

Numerik von Gleichungssystemen

1. Ergänzungsblatt

Nicht nur das Lösen eines Gleichungssystems sondern bereits das Aufstellen der zugehörigen Systemmatrix kann mit einem gewissen Aufwand verbunden sein. Tatsächlich stellt die Berechnung der Systemmatrix und der "rechten Seite" in vielen praktischen Anwendungen den Hauptteil der Arbeit dar, weil sie problemspezifisch ist und somit nicht den Einsatz von Standardroutinen erlaubt, wie sie im Falle des anschließenden LöSENS zur Verfügung stehen.

Große Gleichungssysteme ergeben sich typischerweise beim Diskretisieren von (partiellen) Differentialgleichungen. Daher soll zunächst anhand eines Beispiels beschrieben werden, wie man von einer partiellen Differentialgleichung zu einem großen Gleichungssystem kommt, welches uns im weiteren Verlauf der Übungen als Musterbeispiel dienen mag. Dabei werden wir auf eine mathematische Diskussion der Diskretisierung verzichten sondern die zugrunde liegende Idee plausibel motivieren.

Ein Randwertproblem (RWP)

Es sei $\Omega = (0, a) \times (0, b)$ ein rechteckiges Gebiet, $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetig differenzierbare Funktion und $\phi_0, \phi_a \in \mathbb{R}$ zwei Randwerte. Gesucht ist eine Funktion ϕ , z.B. aus $C^1(\bar{\Omega}) \cap C^2(\Omega)$, welche den folgenden Bedingungen genügt:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\sigma \nabla \phi)(\mathbf{x}) &= 0 & \mathbf{x} &= (x_1, x_2) \in \Omega & \text{(partielle Differentialgleichung)} \\ (\partial_2 \phi)(x_1, 0) &= 0 & x_1 &\in (0, a) & \text{(homogene Neumann RB am unteren Rand)} \\ (\partial_2 \phi)(x_1, b) &= 0 & x_1 &\in (0, a) & \text{(homogene Neumann RB am oberen Rand)} \\ \phi(0, x_2) &= \phi_0 & x_2 &\in (0, b) & \text{(Dirichlet RB am linken Rand)} \\ \phi(a, x_2) &= \phi_a & x_2 &\in (0, b) & \text{(Dirichlet RB am rechten Rand)}. \end{aligned}$$

Physikalischer Hintergrund des RWPs

Das Randwertproblem beschreibt den Fluß des elektrischen Stromes durch eine Folie mit ortsvariabler Leitfähigkeit σ , an welche links und rechts ein Potential ϕ_0 bzw. ϕ_a angelegt wird (siehe Skizze). Nach dem Ohmschen Gesetz steht die

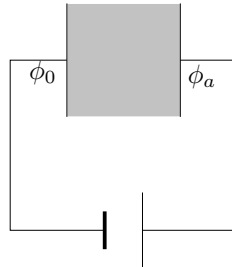


Abbildung 1:

Stromdichte \mathbf{j} in einem Proportionalitätsverhältnis zum elektrischen Feld \mathbf{E} , wobei σ als Leitfähigkeit die Rolle des Proportionalitätsfaktors einnimmt: $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$. Läßt sich das elektrische Feld durch ein Potential ϕ beschreiben, so gilt $\mathbf{E} = -\nabla \phi$ und somit $\mathbf{j} = -\sigma \nabla \phi$. Da in der Folie weder Ladungsträger erzeugt noch vernichtet werden (der elektrische Strom 'versickert' nicht), muß das Stromfeld divergenzfrei sein, also $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$. Durch Kombination erhält man eine Bestimmungsgleichung für das Potential ϕ , welche gerade der obigen partiellen Differentialgleichung entspricht. Schließlich modellieren die Neumannschen Randbedingungen die Tatsache, daß der Strom die Folie nicht seitlich verlassen kann. Dies impliziert aber, daß \mathbf{j} und wegen der Proportionalitätsbeziehung auch \mathbf{E} sowie $\nabla \phi$ am Rand parallel zum Rand gerichtet sind. Somit darf $\nabla \phi$ am Rand keine Normalkomponente sondern nur eine Tangentialkomponente aufweisen.

Diskretisierung mittels finiter Differenzen

Um das RWP in ein diskretes Problem zu verwandeln (d.h. in ein Problem, dessen Lösungsraum durch endlich viele Freiheitsgrade gekennzeichnet ist) nutzt man folgende allgemeine Beziehung für eine C^3 -Funktion:

$$\frac{f(x + h/2) - f(x - h/2)}{h} = f'(x) + \underbrace{O(h^2)}_{\text{Korrektur}}. \quad (1)$$

Durch zweimaliges Anwenden von (1) lassen sich die partiellen Ableitungen ∂_i mittels Differenzenquotienten ersetzen:

$$\begin{aligned} \partial_i (\sigma \partial_i \phi)(\mathbf{x}) &= \frac{\sigma(\mathbf{x} + \frac{h}{2} \mathbf{e}_i) (\partial_i \phi)(\mathbf{x} + \frac{h}{2} \mathbf{e}_i) - \sigma(\mathbf{x} - \frac{h}{2} \mathbf{e}_i) (\partial_i \phi)(\mathbf{x} - \frac{h}{2} \mathbf{e}_i)}{h} + O(h^2) \\ &= h^{-1} \left[\sigma(\mathbf{x} + \frac{h}{2} \mathbf{e}_i) \frac{\phi(\mathbf{x} + h \mathbf{e}_i) - \phi(\mathbf{x})}{h} - \sigma(\mathbf{x} - \frac{h}{2} \mathbf{e}_i) \frac{\phi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x} - h \mathbf{e}_i)}{h} \right] + O(h^2). \end{aligned} \quad (2)$$

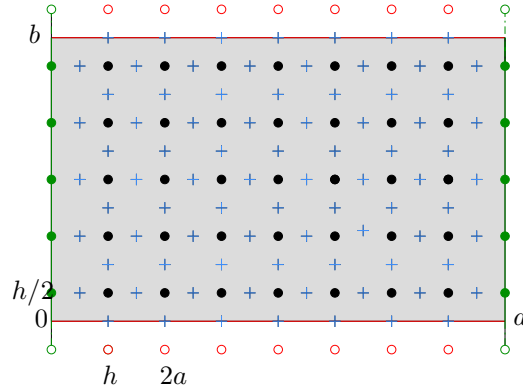


Abbildung 2: Das graue Rechteck entspricht $\Omega = (0, a) \times (0, b)$. Die beiden Dirichlet-Ränder sind durch grüne, die Neumann-Ränder durch rote Linien kenntlich gemacht. Ω_h ist durch die Vereinigung der schwarzen und ausgefüllten grünen Knoten gegeben. Die blauen Kreuze markieren die Stellen (staggered grid), an denen σ auszuwerten ist.

Ist ϕ eine C^4 -Lösung der Differentialgleichung $\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi)(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^2 \partial_i (\sigma \partial_i \phi)(\mathbf{x}) = 0$ so resultiert aus (2) für beliebiges $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega$:

$$\sigma(x + \frac{h}{2}, y)\phi(x + h, y) + \sigma(x - \frac{h}{2}, y)\phi(x - h, y) + \sigma(x, y + \frac{h}{2})\phi(x, y + h) + \sigma(x, y - \frac{h}{2})\phi(x, y - h) - [\sigma(x + \frac{h}{2}, y) + \sigma(x - \frac{h}{2}, y) + \sigma(x, y + \frac{h}{2}) + \sigma(x, y - \frac{h}{2})]\phi(x, y) = O(h^4). \quad (3)$$

Zur Diskretisierung führt man eine Gitterfunktion $\hat{\phi}$ ein, welche lediglich auf einer endlichen Menge von Punkten aus Ω definiert ist. Vereinfachend sei angenommen, daß a und b ganzzahlige Vielfache von h sind. Es ist dann günstig, das Gitter Ω_h so zu wählen wie in Abbildung 2 dargestellt, d.h.

$$\Omega_h := (0, \frac{h}{2}) + \mathbb{N}h\mathbf{e}_1 + \mathbb{N}h\mathbf{e}_2 \cap \bar{\Omega}.$$

Wegen (3) fordert man in allen Gitterpunkten, welche über vier Nachbarn in Ω_h verfügen (d.h. $\mathbf{x} \in \Omega_h, \mathbf{x} \pm h\mathbf{e}_1 \in \Omega_h$ und $\mathbf{x} \pm h\mathbf{e}_2 \in \Omega_h$),

$$\left[\tilde{\mathbf{L}}_1 \sigma \mathbf{L}_1 \hat{\phi} + \tilde{\mathbf{R}}_1 \sigma \mathbf{R}_1 \hat{\phi} + \tilde{\mathbf{L}}_2 \sigma \mathbf{L}_2 \hat{\phi} + \tilde{\mathbf{R}}_2 \sigma \mathbf{R}_2 \hat{\phi} - (\tilde{\mathbf{L}}_1 \sigma + \tilde{\mathbf{R}}_1 \sigma + \tilde{\mathbf{L}}_2 \sigma + \tilde{\mathbf{R}}_2 \sigma) \hat{\phi} \right](\mathbf{x}) = 0. \quad (4)$$

Hierbei stellen $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2$ und $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ Verschiebungen um h in negative bzw. positive Richtung der x_1 - und x_2 -Achse dar; die aufgesetzte Tilde deutet Verschiebungen um den Betrag $\frac{1}{2}h$ statt h an.

Um auch zu Gleichungen für $\hat{\phi}$ in denjenigen Gitterpunkten zu gelangen, deren Nachbarn nicht sämtlich zu Ω_h gehören, sind die Randbedingungen zu beachten. Besonders einfach ist dies im Falle der Knoten, welche auf den Dirichlet-Rändern liegen (grüne Knoten). Da hier der Wert von ϕ durch die Dirichlet Randbedingung vorgeschrieben ist, sind die Werte von $\hat{\phi}$ in den grünen Knoten bereits bekannt.

Im Falle der Neumannschen Randbedingungen nimmt man an, ϕ ließe sich über Ω hinaus glatt fortsetzen, so daß ϕ insbesondere in den roten Kringeln (Geisterknoten) ausgewertet werden kann, welche durch Spiegelung der schwarzen Knoten am Rand hervorgehen. Ist $(x, h/2)$ ein schwarzer Knoten am unteren Rand und $(x, -h/2)$ der zugehörige Geisterknoten, so approximiert $\frac{\phi(x, h/2) - \phi(x, -h/2)}{h} = \partial_2 \phi(x, 0) + O(h^2)$ die Normalableitung von ϕ auf dem Rand. Da diese laut Neumann-Bedingung verschwinden soll, folgt $\phi(x, h/2) = \phi(x, -h/2) + O(h^3)$. Dies motiviert, sich $\hat{\phi}$ ebenfalls fortgesetzt zu denken und die Werte in den Geisterknoten mit denen in den gegenüberliegenden Randknoten zu identifizieren.

Da ϕ und $\hat{\phi}$ in den Gitterknoten fast dieselben Gleichungen erfüllen, welche sich nur durch kleine Korrekturterme unterscheiden, weichen ϕ und $\hat{\phi}$ selbst ebenfalls nur wenig voneinander in den Gitterknoten ab. Die Gitterfunktion $\hat{\phi}$ approximiert die Lösung ϕ des RWP umso besser je kleiner h gewählt ist, weil dadurch der Einfluß der Korrekturterme immer weiter abgeschwächt wird. Dies läßt sich praktisch schön beobachten und kann auch theoretisch bewiesen werden.