) = \underbrace{\frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}}_{=: D_h^{(2)}(x)} + \mathcal{O}(h^2) \quad (7)$$

$$\Rightarrow D_h^{(2)}(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}. \quad (8)$$

Wir werden mit diese Approximationen, $D_h^{(1)}$ und $D_h^{(2)}$, arbeiten.

2.2 Diskretisierung des Gebiets

Im zweiten Schritt unserer Vorarbeit müssen wir das Gebiet unserer Beobachtung diskretisieren damit eine numerische Lösung in angemessener Zeit errechnet werden kann.[2] Dafür zerlegen wir das Intervall $[a, b]^d$ in äquidistanten Teilintervalle. Dafür definieren wir die Schrittweite $h := \frac{|b-a|}{n}$. Für den eindimensionalen Fall mit $n+1$ Diskretisierungspunkte erhalten wir

$$x_0 = a \quad (9)$$

$$x_i = a + ih \quad (10)$$

$$x_n = b. \quad (11)$$

wobei für x_0 und x_n die gegebenen Randdaten genommen wurden und $1 \leq i \leq n$.

Mit der ähnlichen Idee und Nummerierung erhalten wir die Verfeinerung des Gebiets für Dimension $d = 2$ und $d = 3$. Jedoch müssen wir davor eine eindeutige Zuweisung vom Index zu dem Vektor definieren.

$$x_m = x_{i,j} := (a + ih, a + jh) \quad (12)$$

$$x_m = x_{i,j,k} := (a + ih, a + jh, a + kh) \quad (13)$$

Die Konventionierung von m zu (i, j) beziehungsweise (i, j, k) ist ein wenig komplizierter. Zuerst haben wir für die Rückwandlung

$$(i, j) \mapsto m = i(n-1) + j \quad (14)$$

$$(i, j, k) \mapsto m = i(n-1)^2 + j(n-1) + k. \quad (15)$$

Die andere Richtung benötigt ein wenig mehr Arbeit. Für $d = 2$ haben wir mit $m \mapsto (i, j)$

$$\text{für } j \text{ gilt } \begin{cases} j = n - 1; \text{ falls } (n - 1) \text{ teilt } m \\ m \equiv j \pmod{(n - 1)}; \text{ sonst.} \end{cases} \quad (16)$$

$$\text{für } i \text{ gilt } \begin{cases} i = \frac{m}{n-1}; \text{ falls } (n - 1) \text{ teilt } m \\ i = \frac{m-j}{n-1} + 1; \text{ sonst.} \end{cases} \quad (17)$$

und für $d = 3$ mit $m \mapsto (i, j, k)$

$$\text{für } k \text{ gilt } \begin{cases} k = n - 1; \text{ falls } (n - 1) \text{ teilt } m \\ m \equiv k \pmod{(n - 1)}; \text{ sonst.} \end{cases} \quad (18)$$

$$\text{für } j \text{ gilt } \begin{cases} j = n - 1; \text{ falls } (n - 1) \text{ teilt } \frac{m-k}{n-1} + 1 \\ \frac{m-k}{n-1} + 1 \equiv j \pmod{(n - 1)}; \text{ sonst.} \end{cases}$$

$$i = \lceil \frac{m}{n-1} \rceil \quad (19)$$

2.3 Herleitung des linearen Gleichungssystems

Dimension 1

Jetzt können wir die LGS für die drei Dimension herleiten. Wir beginnen mit $d = 1$. Für die Randdaten hatten wir

$$u(x_0) = a \qquad u(x_n) = b. \quad (20)$$

Für $u(x_i)$ mit $1 \leq i \leq n - 1$ haben wir, da wir noch in der ersten Dimension sind, die herkömmliche zweite Ableitung, die wir durch die Taylorreihe approximieren (vergleiche Abschnitt 2.1)

$$f(x) = -u''(x_i) \quad (21)$$

$$\approx -\frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)}{h^2} \quad (22)$$

$$\approx \frac{-u(x_{i+1}) + 2u(x_i) - u(x_{i-1}))}{h^2} \quad (23)$$

Im Gleichung wurde die Tatsache ausgenutzt, dass $x_{i+1} - x_i = h$ ist. Bezeichnen wir jetzt $u_i := u_h(x_i)$ und $f_i := f(x_i)$ für $0 \leq i \leq n$ erhalten wir

$$u_0 = a \qquad u_n = b \qquad -u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1} = h^2 f_i \quad (24)$$

Mit diesem Ergebniss können wir die LGS in Form von $A^{(1)}u = f$ bilden.

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2u_1 - u_2 \\ -u_1 + 2u_2 - u_3 \\ -u_2 + 2u_3 - u_4 \\ \vdots \\ -u_{n-2} + 2u_{n-1} \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$= \begin{pmatrix} h^2 f_1 + 0 \\ h^2 f_2 \\ h^2 f_3 \\ \vdots \\ h^2 f_{n-2} \\ h^2 f_{n-1} + 1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

Rekursive Definition der Matrizen

Bevor wir die LGS für höhere Dimensionen betrachten, definieren wir zuerst rekursiv eine Matrixfolge.

$$A_1(d) := \begin{pmatrix} 2d & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2d & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2d & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2d & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)} \quad (27)$$

$$A_\alpha(d) := \begin{pmatrix} A_{\alpha-1}(d) & -I_{\alpha-1} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -I_{\alpha-1} & A_{\alpha-1}(d) & -I_{\alpha-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -I_{\alpha-1} & A_{\alpha-1}(d) & -I_{\alpha-1} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & A_{\alpha-1}(d) & -I_{\alpha-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -I_{\alpha-1} & A_{\alpha-1}(d) \end{pmatrix} \quad (28)$$

$$\in \mathbb{R}^{(n-1)^\alpha \times (n-1)^\alpha}, \quad (29)$$

wobei $I_\alpha \in \mathbb{R}^{(n-1)^\alpha \times (n-1)^\alpha}$ die Identitätsmatrix ist.

Dimension 2

Zuerst haben wir für die Randdaten

$$u(x) = 0, \text{ falls } x \in \partial(0, 1)^2. \quad (30)$$

Wir betrachten nun $-\Delta u(x_m) \cdot h^2$, wobei $1 \leq m \leq (n-1)^2$. Sei hierfür $h_i := (\frac{|b-a|}{n}, 0)$ und $h_j := (0, \frac{|b-a|}{n})$. Außerdem bezeichnen wir $u_{i,j} := u(x_{i,j})$, wobei $1 \leq i, j \leq n-1$. Mit der approximierten zweiten Ableitung haben wir

$$-\Delta u(x_m) \cdot h^2 = -\Delta u(x_{i,j}) \cdot h^2 \quad (31)$$

$$\approx -u(x_{i,j} + h_i) + 2u(x_{i,j}) - u(x_{i,j} - h_i) \quad (32)$$

$$\begin{aligned} & -u(x_{i,j} + h_j) + 2u(x_{i,j}) - u(x_{i,j} - h_j) \\ & = -u(x_{i-1,j}) - u(x_{i,j-1}) + 4u(x_{i,j}) - u(x_{i,j+1}) - u(x_{i+1,j}) \end{aligned} \quad (33)$$

$$= -u_{i-1,j} - u_{i,j-1} + 4u_{i,j} - u_{i,j+1} - u_{i+1,j} \quad (34)$$

Damit können wir das LGS aufstellen. Sei dafür $A^{(2)} := A_2(2)$, außerdem fassen wir $f_{i,j}h^2 = -u_{i,j-1} + 4u_{i,j} - u_{i,j+1}$ zusammen. Dann ist das LGS in Form von $A^{(2)}u = f$:

$$A_2(2) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u_{0,1} - u_{1,0} + 4u_{1,1} - u_{1,2} - u_{2,1} \\ -u_{0,2} - u_{1,1} + 4u_{1,2} - u_{1,3} - u_{2,2} \\ -u_{0,3} - u_{1,2} + 4u_{1,3} - u_{1,4} - u_{2,3} \\ \vdots \\ -u_{1,1} - u_{2,0} + 4u_{2,1} - u_{2,2} - u_{3,1} \\ \vdots \\ -u_{i-1,j} - u_{i,j-1} + 4u_{i,j} - u_{i,j+1} - u_{i+1,j} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (35)$$

$$= \begin{pmatrix} -2a + 4u_{1,1} - u_{1,2} - u_{2,1} \\ -a + f_{1,2}h^2 - u_{2,2} \\ -a + f_{1,3}h^2 - u_{2,3} \\ \vdots \\ -u_{1,1} - a + 4u_{2,1} - u_{2,2} - u_{3,1} \\ \vdots \\ -u_{i-1,j} + f_{i,j}h^2 - u_{i+1,j} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (36)$$

$$(37)$$

Dimension 3

Die Randdaten wieder sind

$$u(x) = 0, \text{ falls } x \in \partial(0, 1)^3. \quad (38)$$

Wir betrachten jetzt $-\Delta u(x_m) \cdot h^2$, wobei $1 \leq m \leq (n-1)^3$. Sei dafür $h_i := (\frac{|b-a|}{n}, 0, 0)$; $h_j := (0, \frac{|b-a|}{n}, 0)$ und $h_k := (0, 0, \frac{|b-a|}{n})$. Wieder sei $u_{i,j,k} := u(x_{i,j,k})$

$$-\Delta u(x_m) \cdot h^2 = -\Delta u(x_{i,j,k}) \cdot h^2 \quad (39)$$

$$\approx -u(x_{i,j,k} + h_i) + 2u(x_{i,j,k}) - u(x_{i,j,k} - h_i) \quad (40)$$

$$\begin{aligned} & -u(x_{i,j,k} + h_j) + 2u(x_{i,j,k}) - u(x_{i,j,k} - h_j) \\ & -u(x_{i,j,k} + h_k) + 2u(x_{i,j,k}) - u(x_{i,j,k} - h_k) \\ & = -u(x_{i,j,k} - h_i) - u(x_{i,j,k} - h_j) - u(x_{i,j,k} - h_k) + 6u(x_{i,j,k}) \end{aligned} \quad (41)$$

$$-u(x_{i,j,k} + h_k) - u(x_{i,j,k} + h_j) - u(x_{i,j,k} + h_i) \quad (42)$$

$$= -u_{i-1,j,k} - u_{i,j-1,k} - u_{i,j,k-1} + 6u_{i,j,k} \quad (43)$$

$$-u_{i,j,k+1} - u_{i,j+1,k} - u_{i+1,j,k}$$

Wenn wir $f_{i,j,k}h^2 = -u_{i,j,k-1} + 6u_{i,j,k} - u_{i,j,k+1}$ auffassen, können wir das LGS in Form von $A^3u = f$ aufstellen

$$A^{(3)} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u_{0,1,1} - u_{1,0,1} - u_{1,1,0} + 6u_{1,1,1} - u_{1,1,2} - u_{1,2,1} - u_{2,1,1} \\ -u_{0,1,2} - u_{1,0,2} - u_{1,1,1} + 6u_{1,1,2} - u_{1,1,3} - u_{1,2,2} - u_{2,1,2} \\ -u_{0,1,2} - u_{1,0,2} - u_{1,1,2} + 6u_{1,1,3} - u_{1,1,4} - u_{1,2,3} - u_{2,1,3} \\ \vdots \\ -u_{1,2,1} - u_{1,2,1} - u_{1,2,0} + 6u_{1,2,1} - u_{1,2,2} - u_{1,3,1} - u_{2,2,1} \\ \vdots \\ -u_{1,1,1} - u_{2,0,1} - u_{2,1,0} + 6u_{2,1,1} - u_{2,1,2} - u_{2,2,1} - u_{3,1,1} \\ \vdots \\ -u_{i-1,j,k} - u_{i,j-1,k} - u_{i,j,k-1} + 6u_{i,j,k} - u_{i,j,k+1} - u_{i,j+1,k} - u_{i+1,j,k} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (44)$$

$$= \begin{pmatrix} -3a + 6u_{1,1,1} - u_{1,1,2} - u_{1,2,1} - u_{2,1,1} \\ -2a + f_{1,1,2}h^2 - u_{1,2,2} - u_{2,1,2} \\ -2a + f_{1,1,3}h^2 + 6u_{1,1,3} - u_{1,1,4} - u_{1,2,3} - u_{2,1,3} \\ \vdots \\ -u_{1,2,1} - u_{1,2,1} - a + 6u_{1,2,1} - u_{1,2,2} - u_{1,3,1} - u_{2,2,1} \\ \vdots \\ -u_{1,1,1} - a + f_{2,1,1}h^2 - u_{2,1,2} - u_{2,2,1} - u_{3,1,1} \\ \vdots \\ -u_{i-1,j,k} - u_{i,j-1,k} + f_{i,j,k}h^2 - u_{i,j+1,k} - u_{i+1,j,k} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (45)$$

2.4 Speicherplatzbedarf von Sparse Matrizen

Formel 1. Sei d die Raumdimension des gegebenen Problems und n die Diskretion. Dann haben wir die folgende Formeln für die Errechnung des Speicherplatzbedarfs der vollbesetzten sowie Sparse-Matrizen in Abhängigkeit von n

$$\begin{aligned} f_{voll}^{(d=1)}(n) &= (n-1)^2 & f_{sparse}^{(d=1)}(n) &= 3n - 5 \\ f_{voll}^{(d=2)}(n) &= (n-1)^4 & f_{sparse}^{(d=2)}(n) &= 5(n-1)^2 - 4(n-1) \\ f_{voll}^{(d=3)}(n) &= (n-1)^6 & f_{sparse}^{(d=3)}(n) &= 7(n-1)^3 - 6(n-1)^2. \end{aligned}$$

Herleitung. Die Formeln für die vollbesetzte Matrizen; $f_{voll}^{(d=1)}(n)$, $f_{voll}^{(d=2)}(n)$ und $f_{voll}^{(d=3)}(n)$; lassen sich leicht erschließen aus der Tatsache, dass diese jeweils die Dimension (das heißt hier die Länge und Breite der Matrix) von $(n-1)^d \times (n-1)^d$ haben.

Die Sparse Matrix hat Einträge in der Hauptdiagonale, welche genau $n-1$ Elemente

zulässt, und in der Diagonale über und unter der Hauptdiagonale, welche $n - 2$ Einträge besitzt. In der Form einer Gleichung erhalten wir

$$f_{\text{sparse}}^{(d=1)}(n) = \underbrace{(n-1)}_{\text{Anzahl der Einträge in der Hauptdiagonale}} + \underbrace{(n-2) + (n-2)}_{\text{Anzahl der Einträge in der Diagonale über und unter der Hauptdiagonale}} \quad (46)$$

$$= 3n - 5. \quad (47)$$

Ist $d = 2$ haben wir in der Diagonale von der Sparse-Matrix $n - 1$ mal die Sparse-Matrix von Dimension 1. Daher haben wir schon einmal $(n - 1) \cdot f_{\text{sparse}}^{(d=1)}(n)$ Einträge ungleich 0. Weiterhin haben wir zwei mal jeweils über und unter der Sparse-Matrizen von $d = 1$ $n - 2$ mal die Identitätsmatrizen, welche jeweils $n - 1$ Einträge haben. Mit anderen Worten erhalten wir noch einmal $2(n - 2)(n - 1)$ Einträge. Alles zusammengesetzt erhalten wir

$$f_{\text{sparse}}^{(d=2)}(n) = \underbrace{(n-1)}_{\text{Anzahl der Sparse-Matrizen von } d=1} f_{\text{sparse}}^{(d=1)}(n) + \underbrace{2(n-2)(n-1)}_{\text{Gesamtanzahl der Einträge der Identitätsmatrizen}} \quad (48)$$

$$= (n-1)(3n-5) + 2n^2 - 6n + 4 \quad (49)$$

$$= 3n^2 - 8n + 5 + 2n^2 - 6n + 4 \quad (50)$$

$$= 5n^2 - 14n + 9 \quad (51)$$

$$= 5(n-1)^2 - 4(n-1). \quad (52)$$

Der Schritt von Gleichung 51 zu Gleichung 52 kann leicht verifiziert werden, indem man die Gleichung 52 ausmultipliziert um die Gleichung 51 zu erhalten.

Für die Sparse-Matrix mit $d = 3$ haben wir in der Diagonale wieder $(n - 1)$ mal die Sparse-Matrix von der Dimension 2, also insgesamt $(n - 1) \cdot f_{\text{sparse}}^{(d=2)}(n)$ Einträge. Dann haben wir wieder in der oberen und unteren Diagonale jeweils $n - 2$ mal Identitätsmatrizen in der Größe $(n - 1)^2 \times (n - 1)^2$ also $(n - 1)^2$ Einträge für jedes $I_{(n-1)^2}$. Alles in einer Gleichung erhalten wir

$$f_{\text{sparse}}^{(d=3)}(n) = \underbrace{(n-1)}_{\text{Anzahl der Sparse-Matrizen von } d=2} f_{\text{sparse}}^{(d=2)}(n) + \underbrace{2(n-2)(n-1)^2}_{\text{Gesamtanzahl der Einträge der Identitätsmatrizen}} \quad (53)$$

$$= (n-1) \cdot (5(n-1)^2 - 4(n-1)) + 2n^3 - 8n^2 + 10n - 4 \quad (54)$$

$$= 5n^3 - 19n^2 + 23n - 9 + 2n^3 - 8n^2 + 10n - 4 \quad (55)$$

$$= 7n^3 - 27n^2 + 33n - 13 \quad (56)$$

$$= 7(n-1)^3 - 6(n-1)^2 \quad (57)$$

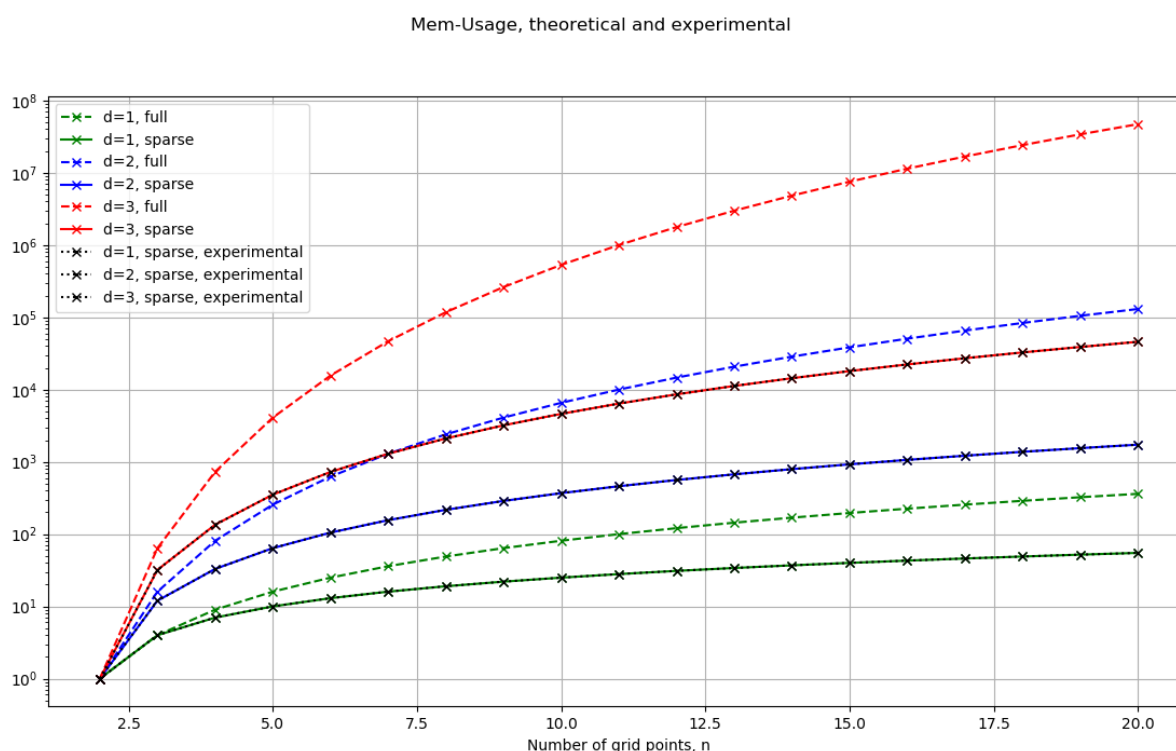
Wieder ist der Schritt von Gleichung 56 zu Gleichung 57 nachzuvollziehen, indem man die Gleichung 57 ausmultipliziert. \square

3 Experimente

Mit einem eigens dafür entworfenen Programm (`experimente_serie2.py`) wurden die Werte der theoretischen Erwägungen der Gre einer voll besetzten Matrix (auch Null-

Elemente belegen Speicherplatz) sowie der der nicht-NULL enthaltenden Elemente der dnnbesetzten (sog. Sparse-)Matrizen berechnet. Weiterhin wurde von diesem Programm auch die Klasse `SparseMat` aus Teil 1 dieser Serie importiert, und die realweltlich realisierten Elemente-Anzahlen der sparse-Matrizen ausgewertet. Beides fr die Dimensionen 1 bis 3 und Sttzwerteanzahlen von 2 bis 20.

Wie sich in der Grafik sehen lsst, verlaufen die schwarzen Graphen direkt auf den bunten Graphen der Sparse-Matrizen.



Dies bedeutet: es stimmen die theoretischen und die experimentellen Werte des Speicherbedarfs der Sparse-Matrizen berein. Die Ergebnisse sind also konsistent.

Ebenso ist zu erkennen, da der Speicherbedarf der voll besetzten Matrizen wesentlich grer ist, als der der Sparse-Matrizen.

Der Anstieg mit der Anzahl der Dimensionen, farblich unterschieden, ist ebenfalls leicht erkennbar.

Literatur

- [1] Prof. Dr. Helga Baum, *Analysis 1 und 2*, Skript zur Vorlesung Analysis 1 und 2, 2015.

- [2] Axel Kröner, *Numerische lineare Algebra*, Vorlesungsskriptum zur Numerische lineare Algebra, 2018.