

5.1.3 Nachiteration

Zur Kontrolle des Resultats ist eine Nachiteration sinnvoll. Ist \vec{x}' die Lösung des LGS $A\vec{x} = \vec{b}$, dann ist das Residuum definiert als:

$$\vec{r} = \vec{b}' - \vec{b} = A\vec{x}' - \vec{b}$$

Das Residuum kann benutzt werden, um auf $\Delta\vec{x} = \vec{x}' - \vec{x}$ zu schließen, da

$$\vec{r} = A\Delta\vec{x} \Leftrightarrow \Delta\vec{x} = A^{-1}\vec{r}$$

gilt, und damit:

$$\|\Delta\vec{x}\| = \|A^{-1}\vec{r}\| \leq \|A^{-1}\| \|\vec{r}\|$$

Für den relativen Fehler gilt mit $\|\vec{b}\| \leq \|A\| \|\vec{x}\|$

$$\frac{\|\Delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\vec{r}\|}{\|\vec{b}\|}$$

Die Zahl $\kappa(A) := \|A\| \|A^{-1}\|$ nennt man Konditionszahl von A .

Für viele physikalische Probleme ist κ groß, was große Fehler im Ergebnis verursacht. Für die Nachiteration löst man

$$A\Delta\vec{x}' = \vec{r} \quad \text{nach } \Delta\vec{x}'$$

Man prüft dann, ob $\|\Delta\vec{x}'\| \ll \|\vec{x}'\|$ ist und korrigiert gegebenenfalls die alte Lösung mit:

$$\vec{x}'' = \vec{x}' - \Delta\vec{x}'$$

5.1.4 Iterative Verfahren

Iterative Verfahren lohnen sich bei großen Matrizen, $n \gg 10\,000$, die dünn besetzt ($O(n)$) sind. Das LGS kann in Fixpunktform geschrieben werden:

$$A \vec{x} = \vec{b} \rightarrow \vec{x} = H \vec{x} + \vec{c}$$

Ein Fixpunkt existiert genau dann, wenn $\rho(H) < 1$. Ausgangspunkt ist die Umformulierung:

$$\begin{aligned} \vec{x}^{k+1} &= \vec{x}^k + B^{-1}(\vec{b} - A\vec{x}^k) = \underbrace{(1 - B^{-1}A)}_H \vec{x}^k + \underbrace{B^{-1}\vec{b}}_{\vec{c}} \\ &:= H \vec{x} + \vec{c} \end{aligned}$$

B wird so gewählt, dass es leicht zu invertieren ist und $B^{-1} \approx A^{-1}$. Wir nehmen an, dass $a_{ii} \neq 0$, so gilt für die i -te Zeile:

$$a_{i0}x_0 + \dots + a_{i,n-1}x_{n-1} = b_i$$

welche nach x_i aufgelöst werden kann zu:

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{e=0 \\ e \neq i}}^{n-1} a_{ie} x_e \right) \quad i=0, 1, \dots, n-1$$

Dies kann sofort auf die Form:

$$\vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + D^{-1}(\vec{b} - A\vec{x}^k)$$

gebracht werden, wobei $B := D = \text{diag.}(a_{00}, \dots, a_{n-1, n-1})$ oder

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{e=0}^{n-1} a_{ie} x_e^k \right)$$

Dieses Verfahren wird Gesamtschritt- oder Jacobi-Verfahren genannt, da der gesamte Vektor \vec{x} in jedem Schritt benutzt wird. Wird Zeile für Zeile berechnet, so können natürlich die vorangegangenen Zeilen benutzt werden und man erhält:

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{e=0}^{i-1} a_{ie} x_e^{k+1} - \sum_{e=i}^{n-1} a_{ie} x_e^k \right)$$

Dieses Verfahren wird Einzelschritt- oder Gauß-Seidel-Verfahren genannt.

6. Differentialgleichungen

Wir betrachten hier Differentialgleichungen (DGL) einer unabhängigen Veränderlichen (Bahnkurven) und teilweise auch von mehreren Veränderlichen (Felder). Es gibt zwei Problemklassen

- a) Randwertprobleme
- b) Anfangswertprobleme

Wir nehmen hier immer an, dass eine Lösung existiert und eindeutig ist.

6.1 Randwertprobleme

Wir untersuchen zunächst gewöhnliche DGLs in einer Veränderlichen, z.B.

$$-y''(x) = f(x) \quad ; \quad y(a) = \alpha \quad ; \quad y(b) = \beta$$

Dies kann im Intervall $[a, b]$ in äquidistante Abschnitte der Länge h diskretisiert werden, wobei $f(x_i) := f_i$ und eine Näherungslösung gegeben ist durch $u_i \approx y_i = y(x_i)$. Durch Einsetzen der Ableitung durch den Differenzenquotienten kann obige DGL überführt werden zu:

$$\frac{1}{h} (-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}) = f_i \quad i = 1, \dots, n$$

$$u_0 = \alpha \quad u_{n+1} = \beta$$

Multiplikation und h^2 und Ersetzen von u_0 und u_{n+1} liefert: $A\vec{u} = \vec{g}$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & 0 \\ -1 & 2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad \vec{u} = (u_1, \dots, u_n)^T$$
$$\vec{g} = (h^2 f_1 + \alpha, h^2 f_2, \dots, h^2 f_n + \beta)^T$$

Die Lösung \vec{u} der diskretisierten DGL kann nun durch Lösen des LGS gefunden werden.

Physikalisch relevant sind vor allem elliptische partielle DGL der Form:

$$\Delta f(\vec{x}) + g(\vec{x})f(\vec{x}) = h(\vec{x}) \quad (\text{Helmholtz-Gleichung})$$

mit dem Laplace-Operator

$$\Delta = \frac{\partial^2}{(\partial x_0)^2} + \dots + \frac{\partial^2}{(\partial x_{n-1})^2}$$

auf dem Gebiet $x \in \Omega$. Die Randbedingungen können von verschiedener Natur sein.

a) $f = \varphi$ auf dem Rand $\partial\Omega$ (Dirichlet-Randbedingung)

b) $\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} = \gamma$ auf $\partial\Omega$, wobei \vec{n} der Normalenvektor auf $\partial\Omega$ ist. (Neumann Randbed.)

c) $\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} + \alpha f = \beta$ (Cauchy Randbed.)

mit entsprechenden Funktionen $\alpha, \beta, \gamma, \varphi$ auf Ω

d) Eine weitere Möglichkeit Randbedingungen zu formulieren, vor allem bei unendlich ausgedehnten Gebieten, sind die (anti-)periodischen Randbedingungen. Das Problem wird auf einen d -dimensionalen Torus formuliert und alle Funktionen ϕ auf R gehorchen:

$$\phi(x + L_\mu \hat{\mu}) = \exp(i\pi \frac{\varphi}{L_\mu}) \phi(x)$$

mit dem Winkel φ und dem Umfang des Torus in Richtung $\hat{\mu}$:

- $\varphi = 0$: periodische Randbed.
- $\varphi/L_\mu = 1$: antiperiodische Randbed.
- φ beliebig: gedrehte Randbed.

Die Berechnung der Näherungslösung ist der des 1-dim. Falles sehr ähnlich:

- i) Diskretisierung von Ω
- ii) Diskretisierung von A
- iii) Aufstellen und Lösen des LGS

i) Diskretisierung z.B. auf einem isotropen Gitter mit Gitterabstand a in alle Raumrichtungen. Die Nachbarpunkte von x sind dann gegeben als $x + a\hat{\mu}$ und $x - a\hat{\mu}$ wobei $\hat{\mu}$ der Einheitsvektor in $\hat{\mu}$ -Richtung ist.

ii) Der Laplace-Operator kann durch einen Differenzenquotienten ersetzt werden:

$$\frac{\partial^2}{(\partial x_\mu)^2} f = \frac{f_{x+a\hat{\mu}} - 2f_x + f_{x-a\hat{\mu}}}{a^2}$$

Beispiel: 2-dim. Poisson-Gleichung

$$\Delta \phi(x) = -g(x) \quad (\text{Kontinuum})$$

$\phi(x)$: elektrostatisches Potential

$g(x)$: Ladungsverteilung

$$\xrightarrow{\text{disk}} 4\phi_x - \phi_{x-a\hat{0}} - \phi_{x-a\hat{1}} - \phi_{x+a\hat{0}} - \phi_{x+a\hat{1}} = a^2 g_x \quad (*)$$

Dies gilt nur direkt auf Ω und die Randbedingungen müssen berücksichtigt werden.

- Dirichlet: (*) gilt nur im inneren von Ω und ϕ wird auf dem Rand festgehalten
- Neumann/Cauchy: Im Allgemeinen kompliziert, deshalb betrachten wir nur den Spezialfall $\vec{n} = \vec{\mu}$ und $\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} = g = 0$

$$\Rightarrow 0 = \frac{\partial f}{\partial \vec{n}} \Big|_x \approx \frac{f_{x+a\hat{\mu}} - f_{x-a\hat{\mu}}}{a}$$

Das bedeutet, dass Ω über den Rand hinaus fortgesetzt werden kann mit $f_{x+a\hat{\mu}} = f_{x-a\hat{\mu}}$, denn dann verschwindet die Ableitung im Punkt x gerade. Für (*) folgt für $\vec{n} = \hat{1}$:

$$2\phi_x - \phi_{x-a\hat{0}}/2 - \phi_{x-a\hat{1}} - \phi_{x+a\hat{0}}/2 = a^2 g_x/2$$

iii) Das d -dimensionale Gitter wird nun auf einen 1-dim. Vektor abgebildet, z. B. ein quadratisches Gitter mit 3×3 Gitterpunkten:

$$\begin{array}{ccc} x_{00} & x_{01} & x_{02} \\ x_{10} & x_{11} & x_{12} \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} \end{array} \rightarrow (x_{00}, x_{01}, x_{02}, \dots, x_{20}, x_{21}, x_{22})^T$$

Genauso werden alle Funktionen abgebildet.

Der 2-dim. Laplace operator kann dann als 9×9 Matrix A geschrieben werden, die auf den Vektor $\vec{g} (g_{00}, \dots, g_{22})^T$ angewendet wird. Die Struktur von A wird i.A. komplizierter sein, als im 1-dim. Fall, abhängig vom Gebiet Ω und den Randbedingungen.

Bemerkungen

Die Matrix A sollte nicht explizit gespeichert werden, da die meisten Einträge 0 sind. Man definiert sich normalerweise eine Funktion, die die Multiplikation von A mit einem Vektor ausführt. Für A werden nur relevante ($\neq 0$) Elemente gespeichert.

Die Geometrie wird dann mit Hilfe einer Lookup-Table implementiert, ein Array, das die Position der Nachbarpunkte enthält.