Numerische Lineare Algebra
Einleitung

Sven Beuchler

Institut für Numerische Simulation
Universität Bonn

13. April 2011, Bonn

Aufgabenstellung

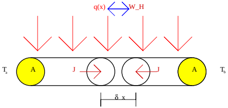
- Gegeben: aufgeheizter Stab der Länge
  Temperatur T_a am linken und Temperatur T_b am rechten Ende
- Gesucht: Temperaturverteilung im Stab

Modellierungsannahmen:

- Stab ist ein eindimensionales Kontinuum der Länge L
- Wärmestrom nur in Längsrichtung
- Stab besitze eine konstante Wärmeleitzahl
- Es gibt innere stationäre Wärmequellen mit Dichte $q(x)$

Energiebilanz

Betrachten die Energiebilanz in einem Kontrollvolumen am Ort x mit Querschnitt A und Dicke Δx:



Die aufgenommene Wärmemenge W_H pro Zeit:

$$W_H = \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} q(\xi)\, d\xi \cdot A$$

Die abgeführte Wärmemenge ΔJ pro Zeit durch Wärmeleitung im Stab:

$$\Delta J = \left[\sigma\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) - \sigma\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right)\right] \cdot A,$$

(σ Wärmestromdichte)
Bilanzierung der Energie (1. Hauptsatz der Thermodynamik)

$$\Delta J = W_H$$

Herleitung

Fouriersches Wärmeleitgesetz:

$$\sigma(x) = -\lambda \frac{dT}{dx}(x).$$

mit

- $T(x)$ ist die Temperatur im Stab am Ort x,
- λ ist die Wärmeleitzahl des Stabes (materialabhängig)

Einsetzen liefert:

$$\begin{aligned} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} q(\xi)\, d\xi \cdot A &= \left[\sigma\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) - \sigma\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right)\right] \cdot A \\ \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} q(\xi)\, d\xi &= -\lambda \frac{dT}{dx}\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) + \lambda \frac{dT}{dx}\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right). \end{aligned}$$

Herleitung 2

Division durch Δx und dem Grenzübergang $\Delta x \to 0$ liefert:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\lambda}{\Delta x}\left(-\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\left(x+\frac{\Delta x}{2}\right)+\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\left(x-\frac{\Delta x}{2}\right)\right) &= \lim_{\Delta x \to 0}\frac{1}{\Delta x}\int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} q(\xi)\,\mathrm{d}\xi, \\ \leftrightarrow \quad -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\lambda\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\right)(x) &= q(x), \end{aligned}$$

also, falls λ konstant ist,

$$-\lambda\frac{d^2T}{dx^2}(x) = q(x) \quad \text{für } x \in (0, L). \tag{1}$$

und

$$T(0) = T_a, \quad T(L) = T_b \tag{2}$$

Gleichung in 3D (Material ist homogen und isotrop):

$$-\lambda\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)T = q(x,y,z)$$

Institut für Numerische Simulation
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

Einschub: Partielle Ableitungen

Definition

Es sei $f : \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}^n$, $x \mapsto y = f(x)$ und $e_j \in \mathbb{R}^m$ der j-te Einheitsvektor. Dann heißt (falls existent)

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \lim_{h \to 0} \frac{f_i(x + he_j) - f_i(x)}{h}$$

partielle Ableitung von f_i in Richtung $e_j j$.

Weiters ist

$$\begin{aligned}
\nabla u : &= \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x_1} & \frac{\partial u}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial u}{\partial x_m} \end{pmatrix}^\top \quad \text{nur für } n = 1 \\
\operatorname{div} u : &= \nabla \cdot u = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad \text{nur für } n = m \\
\operatorname{rot} u : &= \nabla \times u \quad \text{nur für } m, n = 3 \\
\triangle u : &= \operatorname{div} \nabla u = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} \quad \text{nur für } n = 1
\end{aligned}$$

Institut für Numerische Simulation
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

Maxwellsche Gleichungen

Modellierung elektrodynamischer Effekte mit den physikalischen Größen

- $\vec{E}$ -elektrisches Feld, Einheit ist $\frac{V}{m}$,
- $\vec{B}$ -magnetische Flußdichte, Einheit ist $\frac{V\,s}{m^2}$,
- $\vec{D}$ -elektrische Flußdichte, Einheit ist $\frac{A\,s}{m^2}$,
- q_E -Ladungsdichte, Einheit ist $\frac{A\,s}{m^3}$.

Maxwellsche Gleichungen u.a.

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \tag{3}$$

$$\operatorname{div} \vec{D} = q_E, \tag{4}$$

und das Materialgesetz $\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E}$ mit

- $\varepsilon_{0/r}$... absolute und relative Dielektrizitätskonstante, d.h. $\varepsilon_0 = 8.8542 \cdot 10^{-12} \frac{As}{Vm}$,

Institut für Numerische Simulation
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

Potentialgleichung

Elektrostatik: elektrische Feld $\vec{E}$ hängt nicht von der Zeit ab und es gibt keine Magnetfelder: Aus (3) folgt dann

$$\operatorname{rot} \vec{E} = 0,$$

d.h. $\vec{E}$ ist wirbelfrei. Damit gibt es ein elektrisches Potential (Differenz ist Spannung U) ϕ mit

$$\vec{E} = -\nabla\phi. \tag{5}$$

Mit (4) und dem Materialgesetz erhalten wir

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{D} &= q_E \\ \operatorname{div} \varepsilon\vec{E} &= q_E \\ -\operatorname{div} \varepsilon\nabla\phi &= q_E. \end{aligned}$$

Falls sogar $\varepsilon = \varepsilon_0$ gilt, folgt daraus

$$-\triangle\phi = \frac{q_E}{\varepsilon_0}. \tag{6}$$

1. Ableitung

- Gegeben: Eine Funktion $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ oder einfach eine Berechnungsvorschrift $f(x)$
- Gesucht: Approximation von $f'(x)$.
- Idee: Analysis:

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

also für hinreichend kleines $h > 0$ gilt:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} =: \delta_h^+ f(x) \quad \text{vorwärt. Differenzenquotient.}$$

Analog ist

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} =: \delta_h^- f(x) \quad \text{rückwärt. Differenzenquotient}$$

und der zentrale Differenzenquotient

$$f'(x) \approx \frac{1}{2} \left(\delta_h^+ f(x) + \delta_h^- f(x) \right) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = \delta_h^z f(x).$$

Institut für Numerische Simulation
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

2. Ableitung

Wir nähern die 2 Ableitungen jeweils durch den zentralen Differenzenquotienten mit Schrittweite $h/2$ an:

$$\begin{aligned}
f''(x) &\approx \delta^z_{h/2} f'(x) = \frac{f'(x+h/2) - f'(x-h/2)}{h} \\
&\approx \frac{1}{h}\left(\frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{f(x)-f(x-h)}{h}\right) \\
&= \frac{f(x+h)+f(x-h)-2f(x)}{h^2} := \delta^2_h f(x)
\end{aligned}$$

Approximation	Fehler
$f'(x) - \delta_h^+ f(x)$	$\mathcal{O}(h)$
$f'(x) - \delta_h^- f(x)$	$\mathcal{O}(h)$
$f'(x) - \delta_h^z f(x)$	$\mathcal{O}(h^2)$
$f''(x) - \delta_h^2 f(x)$	$\mathcal{O}(h^2)$

1D-Modell

Gesucht ist eine Funktion u mit

$$\begin{aligned} -u''(x) &= f(x), \qquad x \in (0,1) \\ u(0) = u(1) &= 0, \end{aligned}$$

wobei f eine vorgegebene Funktion ist.
Das kontinuierliche Intervall $[0,1]$ wird durch eine endliche Punktmenge (Gitterpunkte), z.B. $x_i = ih$, $i = 0,1,\ldots,N$ mit $h = 1/N$, ersetzt. Die 2. Ortsableitung in einem Gitterpunkt wird durch den zentralen Differenzenquotienten approximiert:

$$u''(x_i) \quad \approx \quad \frac{1}{h^2}\left(u(x_{i-1}) - 2u(x_i) + u(x_{i+1})\right).$$

Es entsteht folgendes lineare Gleichungssystem: $u_i \approx u(x_i)$

$$-\frac{1}{h^2}\left(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}\right) = f(x_i) \quad \text{für } i = 1,2,\ldots,N-1$$

mit den Randbedingungen

$$u_0 = u_N = 0$$

Lineares Gleichungssystem

Kompakt erhalten wir

$$K_h \underline{u}_h = \underline{f}_h$$

mit der Matrix

$$K_h = (K_{ij})_{i,j=1,2,\ldots,N-1} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

und den Vektoren

$$\underline{u}_h = (u_i)_{i=1,2,\ldots,N-1}, \quad \underline{f}_h = (f_i)_{i=1,2,\ldots,N-1} \text{ mit } f_i = f(x_i).$$

2D-Modell

- Sei nun $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ (das Einheitsquadrat in der Ebene),
- Γ bezeichnet den Rand der Menge Ω,
- Es sei $f : \Omega \mapsto \mathbb{R}$ gegeben,
- Gesucht ist eine Funktion $u : \overline{\Omega} \mapsto \mathbb{R}$ mit

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} &= f \quad \text{in } \Omega, \\ u &= 0 \quad \text{auf } \Gamma = \partial\Omega \end{aligned} \tag{7}$$

- Diskretisierung von (7) auf dem Gitter
  $\Omega_h = \{(x_i, y_j) | i, j = 1, 2, \ldots, N-1\}$ mit $h = 1/N$, $x_i = i \cdot h$, $y_j = j \cdot h$
- zentraler Differenzenquotient für die zweiten Ableitungen $u(x_i, y_j) \approx u_{ij}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &\approx \frac{1}{h^2} \left(u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j} \right), \\ \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} &\approx \frac{1}{h^2} \left(u_{i,j-1} - 2u_{ij} + u_{i,j+1} \right), \end{aligned}$$

Lineares Gleichungssystem

- Einsetzen in (7) liefert im Gitterpunkt (x_i, y_j) eine Differenzengleichung

$$\frac{1}{h^2}(-u_{i-1,j} - u_{i,j-1} + 4u_{ij} - u_{i+1,j} - u_{i,j+1}) = f_{ij},$$

wobei $f_{ij} = f(x_i, y_j)$.

- Anordnung der Unbekannten u_{ij} und Differenzengleichungen zeilenweise von links nach rechts und die Zeilen von unten nach oben
- Es entsteht unter Verwendung der Randbedingungen

$$u_{0j} = 0, \quad u_{N,j} = 0, \quad u_{i0} = 0, \quad u_{i,N} = 0$$

das lineare Gleichungssystem

$$K_h \underline{u}_h = \underline{f}_h$$

Lineares Gleichungssystem 2

$$
K_h = \frac{1}{h^2}
\left(
\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
4 & -1 & & & -1 & & & & & & & & & & & \\
-1 & \ddots & \ddots & & & \ddots & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & \ddots & -1 & & & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & -1 & 4 & & & & -1 & & & & & & & & \\
\hline
-1 & & & & 4 & -1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & -1 & \ddots & \ddots & & \ddots & & & & & & & \\
 & & \ddots & & & \ddots & \ddots & -1 & & & & & & & & \\
 & & & -1 & & & -1 & 4 & & & & \ddots & & & & \\
\hline
 & & & & & & & & \ddots & \ddots & & & -1 & & & \\
 & & & & & \ddots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \ddots & & \\
 & & & & & & \ddots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & \ddots & \ddots & & & & -1 \\
\hline
 & & & & & & & & -1 & & & & 4 & -1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & & & -1 & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & \ddots & & & \ddots & \ddots & -1 \\
 & & & & & & & & & & & -1 & & & -1 & 4
\end{array}
\right)
$$

Eigenschaften Matrix K_h

- Gleichungssystem ist für große N sehr groß ($n_h = (N-1)^2$ Unbekannte und Gleichungen)
- je größer N, desto genauer ist die Approximation:
  - h ist ein Maß für die Feinheit der Zerlegung,
  - Größe n_h ist proportional zu $1/h^d$ ist, wobei d die Raumdimension des Problems ist, kurz $n_h = \mathcal{O}(1/h^d)$.
- Matrix ist dünnbesetzt (maximal 5 Nichtnulleinträge pro Zeile):