Kompaktkurs

Lineare Gleichungssysteme
Hierarchische Matrizen

M. Bebendorf, O. Steinbach

SIMNET Styria

Das Land Steiermark

Wissenschaft und Forschung

Numerische Simulation

- stationäre und instationäre partielle Differentialgleichungen
  - Potentialgleichung (Temperatur, elektromagnetische Felder,...)
  - Festkörpermechanik (lineare Elastostatik, Elastoplastizität,...)
  - Strömungsmechanik (Stokes, Navier–Stokes)
- Kopplung verschiedener physikalischer Felder
  - Fluid–Struktur–Akustik
  - elektromechanische Felder
  - Mehrkörpersysteme
- Diskretisierung
  - Finite Element Methoden
  - Finite Differenzen Methoden
  - Randelementmethoden
  - Zeitdiskretisierung
- Familie von linearen (nichtlinearen) Gleichungssystemen

$$A\underline{x} = \underline{f}, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \; n \to \infty$$

Lineares Gleichungssystem

$$A\underline{x} = \underline{f}, \quad A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad n \to \infty$$

- Beschreibung und Anwendung der Systemmatrix A
  - A heißt vollbesetzt, falls Anzahl der Nichtnullelemente von A von der Größenordnung $\mathcal{O}(n^2)$ ist.
  - A heißt schwachbesetzt, falls Anzahl der Nichtnullelemente von A von der Größenordnung $\mathcal{O}(n \log^\alpha n)$ ist.
  - A heißt data sparse, falls A n^2 Nichtnullelemente besitzt, diese aber durch $\mathcal{O}(n \log^\alpha n)$ Einträge beschrieben werden kann.

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & & a_n \\ a_n & a_1 & a_2 & \\ & & \ddots & \\ a_2 & & a_n & a_1 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ n \end{pmatrix} (1 \dots n) = \begin{pmatrix} 1 & \dots & n \\ \vdots & & \vdots \\ n & \dots & n^2 \end{pmatrix}$$

zirkulante Matrix (n Einträge) Rang 1 Matrix ($2n$ Einträge)

  - Struktur der Matrix A

Lineares Gleichungssystem

$$A\underline{x} = \underline{f}, \quad A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad n \to \infty$$

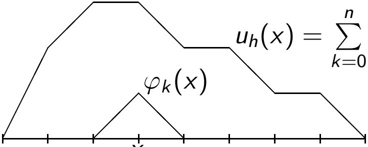
Lösungsverfahren

- direkte Verfahren
  - Gauß Elimination mit $\mathcal{O}(n^3)$ Multiplikationen
  - LU Zerlegung (Cholesky) mit $\mathcal{O}(n^3)$ Multiplikationen
  - schnelle direkte Methoden für schwachbesetzte Matrizen
  - strukurierte Matrizen (zirkulante Matrizen, FFT)
- Frage: Wird tatsächlich die exakte Lösung $\underline{x} = A^{-1}\underline{f}$ benötigt?
  - Modellierungsfehler
  - Diskretisierungsfehler
  - Verfahrensfehler (numerische Integration, Rundungsfehler)

  Hinreichend genaue Lösung ist ausreichend!
- Iterationsverfahren
  - klassische Iterationsverfahren (Jacobi, Gauß–Seidel, SOR)
  - Gradientenverfahren (steilster Abstieg, minimaler Defekt)
  - Verfahren orthogonaler Richtungen (CG, GMRES, BiCGStab)

Ziel: Effiziente Lösung von $A\underline{u} = \underline{f}$ für $n \to \infty$.

Beispiel: Bestimmung einer stückweise linearen Approximation



Minimierungsproblem

$$F(\underline{u}) = \int_0^1 \left[u(x) - \sum_{k=0}^{n} u_k \varphi_k(x) \right]^2 dx \to \min_{u_0,\ldots,u_n}, \quad \frac{\partial}{\partial u_\ell} F(\underline{u}) = 0$$

Variationsproblem

$$\sum_{k=0}^{n} u_k \int_0^1 \varphi_k(x)\varphi_\ell(x)dx = \int_0^1 u(x)\varphi_\ell(x)dx \quad \text{für } \ell = 0,\ldots,n$$

Lineares Gleichungssystem

$$M_h \underline{u} = \underline{f}, \quad M_h[\ell,k] = \int_0^1 \varphi_k(x)\varphi_\ell(x)dx$$

Systemmatrix

$$M_h = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & 1 & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(n+1)}$$

- M_h ist symmetrisch
- M_h ist streng diagonal dominant (nur in einer Raumdimension)
- M_h ist tridiagonal (nur in einer Raumdimension)
- M_h ist positiv definit (gilt für beliebige Ansatzfunktionen)
- M_h ist schwach besetzt ($3n+1$ Nichtnulleinträge)

Beispiel für $n = 7$

$$M_h = \frac{1}{42}\begin{pmatrix} 2 & 1 & & & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & & & \\ & & 1 & 4 & 1 & & & \\ & & & 1 & 4 & 1 & & \\ & & & & 1 & 4 & 1 & \\ & & & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & & & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$M_h^{-1} = \frac{14}{2911}\begin{pmatrix} 5042 & -1351 & 362 & -97 & 26 & -7 & 2 & -1 \\ -1351 & 2702 & -724 & 194 & -52 & 14 & -4 & 2 \\ 362 & -724 & 2534 & -679 & 182 & -49 & 14 & -7 \\ -97 & 194 & -679 & 2522 & -676 & 182 & -52 & 26 \\ 26 & -52 & 182 & -676 & 2522 & -679 & 194 & -97 \\ -7 & 14 & -49 & 182 & -679 & 2534 & -724 & 362 \\ 2 & -4 & 14 & -52 & 194 & -724 & 2702 & -1351 \\ -1 & 2 & -7 & 26 & -97 & 362 & -1351 & 5042 \end{pmatrix}$$

Matrix M_h schwach besetzt, aber inverse Matrix M_h^{-1} vollbesetzt

Frage: Gibt es eine Struktur in der Darstellung von M_h^{-1}?

$$M_h = \frac{1}{42} \left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc} 2 & 1 & & & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & & & \\ \hline & 1 & 4 & 1 & & & & \\ & & 1 & 4 & 1 & & & \\ \hline & & & 1 & 4 & 1 & & \\ & & & & 1 & 4 & 1 & \\ \hline & & & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & & & 1 & 2 \end{array} \right)$$

$$M_h^{-1} = \frac{14}{2911} \left(\begin{array}{cc} \begin{array}{cc} \begin{matrix} 5042 & -1351 \\ -1351 & 2702 \end{matrix} & \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -362 & 97 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -362 \\ 97 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 2 \end{pmatrix} & \begin{matrix} 2534 & -679 \\ -679 & 2522 \end{matrix} \end{array} & \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 7 \\ -26 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 26 & -7 & 2 & -1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 26 \\ -7 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 7 & -26 \end{pmatrix} & \begin{array}{cc} \begin{matrix} 2522 & -679 \\ -679 & 2534 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 97 \\ -362 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 97 & -362 \end{pmatrix} & \begin{matrix} 2702 & -1351 \\ -1351 & 5042 \end{matrix} \end{array} \end{array} \right)$$

M_h^{-1} ist exakt als Hierarchische Matrix darstellbar!

Beispiel: Finite Element Methoden

Dirichlet Randwertproblem für Poisson Gleichung

$$-\Delta u(x) = -\sum_{i=1}^{d} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} u(x) = f(x) \quad \text{für } x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \quad u(x) = 0 \quad \text{für } x \in \partial\Omega$$

Variationsproblem

$$\int_\Omega \nabla u(x) \nabla v(x) dx = \int_\Omega f(x) v(x) dx, \quad u(x), v(x) = 0 \text{ für } x \in \partial\Omega$$

Diskretisierung mit stückweise linearen finiten Elementen

$$K_h \underline{u} = \underline{f}, \qquad K_h[\ell, k] = \int_\Omega \nabla \varphi_k(x) \nabla \varphi_\ell(x) dx$$

mit FEM Steifigkeitsmatrix K_h

- K_h ist symmetrisch und positiv definit
- K_h ist schwach besetzt

Beispiel: $d = 1$

$$K_h = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$$

$n = 9$

$$K_h^{-1} = \frac{1}{9} \left(\begin{array}{cc} \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 8 & 7 \\ 7 & 14 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 & 5 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 6 \\ 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 18 & 15 \\ 15 & 20 \end{pmatrix} \end{array} & \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} & \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 20 & 15 \\ 15 & 18 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 6 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 14 & 7 \\ 7 & 8 \end{pmatrix} \end{array} \end{array} \right)$$

K_h^{-1} ist exakt als Hierarchische Matrix darstellbar!

Neumann Randwertproblem für Laplace Gleichung

$$-\Delta u(x) = 0 \quad \text{für } x \in \Omega, \quad \frac{\partial}{\partial n} u(x) = g(x) \quad \text{für } x \in \partial\Omega$$

$u = 1$ ist Lösung des homogenen Neumann Randwertproblems

$$-\Delta u(x) = 0 \quad \text{für } x \in \Omega, \quad \frac{\partial}{\partial n} u(x) = 0 \quad \text{für } x \in \partial\Omega$$

Randwertproblem ist nicht eindeutig lösbar!

Variationsproblem

$$\int\limits_\Omega \nabla u(x) \nabla v(x) dx = \int\limits_{\partial\Omega} g(x) v(x) ds_x$$

Lösbarkeitsbedingung

$$v = 1 : \quad \int\limits_{\partial\Omega} g(x) ds_x = 0$$

FEM Diskretisierung ($d = 1$)

$$K_h \underline{u} = \underline{f}, \quad K_h[\ell, k] = \int_\Omega \nabla\varphi_k(x)\nabla\varphi_\ell(x)dx$$

mit FEM Steifgkeitsmatrix

$$K_h = \frac{1}{h}\begin{pmatrix} -1 & 2 & -1 & & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & & \\ & & -1 & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \ddots & \ddots & -1 & & \\ & & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & & -1 & 2 & -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(n+1)}$$

- K_h ist symmetrisch
- K_h ist schwachbesetzt
- K_h ist singulär (Eigenvektor $\underline{u} = \underline{1}$)

Erweitertes Variationsproblem

$$\int_\Omega \nabla u(x) \nabla v(x) dx + \int_\Omega u(x) dx \int_\Omega v(x) dx = \int_{\partial\Omega} g(x) v(x) ds_x$$

$v = 1$ liefert Skalierungsbedingung

$$\int_\Omega u(x) dx = 0$$

modifzierte Steifigkeitsmatrix

$$\widetilde{K}_h = K_h + \underline{a}\,\underline{a}^\top, \quad a_k = \int_\Omega \varphi_k(x) dx$$

- $\widetilde{K}_h$ ist symmetrisch und positiv definit
- $\widetilde{K}_h$ ist data sparse

Beispiel: Stokes System

$$-\Delta \underline{u}(x) + \nabla p(x) = \underline{f}(x), \quad \operatorname{div} \underline{u}(x) = 0 \quad \text{für } x \in \Omega, \quad \underline{u}(x) = \underline{0} \quad \text{für } x \in \partial\Omega$$

mit Geschwindigkeitsfeld $\underline{u}$ und Druck p.
Bemerkung: Druck ist nur eindeutig bis auf additive Konstante!

Erweitertes Variationsproblem

$$\begin{aligned}
\int_\Omega \nabla \underline{u}(x) \nabla \underline{v}(x) dx + \int_\Omega \nabla p(x) \underline{v}(x) dx &= \int_\Omega \underline{f}(x) \underline{v}(x) dx \\
\int_\Omega \operatorname{div} \underline{u}(x) q(x) dx + \int_\Omega p(x) dx \int_\Omega q(x) dx &= 0
\end{aligned}$$

Erweitertes Variationsproblem

$$
\begin{aligned}
\int_\Omega \nabla \underline{u}(x) \nabla \underline{v}(x) dx + \int_\Omega \nabla p(x) \underline{v}(x) dx &= \int_\Omega \underline{f}(x) \underline{v}(x) dx \\
\int_\Omega \operatorname{div} \underline{u}(x) q(x) dx + \int_\Omega p(x) dx \int_\Omega q(x) dx &= 0
\end{aligned}
$$

FEM Diskretisierung

$$
\begin{pmatrix} A_h & -B_h \\ B_h^\top & \underline{a}\,\underline{a}^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{f} \\ \underline{0} \end{pmatrix}
$$

- Voraussetzung: diskrete Stabilitätsbedingung
- Systemmatrix positiv definit, aber Block schief symmetrisch
- Erweiterung auf nichtlineares Navier–Stokes System

Literatur

1. R. Barrett et. al.: Templates for the Solution of Linear Systems. Building Blocks for Iterative Methods. SIAM, Philadelphia, 1993.
2. A. Meister: Numerik linearer Gleichungssysteme. Eine Einführung in moderne Verfahren. Vieweg, Braunschweig, 1999.
3. Y. Saad: Iterative Methods for Sparse Linear Systems. PWS Publishing, 1995.
4. O. Steinbach: Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme. Algorithmen und Anwendungen. B. G. Teubner, Stuttgart, Leipzig, Wiesbaden, 2005.