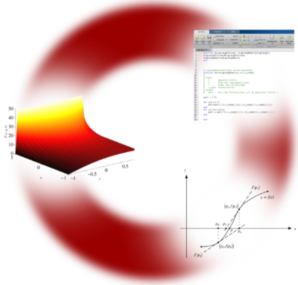
Lehrstuhl für Numerische Mechanik
TUM School of Engineering and Design
Technische Universität München

9. Lösung linearer Gleichungssysteme: direkte und iterative Verfahren

A Practical Course in Numerical Methods for Engineers

Barbara Wirthl, M.Sc.
Technische Universität München
Lehrstuhl für Numerische Mechanik



8. Aufgabenblatt: Initialisieren

Schleife über alle Zeitschritte

$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{f} = \boldsymbol{0}, (\boldsymbol{A}_{\text{no DBC}} = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{f}_{\text{no DBC}} = \boldsymbol{0})$

Schleife über alle Elemente

`Funktion Evaluieren()`

berechne $\boldsymbol{A}^{(e)}$ and $\boldsymbol{f}^{(e)} \longleftarrow \boldsymbol{T}^{(e),n}, \boldsymbol{x}^{\text{node}}, \Delta t, \theta, N(\underline{\xi}), \ldots$

`Funktion Assemblieren()`

$\boldsymbol{A}_{\text{no DBC}} = \boldsymbol{A}_{\text{no DBC}} + \boldsymbol{A}^{(e)}, \; \boldsymbol{f}_{\text{no DBC}} = \boldsymbol{f}_{\text{no DBC}} + \boldsymbol{f}^{(e)}$

`Funktion Dirichlet()`

$\boldsymbol{A}_{\text{no DBC}} \longrightarrow \boldsymbol{A}, \; \boldsymbol{f}_{\text{no DBC}} \longrightarrow \boldsymbol{f}$

`Funktion Lösen()`

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}^{n+1} = \boldsymbol{f} \longrightarrow \boldsymbol{T}^{n+1}$

Pingo

Anordnung der Schleifen

In welcher Reihenfolge sollten die Schleifen angeordnet werden (von außen nach innen)?

- Zeitschritte → Elemente → Zeilen → Spalten → Gaußpunkte
- Zeitschritte → Elemente → Gaußpunkte → Zeilen → Spalten ✓
- Elemente → Gaußpunkte → Zeilen → Spalten → Zeitschritte

8. Aufgabenblatt: Anordnung der Schleifen in Evaluieren

`Funktion Evaluieren()`

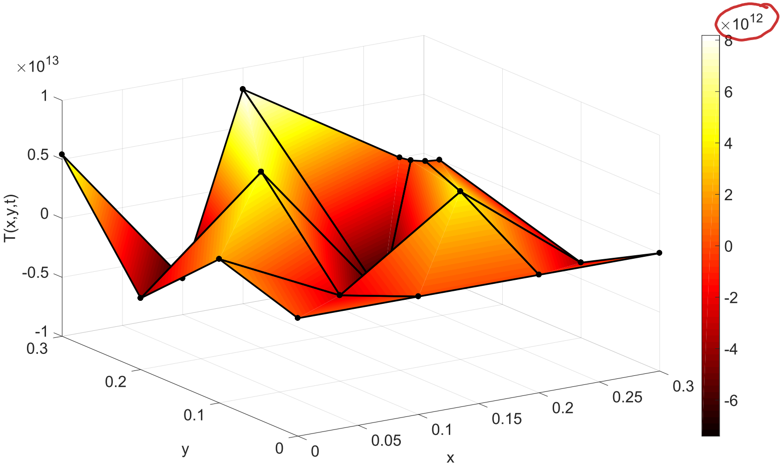
- Schleife über alle Gaußpunkte im Element
  - $\det(J(\xi_{\boldsymbol{k}})), J(\xi_{\boldsymbol{k}})^{-1} = \frac{\partial \xi}{\partial \boldsymbol{x}}$ berechnen
  - Schleife über alle Zeilen der Elementmatrix
    - Schleife über alle Spalten der Elementmatrix
      - Anwenden der Zeitintegrationsmethoden
        z.B. `Funktion OST()`, ...

Stabilität der Zeitintegrationsverfahren

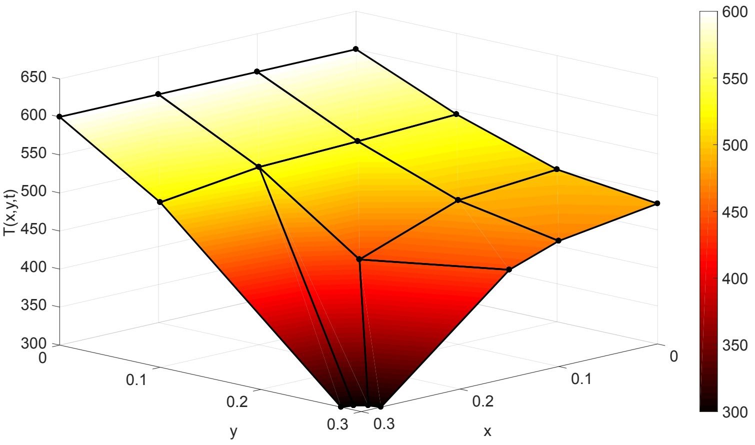
Welche/s Zeitintegrationsverfahren kann/können Instabilitäten aufweisen? Mehrere Antworten sind möglich.

- Adams-Bashforth-Verfahren 2. Ordnung (AB2)
- Adams-Moulton-Verfahren 3. Ordnung (AM3)
- BDF-Verfahren 2. Ordnung (BDF2)

8. Aufgabenblatt: Zeitintegrationsverfahren AB2 ($\Delta t = 500\,\mathrm{s}$)

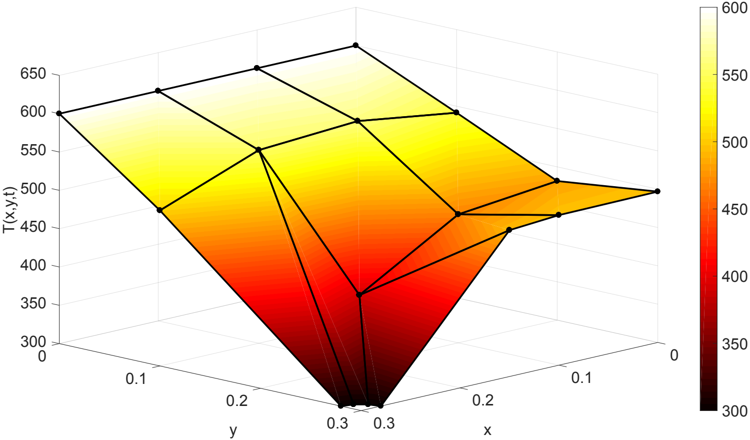


8. Aufgabenblatt: Zeitintegrationsverfahren AB2 ($\Delta t = 10\,\mathrm{s}$)



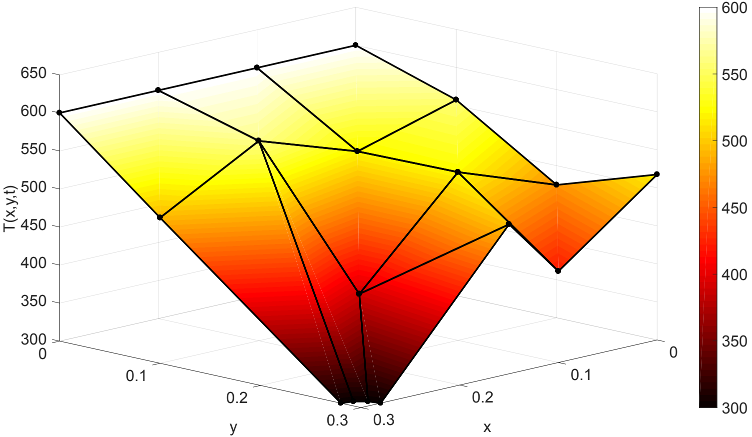
$T_{15}^{500} = 484.51$, $T_{16}^{500} = 465.07$, $T_{17}^{500} = 441.99$, $T_{18}^{500} = 300.0$

8. Aufgabenblatt: Zeitintegrationsverfahren AM3 ($\Delta t = 500\,\mathrm{s}$)



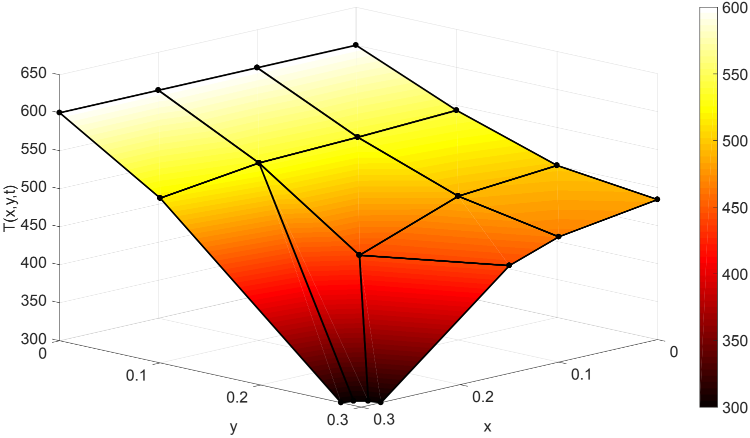
$T_{15}^{10} = 496.81$, $T_{16}^{10} = 495.79$, $T_{17}^{10} = 490.98$, $T_{18}^{10} = 300.0$

8. Aufgabenblatt: Zeitintegrationsverfahren AM3 ($\Delta t = 250\,\text{s}$)



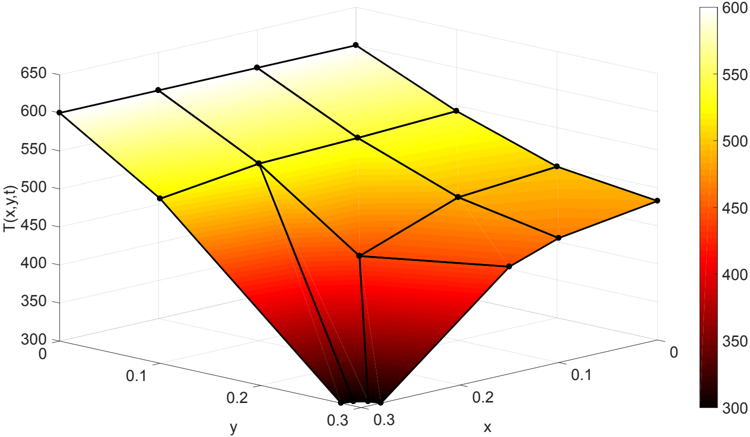
$T_{15}^{20} = 517.53,\ T_{16}^{20} = 419.95,\ T_{17}^{20} = 496.52,\ T_{18}^{20} = 300.0$

8. Aufgabenblatt: Zeitintegrationsverfahren AM3 ($\Delta t = 100\,\mathrm{s}$)



$$T_{15}^{50} = 484.25,\ T_{16}^{50} = 464.85,\ T_{17}^{50} = 441.81,\ T_{18}^{50} = 300.0$$

8. Aufgabenblatt: Zeitintegrationsverfahren BDF2 ($\Delta t = 500\,\mathrm{s}$)



$T_{15}^{10} = 482.74$, $T_{16}^{10} = 463.55$, $T_{17}^{10} = 440.79$, $T_{18}^{10} = 300.0$

Problemstellung

Lineares Gleichungssystem in Matrixform:

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

$\boldsymbol{A}$ ... bekannte Matrix
$\boldsymbol{b}$ ... bekannter Vektor
$\rightarrow \boldsymbol{x}$ ... gesuchter Vektor

Schleife über alle Zeitschritte

$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{f} = \boldsymbol{0}, (\boldsymbol{A}_{\text{no DBC}} = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{f}_{\text{no DBC}} = \boldsymbol{0})$

Schleife über alle Elemente

`Funktion Evaluieren()`

berechne $\boldsymbol{A}^{(e)}$ and $\boldsymbol{f}^{(e)} \longleftarrow \boldsymbol{T}^{(e),n}, \boldsymbol{x}^{\text{node}}, \Delta t, \theta, N(\underline{\xi}), \ldots$

`Funktion Assemblieren()`

$\boldsymbol{A}_{\text{no DBC}} = \boldsymbol{A}_{\text{no DBC}} + \boldsymbol{A}^{(e)}, \boldsymbol{f}_{\text{no DBC}} = \boldsymbol{f}_{\text{no DBC}} + \boldsymbol{f}^{(e)}$

`Funktion Dirichlet()`

$\boldsymbol{A}_{\text{no DBC}} \longrightarrow \boldsymbol{A}, \boldsymbol{f}_{\text{no DBC}} \longrightarrow \boldsymbol{f}$

`Funktion Lösen()`

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}^{n+1} = \boldsymbol{f} \longrightarrow \boldsymbol{T}^{n+1}$

Vergleich der Lösungsstrategien

$x^0 \rightarrow x^1 \rightarrow x^2 \rightarrow .$

Direkte Methoden

Lösen exakt durch mathematische Umformungen (Rundungsfehler!)

Beispiele:

- Gauß'sches Eliminationsverfahren
- LU-Zerlegung
- Cholesky-Faktorisierung

Iterative Methoden

Wiederholtes Bilden von Matrix-Vektor-Produkten zur Approximation der Lösung

Liefern keine exakte Lösung, sind jedoch oft effektiver, insbesondere für schwach besetzte Matrizen

Beispiele:

- Jacobi-Verfahren
- Gauß-Seidel-Verfahren
- Gradientenverfahren

Direkte Methoden: Gauß'sches Eliminationsverfahren

Zwei Etappen:

1. Vorwärtselimination
2. Rückwärtseinsetzen

Elementare Zeilenumformungen zur Vorwärtselimination:

1. Vertauschen zweier Zeilen

$$(\boldsymbol{A}_i) \leftrightarrow (\boldsymbol{A}_j)$$

2. Multiplikation einer Zeile mit dem Faktor λ

$$(\lambda \boldsymbol{A}_i) \rightarrow (\boldsymbol{A}_i)$$

3. Addition des λ-fachen einer Zeile zu einer anderen Zeile

$$(\boldsymbol{A}_i + \lambda \boldsymbol{A}_j) \rightarrow (\boldsymbol{A}_i)$$

Direkte Methoden: Gauß'sches Eliminationsverfahren

Vorwärtselimination:

1. Erweiterte Koeffizientenmatrix aufstellen

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1(n-1)} & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2(n-1)} & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{(n-1)1} & a_{(n-1)2} & \dots & a_{(n-1)(n-1)} & a_{(n-1)n} & b_{(n-1)} \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{n(n-1)} & a_{nn} & b_n \end{array}\right)$$

2. Berechne Multiplikatoren $m_{ji} = \frac{a_{ji}}{a_{ii}}$ für $j = i+1, i+2, \dots, n$
3. Eliminiere die Matrixzeilen A_j mit

$$(A_j - m_{ji} A_i) \to (A_j)$$

$\longrightarrow$ Ziel: Zeilenstufenform

Direkte Methoden: Gauß'sches Eliminationsverfahren

Rückwärtseinsetzen:

$$\left(\begin{array}{ccccc|c}
\bar{a}_{11} & \bar{a}_{12} & \dots & \bar{a}_{1(n-1)} & \bar{a}_{1n} & \bar{b}_1 \\
0 & \bar{a}_{22} & \dots & \bar{a}_{2(n-1)} & \bar{a}_{2n} & \bar{b}_2 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \dots & \bar{a}_{(n-1)(n-1)} & \bar{a}_{(n-1)n} & \bar{b}_{(n-1)} \\
0 & 0 & \dots & 0 & \bar{a}_{nn} & \bar{b}_n
\end{array}\right)$$

Beispiel

$$(A_j - m_{ji}A_i) \rightarrow (A_j) \text{ mit } m_{ji} = \frac{a_{ji}}{a_{ii}}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \longrightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 1 \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{array}\right]$$

Auf Zeilenstufenform bringen:

$$A_2 - m_{21}A_1 \rightarrow A_2$$
$$\text{mit } m_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}} = \frac{2}{1} = 2$$

$$A_3 - m_{31}A_1 \rightarrow A_3$$
$$\text{mit } m_{31} = \frac{a_{31}}{a_{11}} = \frac{3}{1} = 3$$

$$\left.\right\} \quad \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & -2 & 1 & -2 \end{array}\right]$$

$$A_3 - m_{32}A_2 \rightarrow A_3$$
$$\text{mit } m_{32} = \frac{a_{32}}{a_{22}} = \frac{-2}{-1} = 2$$

$$\left.\right\} \quad \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{array}\right]$$

Beispiel

$$\boxed{(A_j - m_{ji}A_i) \to (A_j) \text{ mit } m_{ji} = \frac{a_{ji}}{a_{ii}}}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{array}\right]$$

Rückwärtseinsetzen:

$$x_3 = \frac{0}{-1} = 0$$

$$x_2 = \frac{-1 - 1 \cdot 0}{-1} = 1$$

$$x_1 = \frac{1 - 0 \cdot 0 - 2\,1}{1} = -1$$

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Iterative Verfahren: Gradienten-Methode

Lösung des linearen Gleichungssystems:

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \rightarrow \quad \text{Residuum:} \quad \boldsymbol{r} = \underline{b} - \underline{A}\,\underline{x}$$

Äquivalent zu folgender Minimierungsaufgabe:

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\mathsf{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^\mathsf{T}\boldsymbol{x}$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\left(\left(\boldsymbol{x}^\mathsf{T}\boldsymbol{A}\right)^\mathsf{T} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right) - \boldsymbol{b} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}^\mathsf{T}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right) - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$$

Unsere gesuchte Lösung ist das Minimum $\boldsymbol{x}^*$ von $f(\boldsymbol{x})$, da dort gilt:

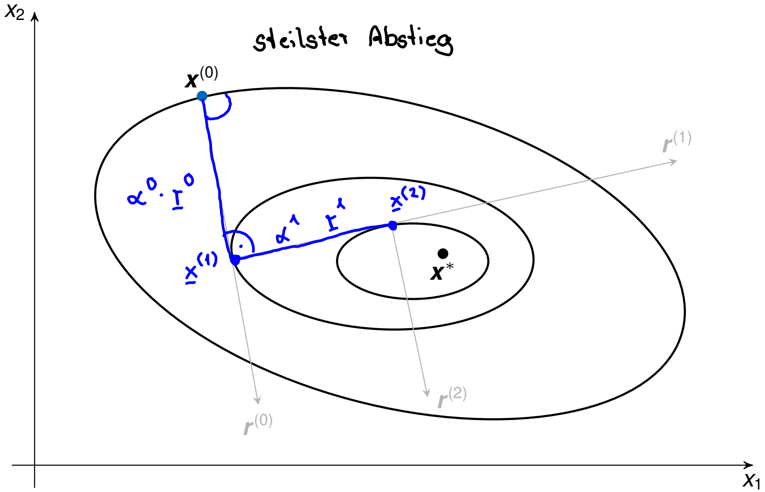
$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \underline{A}\,\underline{x}^* - \underline{b} = \underline{0} \quad \rightarrow \quad \underline{r} = \underline{0}$$

Einschränkung: symmetrische positiv definite Matrizen

Iterative Verfahren: Gradienten-Methode

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{x}$$



Iterative Verfahren: Gradienten-Methode

Idee: Entlang des steilsten Abstiegs suchen

Suche das Minimum $\boldsymbol{x}^*$ mit $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$

Suchrichtung	$\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}^{(k)}$
Relaxationsparameter	$\alpha_k = \dfrac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r}^{(k)}}{\left(\boldsymbol{r}^{(k)}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}\,\boldsymbol{r}^{(k)}}$
Neue Approximation	$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{r}^{(k)}$

Effizienter: Einsparung einer Matrix-Vektor-Multiplikation

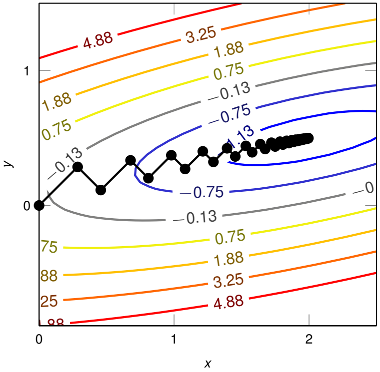
Iterative Verfahren: Gradienten-Methode

Implementierung:

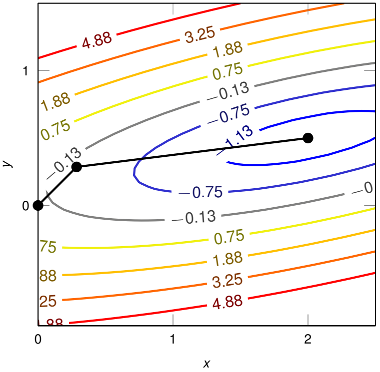
Starte mit $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}^{(0)}, \quad k = 0$
while $\left(\left\|\boldsymbol{r}^{(k)}\right\|_2 > r_{\mathrm{tol}} \quad \text{and} \quad k < iter_{\max}\right)$
Matrix-Vektor-Produkt $\boldsymbol{v}^{(k)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}$
Relaxationsparameter $\alpha_k = \dfrac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)}\right)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{r}^{(k)}}{\left(\boldsymbol{r}^{(k)}\right)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{v}^{(k)}}$
Neue Approximation $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{r}^{(k)}$
Residuenvektor $\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{v}^{(k)}$
Erhöhung des Schrittzählers $k = k + 1$

Iterative Verfahren: Vergleich

Gradienten-Methode



Konjugierte-Gradienten-Methode



Iterative Verfahren: Konjugierte-Gradienten-Methode

Starte mit $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}^{(0)}, \quad \boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)}, \quad k = 0$

while $\left(\left\|\boldsymbol{r}^{(k)}\right\|_2 > r_{\text{tol}} \quad \text{and} \quad k < iter_{\max}\right)$

Matrix-Vektor-Produkt	$\boldsymbol{v}^{(k)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}$
Relaxationsparameter	$\alpha_k = \dfrac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{r}^{(k)}}{\left(\boldsymbol{p}^{(k)}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{v}^{(k)}}$
Neue Approximation	$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k\boldsymbol{p}^{(k)}$
Residuenvektor	$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k\boldsymbol{v}^{(k)}$
Parameter berechnen	$\beta_{k+1} = \dfrac{\left(\boldsymbol{r}^{(k+1)}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{r}^{(k+1)}}{\left(\boldsymbol{r}^{(k)}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{r}^{(k)}}$
Neue konjugierte Suchrichtung	$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} + \beta_{k+1}\boldsymbol{p}^{(k)}$
Erhöhung des Schrittzählers	$k = k + 1$

Symmetrische Matrix bei Dirichlet-Rändern

① $$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ 5.0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -15 \\ -30 \end{bmatrix}$$

$$\cancel{3 \quad 6 \quad 1}$$

② $$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 6 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 5.0 \end{bmatrix}$$

ursprünglich $\boldsymbol{A}$ symmetrisch $\rightarrow$ zerstört durch Dirichlet-Randbedingung

③ $$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -15.0 \\ -30.0 \\ 5.0 \end{bmatrix}$$

$\rightarrow$ wieder symmetrisch

Und los...

Nächste Tutorsprechstunden:

Montag	16.01.	10:00 – 12:15 Uhr	MW1264
Mittwoch	18.01.	15:30 – 17:45 Uhr	MW1264

Letztes Aufgabenblatt:

Donnerstag	19.01.	17:00 – 17:45 Uhr	MW2050 + Zoom