

# **Große Gleichungssysteme - schnelle Lösung kein Problem!**

Eine Einführung in das Lösen von großen  
Gleichungssystemen

Anton Schüller, Ulrich Trottenberg

Fraunhofer Institut  
Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen

# 1. **Einführung**

2. Direkte Verfahren - Gauß-Elimination

3. Iterative Verfahren

4. Ableitung einer Funktion, Differentialgleichungen

5. Randwertaufgaben, Diskretisierung

# Große lineare Gleichungssysteme

- kommen in Wissenschaft und Technik sehr häufig vor
- Kontinuierliche Aufgaben (z.B. Differentialgleichungen, DGLs) werden durch “Diskretisierung” zu Gleichungssystemen (GLS)

## Anwendungsbeispiele, die auf große GLS führen

**Wetterprognose:** System von partiellen Differentialgleichungen zur Bestimmung von

- Windgeschwindigkeit (3 Komponenten)
- Druck
- Feuchtigkeit
- Temperatur

Für tägliche Wettervorhersage wird ein Gitter um Erde gelegt. In den Gitterpunkten: Berechne Näherungswerte für die Lösungen.

Für 10 Tage Prognose 6500 mal GLS mit rund 16 Mio. Unbekannten lösen.

# Anwendungsbeispiele, die auf große GLS führen

## Klimaprognosen:

- typischer Vorhersagezeitraum: 50 oder 100 Jahre.
- Modell für Simulation der Atmosphäre ähnlich wie bei Wettervorhersage
- zusätzlich: Modelle zur Simulation der Ozeane.
- viel gröbere Gitter mit viel weniger Gitterpunkten als bei Wettervorhersage (Abstand zweier Gitterpunkte in Äquatornähe: rund 600 km statt 60 km)
- Typische Rechenzeiten: mehrere Monate
- trotzdem: Vorhersagen über Klima in 100 Jahren schwanken um bis zu etwa 3° C; tatsächliche Fehlerquellen ???

# Anwendungsbeispiele, die auf große GLS führen

## Numerischer Windkanal:

- vollständiger, dreidimensionaler (3D) Entwurf von Flugzeugen auf Rechnern
- dabei benötigte 3D-Gitter bestehen heute aus bis zu 15 Mio. Gitterpunkten
- in jedem Gitterpunkt werden die Werte von 5 unbekannten Funktionen (3 Geschwindigkeitskomponenten, Druck, Energie) berechnet.

# Darstellung linearer Gleichungssystemen - Beispiel

## Betrachte GLS

$$\begin{array}{rclclcl} x_1 & + & x_2 & + & 4x_3 & = & 3 \\ 2x_1 & + & 3x_2 & + & x_3 & = & 4 \\ 5x_1 & + & 2x_2 & + & x_3 & = & 1 \end{array}$$

“Matrixdarstellung” dieses GLS:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 2 & 3 & 1 \\ 5 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}$$

oder ganz kurz

$$Ax = b$$

mit “Matrix”  $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 2 & 3 & 1 \\ 5 & 2 & 1 \end{pmatrix}$  und “Vektoren”  $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ ,  $b = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}$

## Darstellung großer linearer GLS

Gegeben: lineares GLS ( $N$  Gleichungen und  $N$  Unbekannte)

$$\begin{array}{cccccccl} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1N}x_N & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2N}x_N & = & b_2 \\ \vdots & + & \cdots & + & \cdots & + & \vdots & = & \vdots \\ a_{N1}x_1 & + & a_{N2}x_2 & + & \cdots & + & a_{NN}x_N & = & b_N \end{array} .$$

oder

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$$

oder ganz kurz

$$Ax = b$$

mit “Matrix”  $A$  und “Vektoren”  $x$  und  $b$



## Schnelle und weniger schnelle Verfahren

Beispiel: Poisson-Gleichung (DGL), Gitter mit je 1024 Punkten in  $x$ - und in  $y$ -Richtung, GLS mit ca. 1000000 Unbekannten.

Verfahren	Anzahl der Operationen	Rechenzeit
Cramersche Regel	$\sim N!$	" $\infty$ "
Gaußsches Eliminationsverfahren für Bandmatrizen	$\sim N^2$	14 h
Überrelaxationsverfahren, SOR (1960)	$\sim N^{1.5}$	5 min
Mehrgitter-Verfahren (1980)	$\sim N$	1 sec

## Rundungsfehler

**Beispiel:** Betrachte GLS  $Ax = b$  mit

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1.01 & 2.52 \\ 0.4 & 0.203 & -1.8 \\ 0.6 & -1.05 & 0.8 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 9.57 \\ -0.385 \\ -3.85 \end{pmatrix} .$$

Gaußsches Eliminationsverfahren liefert bei 4-stelliger Genauigkeit exakte Lösung

$$x_1 = 1, \quad x_2 = 5, \quad x_3 = 1 .$$

Wird die gleiche Rechnung mit 3-stelligen Gleitkommazahlen durchgeführt, kommt folgende völlig unsinnige Lösung heraus:

$$\hat{x}_1 = 3.53, \quad \hat{x}_2 = 0, \quad \hat{x}_3 = 1.$$

**Kritisch bei GLS mit 2 Unbekannten:** fast parallele Geraden

**In diesem Workshop:** keine pathologischen Fälle

1. Einführung

2. **Direkte Verfahren - Gauß-Elimination**

3. Iterative Verfahren

4. Ableitung einer Funktion, Differentialgleichungen

5. Randwertaufgaben, Diskretisierung

# Gaußsches Eliminationsverfahren - ein Beispiel

Betrachte GLS

$$\begin{array}{rrcrcl} x_1 & + & x_2 & + & 4x_3 & = & 3 \\ 2x_1 & + & 3x_2 & + & x_3 & = & 4 \\ 5x_1 & + & 2x_2 & + & x_3 & = & 1 \end{array}$$

mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 2 & 3 & 1 \\ 5 & 2 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Elimination von  $x_1$  aus der zweiten und dritten Gleichung führt zu

$$\begin{array}{rrcrcl} x_1 & + & x_2 & + & 4x_3 & = & 3 \\ & & x_2 & - & 7x_3 & = & -2 \\ & - & 3x_2 & - & 19x_3 & = & -14 \end{array} \quad \left| \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 0 & 1 & -7 \\ 0 & -3 & -19 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -2 \\ -14 \end{pmatrix} \right.$$

## Gauß-Elimination - Beispiel (Forts.)

Zweiter Eliminationsschritt liefert

$$\begin{array}{rclcl} x_1 & + & x_2 & + & 4x_3 & = & 3 \\ & & x_2 & - & 7x_3 & = & -2 \\ & & & - & 40x_3 & = & -20 \end{array} \quad \left| \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 0 & 1 & -7 \\ 0 & 0 & -40 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -2 \\ -20 \end{pmatrix} \right.$$

Auflösen durch “Rückwärtseinsetzen” ergibt:

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{-20}{-40} = \frac{1}{2} \\ x_2 &= -2 + 7 \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \\ x_1 &= 3 - \frac{3}{2} - 4 \cdot \frac{1}{2} = -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

# Gaußsches Eliminationsverfahren

Betrachte GLS  $Ax = b$ ; GLS habe genau eine Lösung

**Idee:** Nutze 1. Gleichung, um  $x_1$  aus Gln. 2, 3, ..., N zu eliminieren

**Ergebnis:**

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1N} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2N}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3N}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & a_{N2}^{(1)} & a_{N3}^{(1)} & \cdots & a_{NN}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_N^{(1)} \end{pmatrix}$$

mit

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} \cdot a_{1j} = \frac{a_{11}a_{ij} - a_{1j}a_{i1}}{a_{11}} \quad (j = 2, \dots, N)$$
$$b_i^{(1)} = b_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}} \cdot b_1 = \frac{b_i a_{11} - b_1 a_{i1}}{a_{11}}.$$

**Fazit:**  $x_1$  ist aus allen Gleichungen außer der ersten eliminiert

## Gauß-Elimination - Fortführung

Idee jetzt sinngemäß auf  $A^{(1)}x^{(1)} = b^{(1)}$  anwenden, genauer: auf das Teilsystem (Restsystem)

$$\begin{pmatrix} a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2N}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3N}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{N2}^{(1)} & a_{N3}^{(1)} & \cdots & a_{NN}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2^{(1)} \\ x_3^{(1)} \\ \vdots \\ x_N^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_N^{(1)} \end{pmatrix}$$

usw., bis wir leicht lösbares System der folgenden Form erhalten:

$$\begin{array}{cccccccl} r_{11}x_1 & + & r_{12}x_2 & + & \cdots & + & r_{1N}x_N & = & y_1 \\ & & r_{22}x_2 & + & \cdots & + & r_{2N}x_N & = & y_2 \\ & & & r_{33}x_3 & \cdots & + & r_{3N}x_N & = & y_3 \\ & & & & \cdots & & \vdots & = & \vdots \\ & & & & & & r_{NN}x_N & = & y_N \end{array}$$

## Gauß-Elimination - Rückwärtseinsetzen I

- letzte Gleichung liefert  $x_N$
- Einsetzen von  $x_N$  in vorletzte Gleichung liefert  $x_{N-1}$  usw.
- letzter Lösungsschritt:  $x_N, x_{N-1}, \dots, x_2$  bereits bekannt  
damit  $x_1$  aus erster Gleichung direkt berechenbar



# Gauß-Elimination - Rückwärtseinsetzen II

Formale Beschreibung:

$$\begin{aligned}x_N &= \frac{1}{r_{NN}} \cdot y_N \\x_{N-1} &= \frac{1}{r_{N-1,N-1}} \cdot (y_{N-1} - r_{N-1,N}x_N) \\x_{N-2} &= \frac{1}{r_{N-2,N-2}} \cdot (y_{N-2} - r_{N-2,N-1}x_{N-1} - r_{N-2,N}x_N) \\&\vdots \\x_1 &= \frac{1}{r_{11}} \cdot (y_1 - r_{12}x_2 - r_{13}x_3 - \dots - r_{1N}x_N).\end{aligned}$$

oder kompakter

$$x_i = \frac{1}{r_{ii}} \left( y_i - \sum_{j=i+1}^N r_{ij}x_j \right), \quad i = N, N-1, \dots, 1$$

Beachte, dass der Summenausdruck in dieser Gleichung den Wert 0 hat, wenn das Summationsintervall leer ist (tritt bei  $i = N$  ein)

# Gaußsches Eliminationsverfahren - Bewertung

- direktes Verfahren
- wird i.a. verwendet, falls  $A$  vollbesetzte Matrix ist
- bei vollbesetzten Matrizen wächst Rechenaufwand des Gaußschen Eliminationsverfahrens mit der dritten Potenz der Anzahl der Unbekannten; Schreibweise:  $W = O(N^3)$
- in der Praxis häufig: Matrizen, bei denen nur wenige Diagonalen von 0 verschieden sind (Bandmatrizen)

**Beispiel:** GLS, die bei der Diskretisierung der Poisson-Gleichung entstehen;

hier reduziert sich Aufwand auf  $O(N^2)$  Rechenoperationen;  
noch viel zu hoch für viele Anwendungen aus der Praxis

1. Einführung

2. Direkte Verfahren - Gauß-Elimination

**3. Iterative Verfahren**

4. Ableitung einer Funktion, Differentialgleichungen

5. Randwertaufgaben, Diskretisierung

# Iterative Verfahren

In der Praxis hat  $A$  häufig eine spezielle Struktur und/oder ist schwach besetzt (engl. sparse), d.h. die meisten Elemente von  $A$  sind 0.  $N$  ist eventuell sehr groß, z.B.  $10^6$ .

In solchen Fällen sind iterative Lösungsverfahren eine interessante Alternative. Bei ihnen startet man mit irgendeiner Startnäherung für die Unbekannten (im Zweifelsfall nimmt man an, dass alle Unbekannten 0 sind) und reduziert den Fehler sukzessiv durch eine geeignete Iterationsvorschrift.

Iterative Verfahren spielen in vielen Bereichen der Mathematik eine wichtige Rolle. Aus der Schule bekannt ist evtl. das Heronsche Verfahren, mit dem man näherungsweise die Quadratwurzeln reeller Zahlen berechnen kann:

# Heronsches Verfahren

Zu berechnen sei  $x = \sqrt{y}$ . Ausgehend von einer Startnäherung  $x^{(0)}$  lautet die Iterationsvorschrift des Heronschen Verfahrens

$$x^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left( x^{(n)} + \frac{y}{x^{(n)}} \right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

**Beispiel:** Näherungsweise Berechnung von  $\sqrt{2}$

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= 1 \\ x^{(1)} &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{2}{1} \right) = \frac{3}{2} = \underline{1.5} \\ x^{(2)} &= \frac{1}{2} \left( \frac{3}{2} + \frac{4}{3} \right) = \frac{17}{12} = \underline{1.416666666\dots} \\ x^{(3)} &= \frac{1}{2} \left( \frac{17}{12} + \frac{24}{17} \right) = \frac{289 + 288}{2 \cdot 204} = \underline{1.41421568627\dots} \\ x^{(4)} &= \frac{1}{2} \left( \frac{577}{408} + \frac{816}{577} \right) = \frac{577^2 + 408 \cdot 816}{2 \cdot 577 \cdot 408} = \underline{1.4142135623746899\dots} \end{aligned}$$

Zum Vergleich:  $\sqrt{2} = 1.41421356237309504\dots$

## Jacobi-Verfahren (JAC)

Betrachte GLS

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad a_{ii} \neq 0 \quad \text{für} \quad (i = 1, 2, 3)$$

Auflösen der  $i$ -ten Gleichung nach  $x_i$ :

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3) \\ x_2 &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3) \\ x_3 &= \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2) \end{aligned}$$

## Jacobi-Verfahren (JAC) - (Forts.)

Mit gegebener Startnäherung

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ x_3^{(0)} \end{pmatrix}$$

können wir neue Näherung berechnen

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(0)} - a_{13}x_3^{(0)})$$

$$x_2^{(1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(0)} - a_{23}x_3^{(0)})$$

$$x_3^{(1)} = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{(0)} - a_{32}x_2^{(0)})$$

(erster Iterationsschritt des Jacobi-Verfahrens)

## Gauss-Seidel-Verfahren (GS)

JAC: verwende stets alte Näherung, um neue zu berechnen

GS: verwende nicht nur Werte  $x_k^{(0)}$ , sondern - soweit verfügbar - auch die neuen, bereits berechneten Werte  $x_k^{(1)}$ :

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(0)} - a_{13}x_3^{(0)})$$

$$x_2^{(1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(1)} - a_{23}x_3^{(0)})$$

$$x_3^{(1)} = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{(1)} - a_{32}x_2^{(1)})$$



# Allgemeine Beschreibung von JAC und GS

Betrachte GLS  $Ax = b$  mit  $a_{ii} \neq 0$ , ( $i = 1, \dots, N$ )

**Iterationsvorschrift von JAC:**

$$x_i^{(n+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{k=1, k \neq i}^N a_{ik} x_k^{(n)} \right) \quad (i = 1, \dots, N)$$

mit Startnäherung  $x^{(0)}$  (z.B.  $=0$ ) und Iterationsindex  $n = 0, 1, 2, \dots$

**Iterationsvorschrift von GS:**

$$x_i^{(n+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} x_k^{(n+1)} - \sum_{k=i+1}^N a_{ik} x_k^{(n)} \right) \quad (i = 1, \dots, N)$$

## Beispiel zu JAC und GS

$$10x_1 + x_2 = 1$$

$$x_1 + 10x_2 = 10$$

exakte Lösung:  $x_1 = 0$  und  $x_2 = 1$ ; Startnäherung:  $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = 0$

JAC:	GS:
$x_1^{(n+1)} = (1 - x_2^{(n)})/10$	$x_1^{(n+1)} = (1 - x_2^{(n)})/10$
$x_2^{(n+1)} = (10 - x_1^{(n)})/10$	$x_2^{(n+1)} = (10 - x_1^{(n+1)})/10$
$(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) = (0, 0)$	$(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) = (0, 0)$
$(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) = (0.1, 1)$	$(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) = (0.1, 0.99)$
$(x_1^{(2)}, x_2^{(2)}) = (0, 0.99)$	$(x_1^{(2)}, x_2^{(2)}) = (10^{-3}, 1 - 10^{-4})$
$(x_1^{(3)}, x_2^{(3)}) = (10^{-3}, 1)$	$(x_1^{(3)}, x_2^{(3)}) = (10^{-5}, 1 - 10^{-6})$

Offenbar: Konvergenz gegen Lösung (hier: GS schneller als JAC)

# SOR-Verfahren

- SOR (Successive OverRelaxation) Verfahren: kleine Modifikation von GS
- Korrektur, die ein Iterationsschritt von GS liefert, um Faktor  $\omega$  verstärken
- dazu: Iterationsvorschrift von GS als ein ersten Zwischenschritt betrachten, der Zwischennäherung  $\tilde{x}_i^{(n)}$  liefert

## SOR-Verfahren (Forts.)

wie GS: 
$$\tilde{x}_i^{(n)} = \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} x_k^{(n+1)} - \sum_{k=i+1}^N a_{ik} x_k^{(n)} \right) \quad (i = 1, \dots, N)$$

SOR-Verfahren: Berechne  $x_i^{(n+1)}$  durch

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} + \omega(\tilde{x}_i^{(n)} - x_i^{(n)})$$

mit Parameter  $\omega \in (0, 2)$  (problemangepaßt wählen!)

- für  $\omega > 1$  (Überrelaxation) verstärkt man Korrektur  $x_i^{(n+1)} - x_i^{(n)}$  von  $x_i^{(n)}$  von GS
- für  $\omega < 1$  (Unterrelaxation) schwächt man Korrektur von GS ab
- für  $\omega = 1$  erhält man wieder GS

# Zur Konvergenz von JAC, starkes Zeilensummenkriterium

Bedingung

$$\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N |a_{ik}| < |a_{ii}| \quad (i = 1, \dots, N) \quad .$$

heißt *starkes Zeilensummenkriterium*.

(Man sagt auch, Matrix  $A$  ist “stark diagonaldominant”.)

Es gilt: Ist für Matrix  $A$  starkes Zeilensummenkriterium erfüllt (d.h. überwiegt in Matrix  $A$  die Hauptdiagonale in obigem Sinn), dann konvergiert JAC gegen die eindeutig bestimmte Lösung von  $Ax = b$ .

Jeder Iterationsschritt reduziert Fehler dann mindestens um Faktor

$$\max_{i=1 \dots N} \frac{\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N |a_{ik}|}{|a_{ii}|}$$

## Konvergenz von JAC - ein Beispiel

Für Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 10 & -4 & -2 \\ -4 & 10 & -4 \\ -6 & -2 & 12 \end{pmatrix}$$

ist starkes Zeilensummenkriterium erfüllt, denn

$$4 + 2 < 10 \quad , \quad 4 + 4 < 10 \quad , \quad 6 + 2 < 12 \quad .$$

Jeder Iterationsschritt reduziert Fehler mindestens um Faktor

$$\max \left\{ \frac{4}{10} + \frac{2}{10}, \frac{4}{10} + \frac{4}{10}, \frac{6}{12} + \frac{2}{12} \right\} = \frac{8}{10} = 0.8$$

## Zusammenhang zu GS

Man kann beweisen: Konvergenz von GS folgt aus der Konvergenz von JAC, *wenn das starke Zeilensummenkriterium erfüllt ist.*

Starkes Zeilensummenkriterium ist also auch hinreichend für die Konvergenz von GS.

Es gibt aber Fälle, in denen JAC konvergiert, nicht aber GS; starkes Zeilensummenkriterium ist dann nicht erfüllt

1. Einführung

2. Direkte Verfahren - Gauß-Elimination

3. Iterative Verfahren

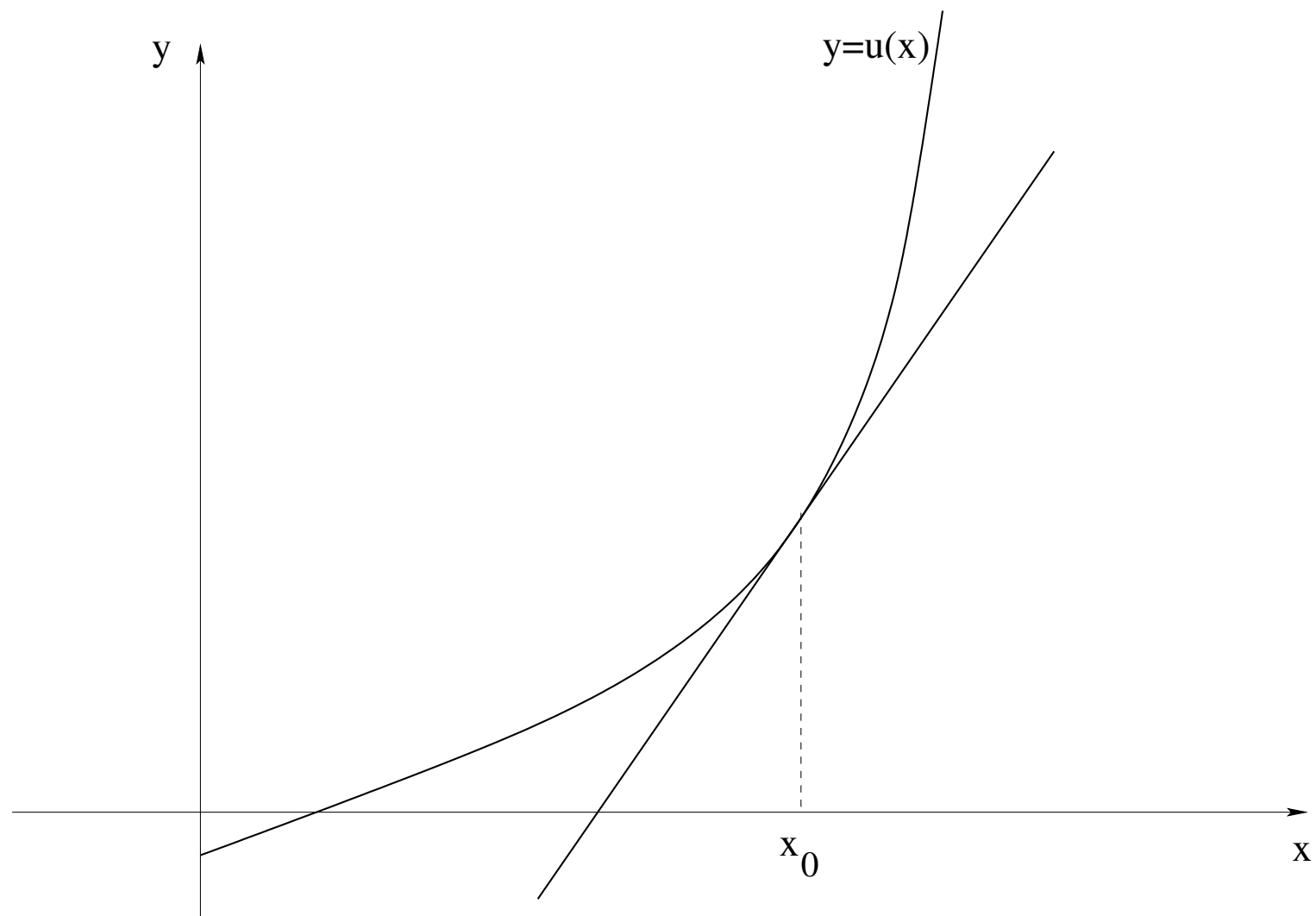
4. **Ableitung einer Funktion, Differentialgleichungen**

5. Randwertaufgaben, Diskretisierung



## Ableitung einer Funktion

Gegeben sei Funktion  $u(x)$ , die für alle reellen Werte  $x$  definiert sei. Ferner lasse sich im Punkt  $x_0$  eindeutig eine Tangente an  $u$  legen (*dies wird im folgenden allgemein vorausgesetzt!*). Dann definieren wir die Ableitung der Funktion  $u$  in einem Punkt  $x_0$  als die Steigung  $m$  der Tangente von  $u$  im Punkt  $x_0$  und bezeichnen die Ableitung mit  $u'(x_0)$ .



Tangente im Punkte  $x_0$  an eine Funktion  $u(x)$

## Ableitung einer Funktion - Beispiele

- Die Gerade  $u(x) = mx + b$  ist in jedem Punkt ihre eigene Tangente. Sie hat die Steigung  $m$ . Damit gilt für die Ableitung der Geraden in jedem Punkt  $x$ :

$$u'(x) = m \ .$$

- Die konstante Funktion  $u(x) = b$  ist eine spezielle Funktion mit der Steigung  $m = 0$ . Folglich gilt für sie in jedem Punkt

$$u'(x) = 0 \ .$$

## Zweite Ableitung einer Funktion

Existiert die Ableitung z.B. in jedem Punkt, kann man  $u'$  wieder als Funktion von  $x$  begreifen und die Ableitung der Ableitung (d.h. die zweite Ableitung  $u''$  von  $u$ ) bestimmen. Offenbar ist für jede lineare Funktion

$$u(x) = mx + b$$

die zweite Ableitung identisch gleich 0, da die erste Ableitung eine Konstante ist ( $u'(x) = m$ ), d.h.

$$u''(x) = 0 \quad .$$

# Berechnung von Ableitungen, Differenzenquotient

Will man die Ableitung einer allgemeineren Funktion im Punkt  $x_0$  berechnen, so kann man die Steigung der Tangente approximieren, indem man die Steigung der Sekante durch die Punkte  $(x_0, u(x_0))$  und  $(x_0 + h, u(x_0 + h))$  berechnet und dann  $h$  gegen 0 streben lässt:

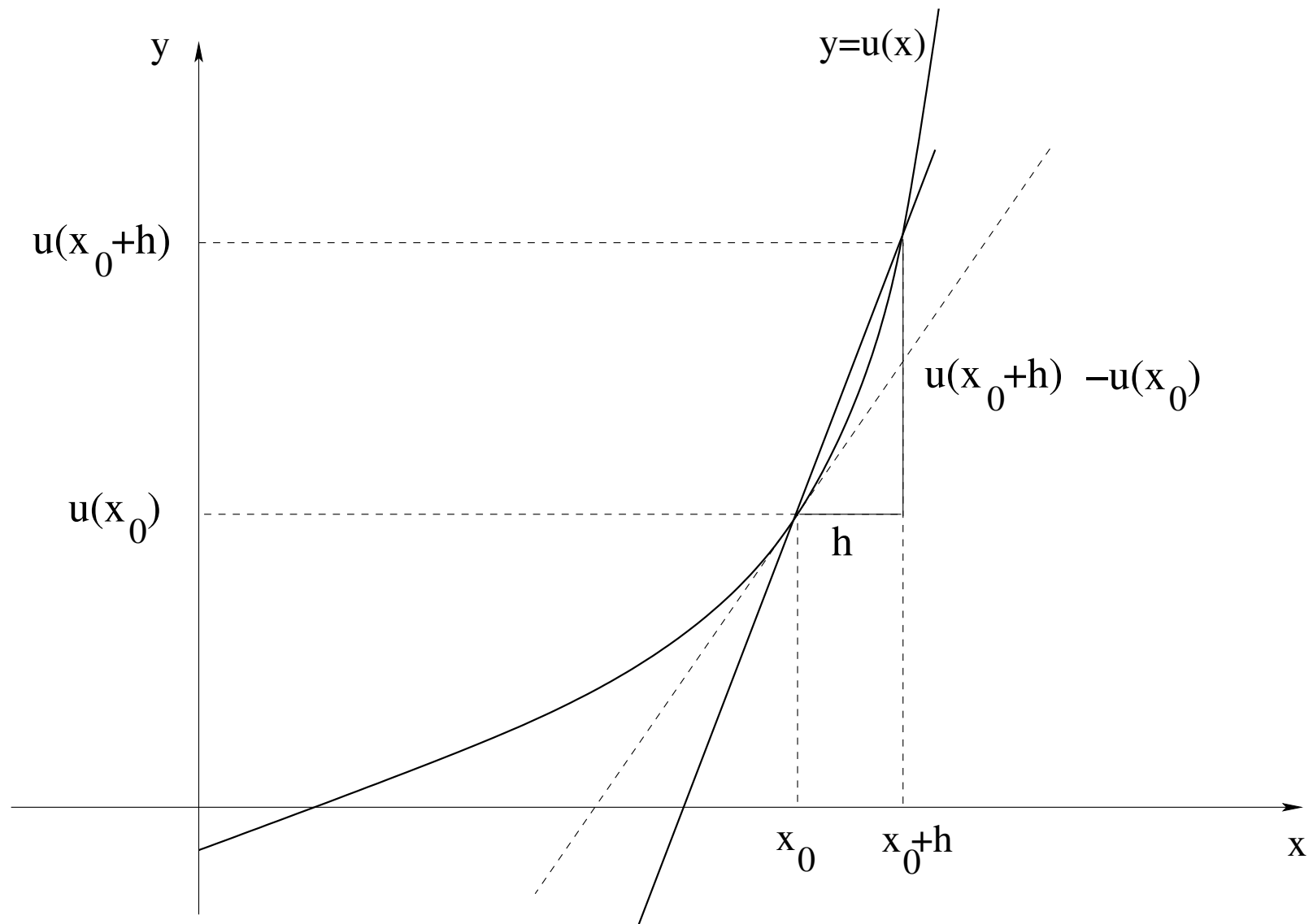
$$u'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x_0 + h) - u(x_0)}{h} .$$

Tatsächlich kann man auch dies als die Ableitung von  $u$  im Punkt  $x_0$  definieren, sofern der Grenzwert existiert und eindeutig ist.

Ganz analog kann man auch die Sekante durch die Punkte  $(x_0, u(x_0))$  und  $(x_0 - h, u(x_0 - h))$  verwenden:

$$u'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x_0) - u(x_0 - h)}{h} .$$

$\frac{u(x_0+h)-u(x_0)}{h}$  und  $\frac{u(x_0)-u(x_0-h)}{h}$  werden auch als *Differenzenquotienten* bezeichnet.

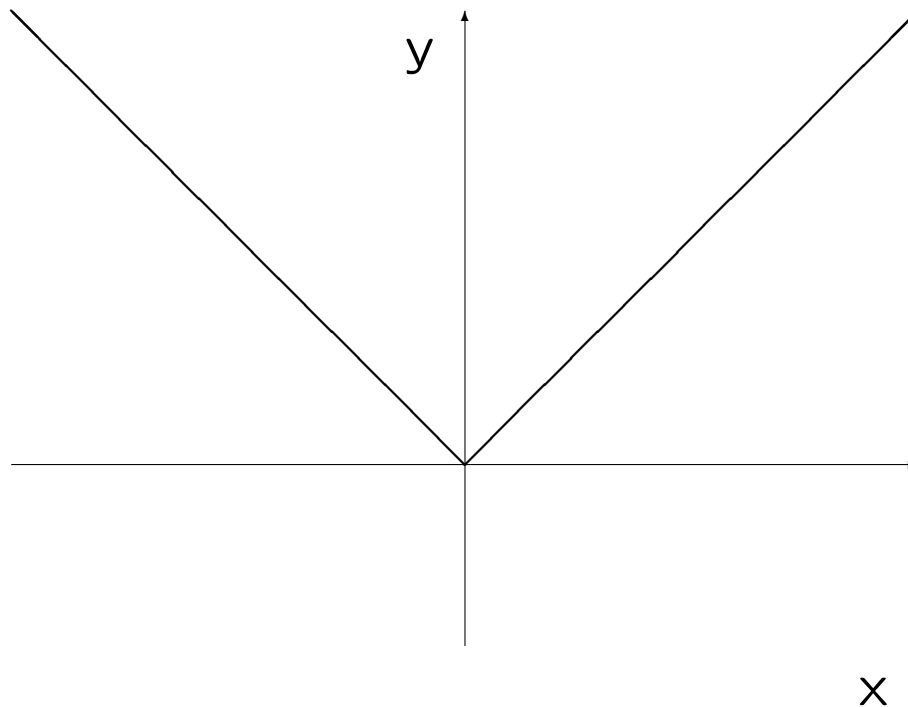


Tangente und Sekante einer Funktion

# Beispiele zur Ableitung einer Funktion I

Für die Funktion  $u(x) = |x|$  gilt

$$u'(x) = \begin{cases} -1 & \text{für } x < 0 \\ +1 & \text{für } x > 0 \\ \text{nicht definiert} & \text{für } x = 0 \end{cases}$$



## Beispiele zur Ableitung einer Funktion II

Die Ableitung der Funktion  $u(x) = x^n$  berechnen wir als

$$\begin{aligned} u'(x) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(x+h)^n - x^n}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{x^n + nhx^{n-1} + \frac{n(n-1)}{2}h^2x^{n-2} + \dots + h^n - x^n}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{nhx^{n-1} + \frac{n(n-1)}{2}h^2x^{n-2} + \dots + nh^{n-1}x + h^n}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} (nx^{n-1} + \frac{n(n-1)}{2}hx^{n-2} + \dots + nh^{n-2}x + h^{n-1}) \\ &= nx^{n-1} . \end{aligned}$$



## Beispiele zur Ableitung einer Funktion III

Ohne Beweis vermerken wir, dass die Ableitungen der Funktionen  $\sin(x)$ ,  $\cos(x)$  und  $e^x$  gegeben sind durch

$$\begin{aligned}\sin'(x) &= \cos(x) \\ \cos'(x) &= -\sin(x) \\ (e^x)' &= e^x\end{aligned}$$

Damit gilt für die zweiten Ableitungen dieser Funktionen

$$\begin{aligned}\sin''(x) &= -\sin(x) \\ \cos''(x) &= -\cos(x) \\ (e^x)'' &= e^x\end{aligned}$$

# Einige Rechenregeln für Ableitungen

Seien  $u(x)$  und  $v(x)$  zwei Funktionen von  $x$ , deren Ableitungen existieren,  $c$  eine Konstante. Dann gilt

$$(u + v)'(x) = u'(x) + v'(x)$$

$$(cu)'(x) = cu'(x)$$

$$(uv)'(x) = u'(x)v(x) + u(x)v'(x) \quad (\text{Produktregel})$$

Beispiele:

$$(7x^3)' = 7(x^3)' = 7 \cdot 3x^2 = 21x^2$$

$$(5x^2 + 7x^3)' = (5x^2)' + (7x^3)' = 5(x^2)' + 21x^2 = 10x + 21x^2$$

$$(x^2 \sin x)' = (x^2)' \sin x + x^2(\sin x)' = 2x \sin x + x^2 \cos x$$

# Gewöhnliche Differentialgleichungen

Als gewöhnliche Differentialgleichung (DGL)  $n$ -ter Ordnung bezeichnen wir eine Gleichung, in der die  $n$ -te Ableitung der Funktion  $u(x)$  vorkommt. Ferner können in dieser Gleichung auch  $u(x)$  und niedrigere Ableitungen von  $u(x)$  sowie weitere  $x$ -abhängige Terme vorkommen.

## Einige einfache Beispiele:

- $u'(x) = 0$

Lösungen dieser DGL sind alle konstanten Funktionen.

- $u'(x) = x$

Lösungen dieser DGL sind die Funktionen  $u(x) = \frac{1}{2}x^2 + c$  mit einer Konstanten  $c$ .

- $u'(x) = \cos(x)$

Lösungen dieser DGL sind die Funktionen  $u(x) = \sin(x) + c$  mit einer Konstanten  $c$ .

- $u''(x) = -u(x)$

Lösungen dieser DGL sind die Funktionen  $u(x) = a \sin(x) + b \cos(x)$ .

- $u'''(x) + u''(x) \cdot u'(x) - u^2(x) = r(x)$  mit einer gegebenen Funktion  $r(x)$ .

Offenbar: Lösung einer DGL i.a. nicht eindeutig bestimmt

Um eindeutige Lösungen erhalten zu können, ist in der Regel die Angabe einer oder mehrerer zusätzlicher Bedingungen erforderlich.

# Funktionen mehrerer Veränderlicher, partielle Ableitungen

Wir betrachten jetzt eine Funktion  $u$ , die von zwei Variablen  $x$  und  $y$  abhängt, d.h.  $u(x, y)$ . Dann können wir die sogenannten partiellen Ableitungen von  $u$  nach  $x$  bzw. von  $u$  nach  $y$  untersuchen.

Betrachtet man die Ableitung von  $u(x, y)$  nach  $x$ , nimmt man  $y$  als konstanten Parameter an und kann dann die Ableitung bezüglich der Variablen  $x$  wie gehabt berechnen. Bezüglich der Variablen  $y$  verfährt man genauso.

Notation:

$$\begin{aligned}u_x(x, y) &= u'(x, \cdot) \\ u_y(x, y) &= u'(\cdot, y)\end{aligned}$$

Wir nehmen dabei hier und im folgenden jeweils an, dass die Ableitungen existieren.

# Beispiele für partielle Ableitungen

1.  $u(x, y) = x$  : Dann gilt

$$u_x(x, y) = 1$$

$$u_y(x, y) = 0$$

2.  $u(x, y) = xy^2$  : Dann ist

$$u_x(x, y) = y^2$$

$$u_y(x, y) = 2xy$$

und für die zweiten partiellen Ableitungen nach  $x$  und  $y$  gilt

$$u_{xx}(x, y) = 0$$

$$u_{yy}(x, y) = 2x \ .$$

# Partielle Differentialgleichungen

Als *partielle Differentialgleichung* (Partial Differential Equation, PDE) bezeichnet man eine Gleichung, in der partielle Ableitungen einer Funktion mehrerer Veränderlicher vorkommen.

## Beispiele:

- Für eine Funktion  $u(x, y)$  betrachten wir die PDE  $u_x(x, y) = 0$  .  
Offensichtlich erfüllt jede Funktion  $u(x, y) = f(y)$  diese PDE.

- Die PDE  $u_{xx} + u_{yy} = 0$  wird z.B. erfüllt von den Funktionen

$$u(x, y) = \text{const.}$$

$$u(x, y) = \alpha x + \beta y \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{R})$$

$$u(x, y) = \alpha \sin(x) e^y + \beta \cos(x) e^y$$

und vielen weiteren.

- Mögliche Lösungen der PDE  $u_{xx} + u_{yy} = 6xy$  sind u.a. die Funktionen

$$u(x, y) = x^3 y$$

$$u(x, y) = xy^3$$

$$u(x, y) = \alpha x^3 y + (1 - \alpha)xy^3 + \beta u_{hom} \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{R}) ,$$

wobei  $u_{hom}(x, y)$  die Lösung der Gleichung

$$(u_{hom})_{xx} + (u_{hom})_{yy} = 0$$

ist.

Auch in diesen Beispielen ist die Lösung der DGL nicht eindeutig.



1. Einführung

2. Direkte Verfahren - Gauß-Elimination

3. Iterative Verfahren

4. Ableitung einer Funktion, Differentialgleichungen

5. **Randwertaufgaben, Diskretisierung**

## Eine gewöhnliche Randwertaufgabe 2. Ordnung

Betrachte die **Randwertaufgabe (RWA)**, d.h. die DGL

$$u''(x) = f(x) \quad (x \in [0, 1])$$

mit den Randbedingungen

$$u(0) = g_0, \quad u(1) = g_1 \quad ,$$

der gegebenen Funktion  $f$  und gegebenen Randwerten  $g_0, g_1 \in \mathbb{R}$ .

**Gesucht:** Funktion  $u(x)$ , welche die RWA erfüllt

RWA ist unter geeigneten Voraussetzungen an  $f$  eindeutig lösbar

RWA beschreibt physikalisch die Auslenkung  $u(x)$  einer eingespannten elastischen Saite unter Belastung  $f(x)$ .

# Diskretisierung der RWA

Numerische Berechnung einer Näherung von  $u(x)$  durch „Diskretisierung“

Erforderlich: „Gitter“ und Näherung für die DGL

Teile Intervall  $[0, 1]$  in  $n$  äquidistante Teilintervalle  $[x_i, x_{i+1}]$  mit  $x_i = x_0 + ih$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$

Punkte  $x_i$  und Maschenweite  $h = \frac{x_n - x_0}{n} = \frac{1}{n}$  bestimmen eindimensionales „Gitter“, auf dem  $u(x)$  näherungsweise bestimmt werden soll



Eindimensionales Gitter

# Approximation der Differentialgleichung

Näherungsformeln für  $u''(x)$  ??

**Idee:** Ersetze Ableitungen durch Differenzenquotienten, d.h.

$$u''(x) \longleftarrow \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2}.$$

Achtung: Dabei macht man Fehler der Größenordnung  $h^2$  (wird auch durch Notation  $O(h^2)$  ausgedrückt).

Motivation: Ersetze  $u''$  durch den Differenzenquotienten

$$\frac{u'(x+h) - u'(x)}{h}$$

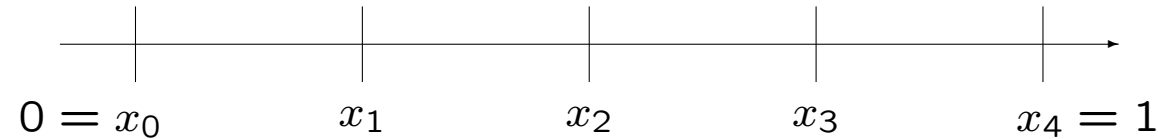
und  $u'(x+h)$  und  $u'(x)$  hierin durch (die Differenzenquotienten)

$$\frac{u(x+h) - u(x)}{h} \quad \text{und} \quad \frac{u(x) - u(x-h)}{h}$$

(Approx. Steigung der Tangente durch Steigung der Sekante bzw. verwende Def. der Ableitung, vernachlässige aber Grenzübergang).

# Beispiel für Diskretisierung und entstehendes GLS

$n = 4$ ,  $h = 1/4 \leadsto$  Gitterpunkte  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = 1/4$ ,  $x_2 = 1/2$ ,  $x_3 = 3/4$ ,  $x_4 = x_n = 1$



GLS: 
$$u_h(x_0) = g(0)$$

$$\frac{u_h(x_0) - 2u_h(x_1) + u_h(x_2)}{h^2} = f(0.25)$$

$$\frac{u_h(x_1) - 2u_h(x_2) + u_h(x_3)}{h^2} = f(0.5)$$

$$\frac{u_h(x_2) - 2u_h(x_3) + u_h(x_4)}{h^2} = f(0.75)$$


$$u_h(x_4) = g(1)$$

oder

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_h(x_0) \\ u_h(x_1) \\ u_h(x_2) \\ u_h(x_3) \\ u_h(x_4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(0) \\ h^2 f(0.25) \\ h^2 f(0.5) \\ h^2 f(0.75) \\ g(1) \end{pmatrix}$$

## Resultierendes GLS im allgemeinen Fall

Benutze Näherungsformel für  $u''(x)$  in Gitterpunkten  
 $x_i = x_0 + ih$  ( $i = 1, \dots, n-1$ )


$$0 = x_0 \quad x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad \dots \quad x_n = 1$$

und setze in Randpunkten  $x_0 = 0, x_n = 1$  gegebene Randwerte ein

$\leadsto$  GLS für die Näherungslösung  $u_h(x_i)$  ( $i = 0, 1, \dots, n$ ):

$$u_h(x_0) = g(0)$$

$$\frac{u_h(x_{i-1}) - 2u_h(x_i) + u_h(x_{i+1}))}{h^2} = f(x_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n-1)$$

$$u_h(x_n) = g(1)$$

# Matrixdarstellung

Allg. GLS in Matrixschreibweise:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_h(x_0) \\ u_h(x_1) \\ u_h(x_2) \\ \vdots \\ u_h(x_{n-1}) \\ u_h(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(0) \\ h^2 f(x_1) \\ h^2 f(x_2) \\ \vdots \\ h^2 f(x_{n-1}) \\ g(1) \end{pmatrix}$$

Aufwand zur Lösung des GLS: Tridiagonalmatrix  $\leadsto$  Lösung mit Gauß-Elimination mit Rechenaufwand proportional zu  $N$  berechenbar

## Diskretisierungsfehler

Unter geeigneten Voraussetzungen verhält sich der „Diskretisierungsfehler“, d. h. der Fehler zwischen der diskreten Näherungslösung  $u_h(x)$  und der exakten Lösung  $u(x)$ , wie

$$\text{const} \cdot h^2 \text{ .}$$

Um diesen Fehler klein zu machen, muss man die Schrittweite  $h$  also entsprechend klein wählen. Die Matrix  $A_N$  wird dann allerdings sehr groß und der Rechenaufwand zur Lösung des zugehörigen Gleichungssystems wächst entsprechend.



# Konvergenz von JAC, GS, SOR für dieses GLS

Asymptotische Konvergenzfaktoren  $\rho$  pro Iterationsschritt (d.h. Faktor, um die Fehler “auf lange Sicht” pro Iterationsschritt sinken):

$$\rho(\text{JAC}) = \cos \pi h \doteq 1 - \frac{1}{2}\pi^2 h^2$$

$$\rho(\text{GS}) = \cos^2 \pi h \doteq 1 - \pi^2 h^2$$

$$\rho(\text{GS}(\omega_{\text{opt}})) = \frac{1 - \sin \pi h}{1 + \sin \pi h} \doteq 1 - 2\pi h$$

Für kleine  $h$  ist Konvergenz von JAC und GS sehr langsam, für SOR auch noch langsam.

Optimaler Parameter  $\omega_{\text{opt}}$  in SOR in diesem Beispiel:

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sin \pi h}$$

# Poisson-Gleichung mit Dirichlet-Randbedingungen

Betrachte die zu obiger gewöhnlicher RWA analoge partielle RWA:

$$\begin{aligned}\Delta u(x, y) &= f(x, y) && ((x, y) \in \Omega = (0, 1)^2 \subset \mathbb{R}^2) \\ u(x, y) &= g(x, y) && ((x, y) \in \partial\Omega) \quad .\end{aligned}$$

Dabei bezeichnet  $\Delta$  den „Laplace-Operator“

$$\Delta u(x, y) = u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y) \quad ,$$

$f$  und  $g$  sind gegebene Funktionen.

**Gesucht:** Funktion  $u(x, y)$  welche die „Poisson-Gleichung“

$$\Delta u(x, y) = f(x, y) \text{ in } \Omega$$

und die „Dirichlet-Randbedingungen“

$$u(x, y) = g(x, y) \text{ auf } \partial\Omega$$

erfüllt

# Physikalische Bedeutung der Poisson-Gleichung

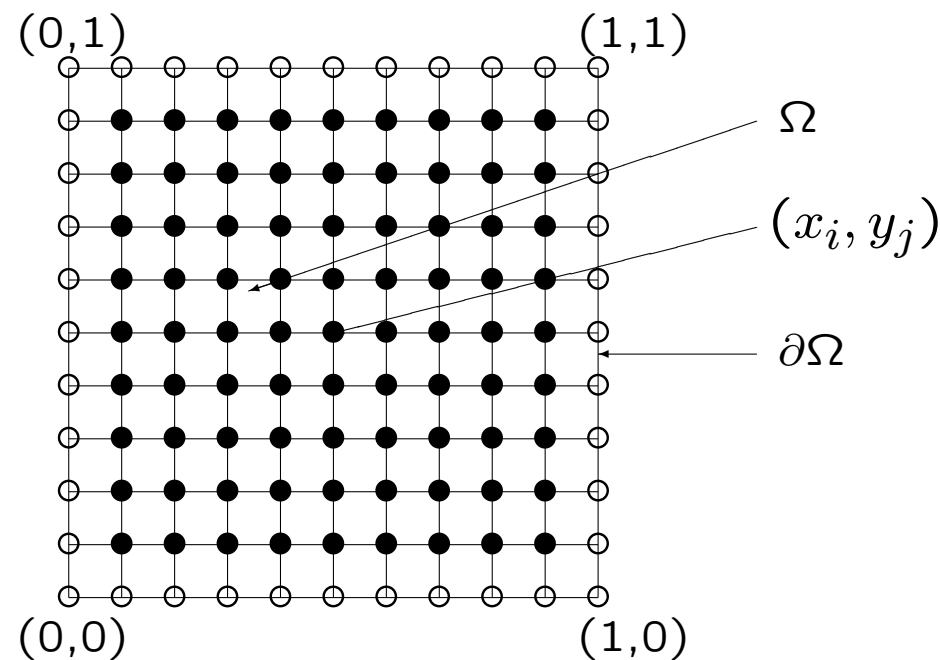
Poisson-Gleichung ist eine der wichtigsten partiellen Differentialgleichungen; beschreibt eine Vielzahl physikalischer Phänomene, z. B.

- das elektrostatischen Potential
- das Gravitationspotential
- die Auslenkung einer eingespannten Membran
- eine stationäre Wärmeleitung
- das Potential einer stationären inkompressiblen, reibungsfreien Strömung

# Diskretisierung

Überdecke wie im 1D Fall Einheitsquadrat  $\overline{\Omega} = [0, 1]^2$  mit Gitter der Schrittweite  $h = 1/n \rightsquigarrow$  Gitterpunkte

$$\overline{\Omega}_h = \{(x_i, y_j) | (x_i, y_j) = (ih, jh); i, j = 0, 1, \dots, n\} \subset \overline{\Omega}$$



Diskretisierungsgitter im 2D Fall

## Diskretisierung von $\Delta u$

Approximiere wie im eindimensionalen Fall zweite Ableitungen  $u_{xx}(x, y)$ ,  $u_{yy}(x, y)$  durch Näherungsformeln

$$u_{xx}(x, y) \approx \frac{1}{h^2} (u(x - h, y) - 2u(x, y) + u(x + h, y))$$

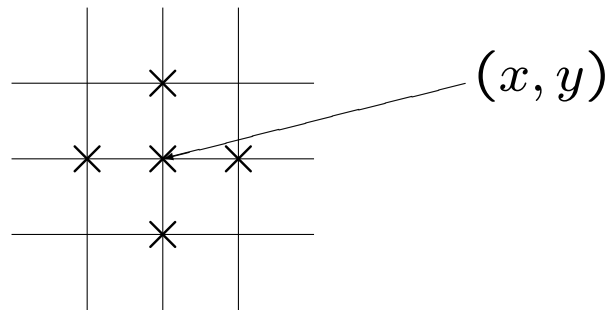
$$u_{yy}(x, y) \approx \frac{1}{h^2} (u(x, y - h) - 2u(x, y) + u(x, y + h)) \quad .$$

$\leadsto$  diskreter Laplace-Operator

$$\Delta_h u(x, y) = \frac{1}{h^2} (u(x - h, y) + u(x + h, y) + u(x, y - h) + u(x, y + h) - 4u(x, y))$$

# Sterndarstellung von $\Delta_h u$

$$\Delta_h u(x, y) = \frac{1}{h^2} (u(x - h, y) + u(x + h, y) + u(x, y - h) + u(x, y + h) - 4u(x, y))$$



Geometrisches Muster des diskreten Laplace-Operators

Hierdurch motiviert verwenden wir auch die sog. Sternschreibweise

$$\Delta_h u(x, y) := \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & -4 & 1 \\ & 1 & \end{bmatrix} u(x, y)$$

mit vielen Vorteilen, auch z. B. für die Programmierung

# Aufstellung des zugehörigen GLS

**Gesucht:** GLS für diskrete Lösung  $u_h(x, y) \quad (x, y) = (x_i, y_j) \in \overline{\Omega}_h$ ,  
die aus den Werten in den  $(n + 1)^2$  Gitterpunkten von  $\overline{\Omega}_h$  besteht

Innere Gitterpunkte:  $\Omega_h = \{(x_i, y_j) = (ih, jh) : i, j = 1, \dots, n - 1\}$

Rand-Gitterpunkte:  $\Gamma_h = \overline{\Omega}_h \setminus \Omega_h$

GLS für diskrete Lösung lautet

$$\begin{array}{ll} \Delta_h u_h &= f(x, y) \quad \text{für } (x, y) \in \Omega_h \\ u_h(x, y) &= g(x, y) \quad \text{für } (x, y) \in \Gamma_h \end{array}$$

und wird auch als unser *Modellproblem* bezeichnet

Für Programmierung effizienter Lösungsverfahren ist Matrixdarstellung des GLS oft nicht hilfreich;

Sinnvoller: geometrische Vorstellung, Unbekannte und Gleichungen sitzen in Gitterpunkten

# Diskretisierungsgenauigkeit, Konvergenz klassischer Iterationsverfahren

Ohne Beweis: Diskretisierungsfehler, d. h. Fehler zwischen diskreten Näherungslösung  $u_h(x)$  und exakter Lösung  $u(x)$  verhält sich wie

$$\text{const} \cdot h^2 .$$

Um Diskretisierungsfehler klein zu machen, muss Schrittweite  $h$  auch hier entsprechend klein sein. Anzahl der Unbekannten in unserem GLS und Anzahl der Gleichungen wird dann sehr groß und Rechenaufwand zur Lösung des GLS wächst entsprechend.

Konvergenzeigenschaften von JAC, GS und SOR entsprechen 1D Fall

Konvergenzfaktoren von JAC und GS:  $1 - O(h^2)$

Konvergenzfaktor von SOR:  $1 - O(h)$



# Zusammenfassung

$$\begin{array}{l} \text{RWA} \end{array} \quad \boxed{\begin{array}{l} \Delta u(x, y) = f(x, y) \quad (\Omega = (0, 1)^2) \\ u(x, y) = g(x, y) \quad (\partial\Omega) \end{array}}$$

wird ersetzt durch GLS aus Diskretisierung auf Gitter  $\Omega_h$ ,  $h = 1/n$ :

$$\Delta_h u_h(x_i, y_j) = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & -4 & 1 \\ & 1 & \end{bmatrix}_h u_h(x_i, y_j) = f(x_i, y_j) \quad (\Omega_h)$$
$$u_h(x_i, y_j) = g(x_i, y_j) \quad (\partial\Omega_h)$$

Lösung des GLS z.B. mit Gauß-Seidel; falls Randwerte richtig gesetzt sind:

```
Do Iteration=1, Niter
  Do j=1,n-1
    Do i=1,n-1
      u_h(i,j) = -0.25*(h*h*f(i,j)-u_h(i+1,j)-u_h(i-1,j)-u_h(i,j+1)-u_h(i,j-1))
    enddo
  enddo
enddo
```