Universität Konstanz
FB Mathematik & Statistik
Prof. Dr. M. Junk
Dr. M. Rheinländer

Ausgabe: 06. Nov., WS 07/08

Numerik von Gleichungssystemen

2. Übungsblatt

Aufgabe 2.0: Zweifelhafte Extremstellen – Programmierfehler oder Denkfehler?

Die numerischen Lösungen (Aufgabe 1.1e)) einiger Übungsteilnehmer wiesen deutliche Extremstellen im Inneren des Rechtecks auf. Mehr noch: das Potential ϕ übertraf dort sogar die vorgeschriebenen Werte am Rand. Diese Beobachtungen scheinen der physikalischen Intuition zu widersprechen: Betrachtet man das Randwertproblem als ein mathematisches Modell für den elektrischen Stromfluß in einer dünnen Leiterplatte, so wird man im wesentlichen ein Potential erwarten, welches in Richtung des Stromflusses monoton fällt.

Klären Sie diese Ungereimtheiten auf! Benutzen Sie dazu einerseits allgemeine Kenntnisse über partielle Differentialgleichungen (falls Sie bereits eine PDE-Vorlesung gehört haben). Untersuchen Sie andererseits die diskreten Gleichungen. Lassen diese (lokale) Extremstellen im Inneren zu?

Aufgabe 2.1: Zur LR-Zerlegung (Wiederholung)

Wiederholen Sie die folgenden Aspekte zur LR-Zerlegung:

a) Kriterien für die Durchführbarkeit (mit und ohne Zeilenvertauschung),

b) Eindeutigkeit,

c) Erhalt der Bandbreite,

d) Implementierungsmöglichkeiten.

Aufgabe 2.2: Umnumerierungstrategien zur Speicherminimierung & Effizienzsteigerung

Beim Lösen von Gleichungssystemen mittels der LR-Zerlegung, können Dreickematrizen L und R entstehen, welche über weit mehr von Null verschiedene Matrixelemente verfügen als die Ausgangsmatrix $A = LR$. Insbesondere müssen L und R keineswegs dünn besetzt sein, obgleich dies für A zutreffen mag. Dies kann bei sehr großen Gleichungssystemen zu Speicherplatzproblemen führen.
Abhilfe kann dadurch erzielt werden, daß die Matrixelemente von A in einem Preprocessing Schritt umnumeriert werden, bevor die eigentliche LR-Zerlegung startet. Eine Reihe von Algorithmen stehen hierfür zur Verfügung. Neben einer Verringerung des Speicherbedarfs läßt sich auch eine effizientere Berechnung (weniger Rechenoperationen) der Lösung erzielen.
In der Vorlesung wurden die Grundversionen des *Reverse Cuthill-McKee* Algorithmus und des *Minimum Degree Ordering* vorgestellt, deren Wirkungs- und Funktionesweise im Folgenden getestet und untersucht werden soll.

a) *(Experimentieren)* Versuchen Sie, die die Wirkung der in der Vorlesung behandelten Umnumerierungsalgorithmen möglichst eindrucksvoll an einfachen Beispielen zu demonstrieren. Verwenden Sie dazu z.B. die von Matlab bereitgestellten Implementierungen, welche sich mit `symrcm` und `amd` aufrufen lassen (auf weitere verwandte Routinen wird in der Matlab Hilfe verwiesen). Vergleichen Sie die Besetzungsmuster der Matrizen A, L und R (ohne bzw. mit vorheriger Umnumerierung), indem Sie diese mit dem Kommando `spy` visualisieren.

b) *(Anwenden)* Wenden Sie die Umnumerierungsverfahren auf die in Aufgabe 1.1 erzeugten Matrizen an und visualisieren Sie die Umnumerierung der Gitterpunkte. Wie groß ist die prozentuale Reduktion des Speicherbedarfs für L und R? Welcher Speichervorteil ergibt sich bei einer analogen Diskretisierung in drei Raumdimensionen?

c) *(Verstehen)* Versuchen Sie die Funktionsweise der Algorithmen zu verstehen. Warum läßt sich in vielen Fällen eine Verringerung des benötigten Speichers erzielen? Unter welchen Umständen sind die Umordnungsalgorithmen besonders effektiv bzw. wenig effektiv?

Aufgabe 2.3: Matrix-Inversion – Leverrier's Methode

Im folgenden sei A eine invertierbare $n \times n$ Matrix.

a) Beweisen Sie, daß sich A^{-1} als Linearkombination von $A^0, ..., A^{n-1}$ darstellen läßt.

   Hinweis: Die Behauptung läßt sich auch so formulieren: Zu jeder invertierbaren Matrix gibt es ein Polynom p vom Grad $n-1$ mit $A^{-1} = p(A)$.

b) Leiten Sie aus der obigen Beobachtung ein Verfahren zur Berechnung von A^{-1} her.

   Hinweis: Es wird wohl darauf ankommen, die Koeffiezienten des charakteristischen Polynoms von A geschickt rekursiv zu berechnen. **Halt!** Nur wer trotz eines gewissen Zeiteinsatzes nicht zu einem sinnvollen Ansatz gelangt ist oder die Aufgabe bereits gelöst hat, ist berechtigt weiterlesen.

c) Beweisen Sie, daß die Inverse durch die folgende abbrechende Rekursion bestimmt werden kann:

$$\begin{aligned} B_0 &= I \\ \alpha_k &= k^{-1}\,\mathrm{spur}(A_k B_{k-1}), \qquad B_k = -AB_{k-1} + \alpha_k I \quad \text{für} \quad k = 1, ..., n. \end{aligned}$$

   Es ist dann $B_n = 0$ und $A^{-1} = \alpha_n^{-1} B_{n-1}$.

d) Schätzen Sie ab, wieviele Flops (*floiting point operations* = Grundrechenoperationen mit Gleitkommazahlen) in Abhängigkeit von der Matrixdimension n notwendig sind, um die Inverse nach der obigen Rekursion zu berechnen. Vergleichen Sie dies mit dem Aufwand zur Berechnung der Inversen mittels LR-Zerlegung.

Anmerkung: Leverrier (1811-1877) war ein französischer Astronom. Seine bekannteste Leistung besteht darin, die Existenz des damals noch unbekannten achten Planeten, Neptun, theoretisch vorausgesagt zu haben. Genauer löste Leverrier ein sogenanntes *inverses Problem*, indem er aus beobachteten Bahnabweichungen des Uranus die ungefähre Bahn eines Nachbarplaneten berechnete. Am Himmel wurde Neptun erst später anhand der Voraussagen Leverriers vom deutschen Astronomen Galle entdeckt.