Einführung in Computational Engineering
Grundlagen der Modellierung und Simulation
Dr. Arne Nägel

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wintersemester 2012/2013
Lösungsvorschlag der 7. Übung

Aufgabe 1 Fixpunktiteration zum Lösen linearer Gleichungssysteme (10 Punkte)

Das lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} 8x_1 + x_2 - 2x_3 &= 8 \\ x_1 + 18x_2 - 6x_3 &= -10 \\ 2x_1 + x_2 + 16x_3 &= -2 \end{aligned}$$

soll über eine Fixpunktiteration gelöst werden.

a) Zeigen Sie, dass das obige System zu der folgenden Fixpunktform $\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{x})$ äquivalent ist:

$$\begin{aligned} x_1 &= 0.2x_1 - 0.1x_2 + 0.2x_3 + 0.8 \\ x_2 &= -0.05x_1 + 0.1x_2 + 0.3x_3 - 0.5 \\ x_3 &= -0.1x_1 - 0.05x_2 + 0.2x_3 - 0.1 \end{aligned}$$

Stellen Sie dieses System in der Form $\Phi(x) = x + Bf(x)$ mit einer geeigneten Diagonalmatrix B dar.

b) Mit dem Startwert $\mathbf{x}^{(0)} = (1, -0.5, -0.3)^T$ führe man (mindestens) zehn Iterationsschritte durch. Berechnen Sie jeweils den Abstand $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|$ zur exakten Lösung des Gleichungssystems $\mathbf{x}^*$ sowie die Quotienten $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| / \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\|$. (*Hinweis: Die Berechnung können Sie z.B. automatisiert mit Matlab durchführen.*)

c) Zeigen Sie allgemein, dass die Fixpunktiteration konvergent ist. Bestimmen Sie dazu die Jacobi-Matrix $\left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial \mathbf{x}_j}\right)_{i,j=1}^3$ und prüfen Sie, ob deren Eigenwerte im Inneren des Einheitskreises liegen.

d) Beweisen Sie das folgende abstrakte Ergebnis: Es gebe ein $K < 1$ und es gelte $\|\Phi(\mathbf{x}) - \Phi(\mathbf{y})\| \leq K\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y}$. Es sei $\mathbf{x}^*$ ein Fixpunkt, d.h. es gelte $\mathbf{x}^* = \Phi(\mathbf{x}^*)$. Zeigen Sie, dass die Iterierten der Fixpunktiteration $\mathbf{x}^{(k+1)} = \Phi(\mathbf{x}^{(k)})$ die folgende Ungleichung erfüllen:

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\| \leq K^{k+1} \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\|.$$

Lösungsvorschlag

a) (3 Punkte) Das lineare Gleichungssystem schreibt sich in Matrix-Vektor-Notation $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ mit

$$A = \begin{pmatrix} 8 & 1 & -2 \\ 1 & 18 & -6 \\ 2 & 1 & 16 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 8 \\ -10 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Multiplikation mit der Matrix

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1}{10} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{20} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{20} \end{pmatrix}$$

entspricht einer Division der Zeilen durch 10 (1.Zeile) bzw. 20 (2. und 3. Zeile).

Die Fixpunktiteration $\mathbf{x} = \mathbf{x} + B(\mathbf{b} - A\mathbf{x})$, entspricht dem Gleichungssystem.

$$\begin{aligned} x_1 &= 0.2x_1 - 0.1x_2 + 0.2x_3 + 0.8 \\ x_2 &= -0.05x_1 + 0.1x_2 + 0.3x_3 - 0.5 \\ x_3 &= -0.1x_1 - 0.05x_2 + 0.2x_3 - 0.1 \end{aligned}$$

Da B regulär ist, gilt: $\mathbf{x} = \mathbf{x} + B(\mathbf{b} - A\mathbf{x}) \Leftrightarrow A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

b) Die Berechnung mit Matlab liefert die Näherung $\mathbf{x}^* = (1.0326\text{e}{+}00, \text{-}6.8338\text{e-}01, \text{-}2.1136\text{e-}01)^T$ sowie folgende Iterierte (3 Punkte):

k	0	1	2	3	4	5
x_1^k	1.0000e+00	9.9000e-01	1.0200e+00	1.0306e+00	1.0325e+00	1.0326e+00
x_2^k	-5.0000e-01	-6.9000e-01	-6.8900e-01	-6.8335e-01	-6.8282e-01	-6.8317e-01
x_3^k	-3.0000e-01	-2.3500e-01	-2.1150e-01	-2.0985e-01	-2.1086e-01	-2.1128e-01
$\|\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|\|$	2.0626e-01	4.9151e-02	1.3782e-02	2.4924e-03	7.5278e-04	2.2683e-04
$\frac{\|\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|\|}{\|\|\mathbf{x}^0-\mathbf{x}^*\|\|}$	1.0000e+00	2.3829e-01	6.6819e-02	1.2084e-02	3.6496e-03	1.0997e-03
$\left(\frac{\|\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|\|}{\|\|\mathbf{x}^0-\mathbf{x}^*\|\|}\right)^{1/k}$	1.0000e+00	2.3829e-01	2.5849e-01	2.2947e-01	2.4579e-01	2.5601e-01

k	6	7	8	9	10
x_1^k	1.0326e+00	1.0326e+00	1.0326e+00	1.0326e+00	1.0326e+00
x_2^k	-6.8333e-01	-6.8337e-01	-6.8337e-01	-6.8338e-01	-6.8338e-01
x_3^k	-2.1136e-01	-2.1136e-01	-2.1136e-01	-2.1136e-01	-2.1136e-01
$\|\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|\|$	4.4406e-05	6.7389e-06	1.6299e-06	4.0332e-07	9.9819e-08
$\frac{\|\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|\|}{\|\|\mathbf{x}^0-\mathbf{x}^*\|\|}$	2.1529e-04	3.2671e-05	7.9021e-06	1.9554e-06	4.8394e-07
$\left(\frac{\|\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|\|}{\|\|\mathbf{x}^0-\mathbf{x}^*\|\|}\right)^{1/k}$	2.4481e-01	2.2865e-01	2.3026e-01	2.3211e-01	2.3360e-01

c) Es ist

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{x}} = (I - BA) = \begin{pmatrix} 0.2 & -0.1 & 0.2 \\ -0.05 & 0.1 & 0.3 \\ -0.1 & -0.05 & 0.2 \end{pmatrix}.$$

Ein numerisches Auswerten der Eigenwerte der Matrix $I - BA$ ergibt (2 Punkte):

$$\lambda_1 = 0.24176,\ \lambda_2 = 0.12912 + 0.17577i,\ \lambda_3 = 0.12912 - 0.17577i$$

Da wegen

$$|\lambda_1| = 0.24176 < 1,\ |\lambda_2| = |\lambda_3| = 0.21810 < 1.$$

alle Eigenwerte im Inneren des Einheitskreises liegen, konvergiert das Verfahren für beliebige Startwerte.

d) Anwenden der Voraussetzungen liefert (2 Punkte):

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\| = \|\Phi(\mathbf{x}^{(k)}) - \Phi(\mathbf{x}^*)\| \le K\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| \le K^{k+1}\|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\|.$$

Man beachte, dass dieses Verhalten in der o.g. Tabelle beobachtet werden kann! Die Eigenwerte der Wurzel von $(I - BA)^T(I - BA)$ sind 1.1166e-01, 2.4963D-01, 4.1257D-01. Der größte Wert ist K.

Aufgabe 2 Zeitintegration (10 Punkte)

Betrachten Sie das folgende Differentialgleichungssystem 2. Ordnung:

$$\begin{aligned} \ddot{x}(t) + 101\dot{x}(t) + 100x(t) &= 0, \\ x(0) = 1.01,\ \dot{x}(0) &= -2. \end{aligned}$$

a) Zeigen Sie, dass dessen Lösung durch $x(t) = \frac{1}{100}\exp(-100\,t) + \exp(-t)$ gegeben ist. Gegen welchen Wert strebt diese Gleichung für $t \to \infty$?

b) In den Kapiteln 3.3.8 und 3.3.9 wurden Methoden zur Untersuchung steifer Differentialgleichungen eingeführt. Bestimmen Sie die dort eingeführten Zeitskalen $T_{\min}$ und $T_{\max}$ und überprüfen Sie, ob hier ein steifes System vorliegt. *(Hinweis: Als steif können Sie ein System ansehen, in dem sich die Zeitskalen mind. um den Faktor 100 unterscheiden.)*

c) Bestimmen Sie ebenfalls die dort empfohlenen Werte für die Simulationsdauer bzw. Diskretisierungsschrittweite:

$$t_f = 5T_{\max},\ h = \frac{1}{10}T_{\min}.$$

d) Geben Sie die Iterationsvorschrift für das explizite bzw. das implizite Eulerverfahren an. Leiten Sie aus den Iterationsvorschriften jeweils eine Beziehung zwischen der k-ten Iterierten $\mathbf{x}_k$ und dem Startwert $\mathbf{x}_0$ her.

e) Zeigen Sie theoretisch, dass beide Verfahren für die in Aufgabenteil c) ermittelte Schrittweite h für $k \to \infty$ gegen die asymptotische Lösung aus a) konvergieren. Für welche Schrittweiten h konvergieren das explizite bzw. implizite Eulerverfahren in diesem Beispiel allgemein gegen den ermittelten Grenzwert?

Lösungsvorschlag

a) (1 Punkt) Ableiten liefert:

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= -\exp(-100\,t) - \exp(-t) \\ \ddot{x}(t) &= 100\exp(-100\,t) + \exp(-t) \end{aligned}$$

Also:

$$\begin{aligned} \ddot{x}(t) + 101\dot{x}(t) &= \big(100\exp(-100\,t) + \exp(-t)\big) + 101\big(-\exp(-100\,t) - \exp(-t)\big) \\ &= -\exp(-100\,t) - 100\exp(-t) \\ &= -100x(t) \end{aligned}$$

sowie $x(0) = 1.01$ und $\dot{x}(0) = -2$. Es ist $\lim_{t\to\infty} x(t) = 0$.

b) (2 Punkte) Zunächst schreibt man dies als System um:

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \ddot{x} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 100 & 101 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ \dot{x} \end{pmatrix}$$

Sei

$$A := -\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 100 & 101 \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte dieser Matrix ergeben sich aus

$$0 = |A - \mu I| = \mu^2 + \mu 101 + 100$$

(I ist die Einheitsmatrix) und lauten $\mu_1 = -1, \mu_2 = -100$. Dies ist auch direkt aus der Formel in Aufgabenteil in a) ersichtlich!

Somit ist $T_{\min} = 1/100$, $T_{\max} = 1$ also $T_{\max}/T_{\min} = 100$. Das System ist daher steif.

c) Man erhält $t_f = 5$ und $h = 0.001$ (1 Punkt).

d) Sei $\mathbf{x}^{(k)} = (x^{(k)}, \dot{x}^{(k)})^T$. Für das explizite Eulerverfahren gilt mit dieser Notation (1 Punkt):

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + hA\mathbf{x}^{(k)} = (I + hA)\mathbf{x}^{(k)} = \ldots = (I + hA)^{k+1}\mathbf{x}^{(0)} \tag{1}$$

Für das implizite Eulerverfahren gilt nun $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + hA\mathbf{x}^{(k+1)}$, also (1 Punkt):

$$(I - hA)\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - hA\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)}.$$

Löst man dies nach der gesuchten Lösung auf, folgt (1 Punkt):

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (I - hA)^{-1}\mathbf{x}^{(k)} = \ldots = (I - hA)^{-(1+k)}\mathbf{x}^{(0)}. \tag{2}$$

e) Zu untersuchen ist, ob $(1+hA)^k$ bzw. $(1-hA)^{-k}$ für $k \to \infty$ gegen die Null(-matrix) konvergieren. Dies ist genau dann der Fall, wenn die Eigenwerte von $(1 + hA)$ und $(1 - hA)^{-1}$ betragsmäßig kleiner 1 sind (1 Punkt).

Für das explizite Verfahren gilt (1 Punkt):

$$\mu \text{ ist ein Eigenwert von } A \Leftrightarrow \lambda = (1 + h\mu) \text{ ist ein Eigenwert von } (1 + hA)$$

Folglich muss $|1 + h\mu| < 1$ für $\mu \in \{-1, -100\}$ gelten, also $|1 - 100h| < 1$ und $|1 - h| < 1$. Dies gilt gdw. $0 < h < 2/100$. Insbesondere also für die in c) ermittelte Schrittweite.

Analog für das implizite Verfahren (1 Punkt):

$$\mu \text{ ist ein Eigenwert von } A \Leftrightarrow \lambda = \frac{1}{1 - h\mu} \text{ ist ein Eigenwert von } (1 + hA)^{-1}$$

Nun lautet die Bedingung $|1 - h\mu|^{-1} < 1$, also $1 < |1 - h\mu| = 1 + h|\mu|$. Dies gilt fr jedes positive h.