

Übung zum Fach Rechnerunterstützte Mechanik I

J. Ruck, H. Erdle, T.-A. Langhoff, T. Böhlke

Chair for Continuum Mechanics
Institute of Engineering Mechanics
Department of Mechanical Engineering
Karlsruhe Institute of Technology (KIT)

WS 2017/2018



Ü4: Gradienten- und CG - Verfahren

Gradientenverfahren

Motivation

- Lösung eines konvexen Minimierungsproblemess über die Methode des steilsten Abstiegs
- Minimierungsprobleme z.B. in der Atomistik relevant (Energiminimierung)
- Voraussetzung ist Konvexität der Potentialgleichung bzgl. der Lösungsvariablen
- Als Suchrichtung dient in jedem Iterationsschritt der negative Gradient

Ansatz

- Minimierung eines konvexen Potentials $f(\boldsymbol{x}) \Rightarrow \nabla(f(\boldsymbol{x}^*)) = 0$ mit Lösung \boldsymbol{x}^*
- Residuum $\boldsymbol{r} = -\nabla(f(\boldsymbol{x}))$

Lösungsansatz

- Approximiere die exakte Lösung \mathbf{x}^* durch

$$\mathbf{x}^{(j+1)} \approx \mathbf{x}^{(0)} + \sum_{i=1}^j \alpha_i \mathbf{d}_i.$$

- mit der Suchrichtung \mathbf{d}_i und eines Schrittweitenparameters α_i

$$\mathbf{d}_i = -\nabla(f(\mathbf{x}_i)).$$

- Bestimmung des Schrittweitenparameters aus Minimierung des Funktionswertes im aktuellen Schritt

$$\min\{f(\mathbf{x}_{i+1}), \alpha_i\} \Rightarrow \alpha_i.$$

$$\text{z.B. } f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \Rightarrow \alpha_i = \frac{\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_i}{\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{A} \mathbf{d}_i}.$$

Verfahren der konjugierten Gradienten

Motivation

- In den meisten wissenschaftlichen Anwendungen sind **lineare Gleichungssysteme** (LGS) zu lösen;
- Die Systemmatrizen der LGS sind oft **spd-Matrizen**;
- Jede **spd-Matrix** $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ induziert ein **Skalarprodukt** (SKP) auf \mathbb{R}^n :

$$\langle x, y \rangle_A \stackrel{\text{Def.}}{=} x^T A y;$$

- Bzgl. jedes SKP ist **Orthogonalität** der Vektoren $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$ definiert:

$$\langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j \rangle_A = \delta_{ij} \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_i \rangle_A;$$

Lösungsansatz

Ansatz

Approximiere die exakte Lösung \boldsymbol{x}^* durch

$$\boldsymbol{x}^{(j)} \approx \boldsymbol{x}^{(0)} + \sum_{i=1}^j \alpha_i \boldsymbol{p}_i,$$

mit **Suchrichtungen**, die **orthogonal** bzgl. $\langle \bullet, \bullet \rangle_A$ sind:

$$\langle \boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_j \rangle_A = \delta_{ij} \langle \boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_i \rangle_A;$$

⇒ **Verfahren der konjugierten Gradienten** (s. HA 3).

Zusatzmaterial zum CG-Verfahren über ILIAS verfügbar (engl.)

Wichtige Eigenschaften

- 👉 Für $A \in \text{Sym}_+(\mathbb{R}^n)$: Berechnung der **exakten** Lösung für jede rechte Seite in **höchstens** n Iterationen
- 👉 Die Norm des Residuums bezogen auf die Norm der rechten Seite

$$E^{(j)} = \|Ax^{(j)} - y\| / \|y\|$$

reduziert sich meist schnell

- 👉 Lösungskomponenten mit Bezug auf die größten Eigenwerte werden i.A. in den ersten Iterationen berechnet
- 👉 Diagonaldominanz der spd-Matrix beschleunigt Konvergenzverhalten
- 👉 Einfache Implementierung
- 👉 Mit Modifikationen: Behandlung **nicht-linearer Gleichungen** und **nicht-linearer Optimierungsprobleme**
- 👉 Weit verbreitet und etabliert (Konvergenzstudien, ...)

- 👎 Nur für **spd-Matrizen**
- 👎 **Worst case:** n Iterationen *notwendig* (selten)
- 👎 Rechenaufwand nicht im Vorhinein bekannt