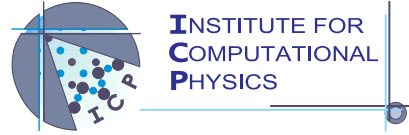




Universität Stuttgart



Physik auf dem Computer

Mitschriften zur Vorlesung
Sommersemester 2017

Universität Stuttgart
Fakultät 8: Fachbereich Physik
B. Sc. Physik

10. Mai 2017

Dr. Jens Smiatek
Institut für Computerphysik
Universität Stuttgart
Allmandring 3
D-70569 Stuttgart
Germany

Email: smiatek@icp.uni-stuttgart.de

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation: Physik auf dem Computer	5
1.1	Warum Physik auf dem Computer?	5
1.2	Anwendung einer numerischen Methode zur Lösung der Bewegungsgleichung eines Fadenpendels (harmonischer Oszillator)	6
1.2.1	Analytische Lösung mittels Näherung von kleinen Auslenkungen	7
1.2.2	Numerische Lösung mittels einer Simulation	8
2	Lineare Algebra: Lineare Gleichungssysteme	11
2.1	Lineare Gleichungssysteme	11
2.1.1	Allgemeine Matrixschreibweise eines linearen Gleichungssystems	12
2.2	Dreiecksmatrizen	12
2.3	Dreieckszerlegung einer Matrix	13
2.3.1	Prinzip des Gaußschen Eliminationsverfahrens	14
2.3.2	Ein Beispiel zur Gauß-Elimination	16
2.3.3	Zur Bestimmung des Pivotelements	17
2.3.4	Matrixinversion	18
2.3.5	Beispiel zur Matrizeninversion	19
2.3.6	LR-Zerlegung	21
3	Literaturverzeichnis	23

Weiterführende Literatur

- Bronstein, Ilja N., et al. *Taschenbuch der Mathematik*. Eds. Eberhard Zeidler und Wolfgang Hackbusch. Springer-Verlag, Berlin 2012.
- Faires, J. Douglas und Burden, Richard L. *Numerische Methoden*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg 1994.
- Press, William H., et al. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, Cambridge 1989.

Allgemeine Hinweise zur Notation

Kurznotationen:

- $i = 1(1)n$ steht für $i = 1, 2, \dots, n$
- $i = n(-a)1$ steht für $i = n, n - a, \dots, 1 + a, 1$

1 Motivation: Physik auf dem Computer

1.1 Warum Physik auf dem Computer?

Numerische Methoden werden in vielen Bereichen der modernen Physik eingesetzt. Als Paradebeispiel hierfür gilt die neue *Dreieinigkeits der Physik (New Trinity of Physics)* (Abb. 1.1). Neben den klassischen Disziplinen Theorie und Experiment wird seit Mitte

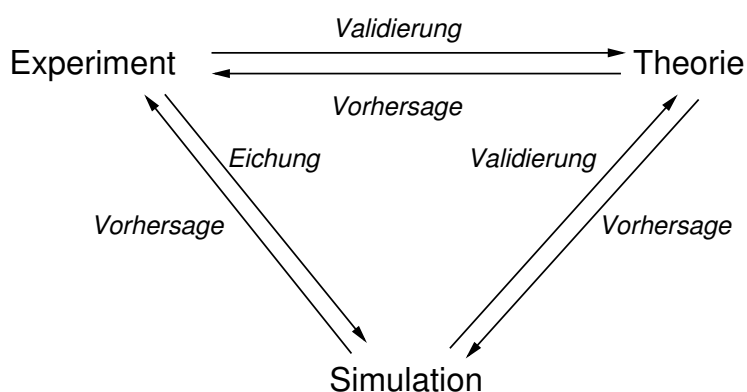


Abbildung 1.1: Die neue Dreieinigkeits der Physik mit den Säulen Experiment, Theorie und Simulation.

des letzten Jahrhunderts auch der Simulationsansatz als dritte Säule in der modernen Physik angesehen. Theorien können nun durch Experiment **UND** Simulation verifiziert werden! Dies ist insbesondere wichtig für Wissenschaftstheorien wie dem Kritischen Rationalismus [1], welcher durch Karl R. Popper (1902 - 1994) begründet wurde und als wesentliche Kernaussage darauf abzielt, dass eine Theorie falsifizierbar sein muss, da sie ansonsten keine Theorie darstellt.

Einsatz von Rechnern und numerischen Methoden in der Theorie:

- numerische Lösungen von Gleichungen
- symbolische Mathematik (Mathematica[©], ...)
- ...

Einsatz von Rechnern und numerischen Methoden im Experiment:

- Steuerung von Experimenten
- Auswertung von Daten
- ...



Fazit:

Computer und numerische Methoden werden in der modernen Physik in nahezu allen Bereichen eingesetzt.

1.2 Anwendung einer numerischen Methode zur Lösung der Bewegungsgleichung eines Fadenpendels (harmonischer Oszillator)

Im Folgendem soll nun ein einfaches Beispiel zur numerischen Lösung einer Bewegungsgleichung vorgestellt werden. Als Modellsystem dient das Fadenpendel (harmonischer

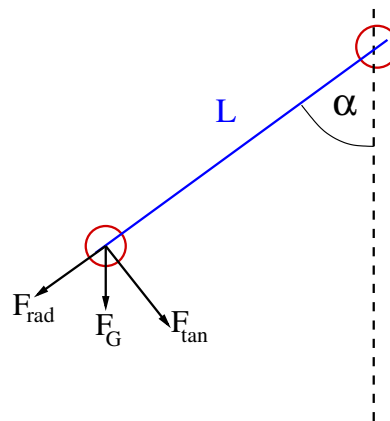


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung eines Fadenpendels.

Oszillator) in Abb. 1.2.

Annahmen:

- Steifer und masseloser Faden mit Länge L
- Kugel mit Masse m
- Es existiert keine Reibung im System (keine Energiedissipation)

Vorherrschende Kräfte:

- radiale Komponente F_{rad} (spielt keine Rolle für Bewegungsgleichung)
- Gravitation $F_G = m \cdot g$ mit Erdbeschleunigung $g = 9.81 \text{ m/s}^2$
- tangentielle Kraft $F_{\text{tan}} = m \cdot g \sin \alpha = m \cdot a$

Mittels Newton lässt sich die Rückstellkraft berechnen,

$$F_R = -F_{\text{tan}} = -m \cdot g \sin \alpha \quad (1.1)$$

welches

$$-m \cdot g \sin \alpha = m \cdot a \quad (1.2)$$

ergibt, wobei die Beschleunigung durch

$$a = -g \sin \alpha \quad (1.3)$$

gegeben ist. Die Tangentialbeschleunigung lässt sich auch mittels der Winkelbeschleunigung ausdrücken,

$$a = L\ddot{\alpha} \quad (1.4)$$

wodurch sich die allgemeine Bewegungsgleichung ergibt.

Allgemeine Bewegungsgleichung:

$$\ddot{\alpha}(t) = -\frac{g}{L} \sin \alpha(t) = -\omega^2 \sin \alpha(t) \quad (1.5)$$

1.2.1 Analytische Lösung mittels Näherung von kleinen Auslenkungen

Eine analytische Lösung für $\alpha(t)$ in Gleichung (1.5) kann für kleine Auslenkungen gefunden werden. Dann gilt $\sin \alpha \approx \alpha$ und Gleichung (1.5) vereinfacht sich zu

$$\ddot{\alpha}(t) = -\frac{g}{L} \alpha(t) \quad (1.6)$$

wobei eine Lösung von Gleichung (1.6) die folgende Grundform

$$\alpha(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t \quad (1.7)$$

mit Eigenfrequenz

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{L}} \quad (1.8)$$

darstellt. Die Vorfaktoren A und B können nun durch

1. Ruhelage: Auslenkung $\alpha(t_0) = 0$ bei $t_0 = 0 \rightarrow A = \alpha(t_0)$

2. Geschwindigkeit: $\dot{\alpha}(t_0) = -\omega A \sin \omega t_0 + \omega B \cos \omega t_0 \rightarrow B = \frac{\dot{\alpha}(t_0)}{\omega}$

bestimmt werden. Nach Einsetzen von A und B in Gleichung (1.7) ergibt sich

$$\alpha(t) = \alpha(t_0) \cos \omega t + \frac{\dot{\alpha}(t_0)}{\omega} \sin \omega t \quad (1.9)$$

als allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung (1.6).

1.2.2 Numerische Lösung mittels einer Simulation

Wie bereits angemerkt wurde, ist Gleichung (1.9) für kleine Auslenkungen gültig. Wie löst man aber die volle Bewegungsgleichung (1.5)? Hierfür ist keine einfache Näherung möglich und keine einfache analytische Lösung gegeben.

Als möglicher Ausweg kann eine **numerische Lösung** mittels einer Simulation gefunden werden.

Um die Simulation numerisch stabil zu halten, ist es sinnvoll, Parameterwerte für g und L innerhalb der gleichen Größenordnung festzulegen. Da in obigem Beispiel die Erdbeschleunigung mit $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ festgelegt ist, kann $L = 1 \text{ m}$ gewählt werden, so dass sich die Eigenfrequenz $\omega = \sqrt{g/L} \approx 3.13 \text{ s}^{-1}$ ergibt. Dies sollte die numerische Stabilität der Simulation gewährleisten. Allerdings tritt noch ein weiterer wichtiger Punkt bei Simulationen auf.



Kernproblem von Simulationen:

Es existiert kein kontinuierlicher Zeitverlauf bei Simulationen und eine Diskretisierung der Zeit in diskrete Zeitintervalle ist unabdingbar.

Die Abfolge der Zeitintervalle ist durch

$$t_n = n \cdot \delta t \quad (1.10)$$

gegeben, wobei $n = 0, \dots, N$ und δt die Breite des Zeitintervalls angibt. Das Ziel der Simulation ist nun, die allgemeine Bewegungsgleichung (1.5) numerisch zu lösen und als Funktion von $\alpha(t_n)$ darzustellen. Als erster Schritt für die Anwendung einer Simulation bedarf es einer willkürlichen, aber vernünftigen Wahl der Ausgangsposition und der Ausgangsgeschwindigkeit in Gleichung (1.5).

Hierzu werden

$$\dot{\alpha}(t_0) = v(t_0) \quad (1.11)$$

als Ausgangsgeschwindigkeit und $\alpha(t_0)$ als Ausgangsposition angenommen.

Als allgemeinen Ansatz wird eine Integration von Gleichung (1.5) durchgeführt, welche

$$\dot{\alpha}(t + \delta t) \equiv v(t_0 + \delta t) = v(t_0) + \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} [-\omega^2 \sin \alpha(\tau)] d\tau \quad (1.12)$$

ergibt. Die analytische Auswertung des Integrals ist jedoch in der Simulation nicht möglich, da nur die Stütz- und Auswertestellen bei ganzzahligen Vielfachen von δt bekannt sind oder berechnet werden können. Um dies zu ermöglichen und um die obige Gleichung numerisch handhabbar zu machen, wird folgende Näherung eingesetzt

$$f'(t) dt \approx f'(t) \lim_{\delta t \rightarrow 0} \delta t \quad (1.13)$$

welche zu

$$v(t_0 + \delta t) \approx v(t_0) - \omega^2 \sin \alpha(t_0) \delta t \quad (1.14)$$

führt, wobei $v(t_0 + \delta t)$ natürlich umso exakter ist, je kleiner der Wert für δt gewählt wurde. Allerdings gibt es bei physikalischen Simulationen auch eine untere Schranke, bei der die Gesetze der Quantenmechanik gelten und der Begriff von klassischen Trajektorien nicht mehr gültig ist.

Um die neue Position zu berechnen, wird dann nochmals "integriert", welches

$$\alpha(t_0 + \delta t) \approx \alpha(t_0) + v(t_0) \delta t \tag{1.15}$$

ergibt. Durch sukzessive und iterative Abfolge der Gleichungen (1.14) und (1.15) kann nun die Trajektorie des System näherungsweise berechnet werden.

Um die Qualität der numerischen Lösung einschätzen zu können, bedarf es der Überprüfung einer unabhängigen und wohlbekannten Kenngrösse des Systems. Eine solche Kenngrösse stellt die Gesamtenergie dar, welche durch kinetische und potentielle Anteile festgelegt ist und welche per Definition konstant ist (s. Abschnitt 1.2).

Weitere Beispiele für den Einsatz von numerische Lösungen von Bewegungsgleichungen sind z. B. auch

- die Berechnung der Flugbahn eines Balls oder einer Rakete
- die Bewegung von Planeten im Sonnensystem
- die Kollision von harten Kugeln

Um die Bewegungsgleichungen noch realitätsnäher zu gestalten, können auch weitere Effekte wie Reibungskräfte in die Bewegungsgleichungen aufgenommen werden. Ebenso gibt es auch bessere Simulationsalgorithmen als die oben vorgestellte Variante. Ein vielfach in Simulationen eingesetzter Algorithmus ist der Velocity Verlet Algorithmus [3, 2] oder Varianten davon, welche folgende Grundabfolge aufzeigen:

1. Schritt: Berechnung der Geschwindigkeiten $v(t + \delta t/2)$

$$v(t + \delta t/2) = v(t) + \frac{\delta t}{2m} F(t) \tag{1.16}$$

2. Schritt: Berechnung der neuen Positionen $\alpha(t + \delta t)$

$$\alpha(t + \delta t) = \alpha(t) + \delta t v(t + \delta t/2) \tag{1.17}$$

3. Schritt: Berechnung der neuen Geschwindigkeiten $v(t + \delta t)$

$$v(t + \delta t) = v(t + \delta t/2) + \frac{\delta t}{2m} F(t + \delta t) \tag{1.18}$$

und nach Schritt 3 der Algorithmus wieder bei Schritt 1 startet.

Trotz der universellen Anwendbarkeit von numerischen Lösungen gibt es immer aber einen Punkt zu beachten.



Nicht vergessen:

| Numerische Lösungen stellen immer nur approximative Lösungen dar!

2 Lineare Algebra: Lineare Gleichungssysteme

Eines der Grundlagen und der Hauptprobleme der numerischen Mathematik

- lineare Gleichungssysteme

Lineare Gleichungssysteme werden benutzt zum numerischen Lösen von Differentialgleichungen

- Rückführung auf Satz von linearen Gleichungssystemen

Durch die vorhandene Rechnerarchitektur ist es heutzutage möglich auch ein System von vielen Millionen Variablen zu lösen. In diesem Kapitel geht es hauptsächlich um grundlegende Methoden zum Lösen von linearen Gleichungssystemen wie z. B. die Gaußelimination, die LR- als auch die Choleskyzerlegung.

2.1 Lineare Gleichungssysteme

Bei vielen praktischen Aufgaben werden für n unbekannte Größen x_i (mit $i = 1, 2, \dots, n$) m Bedingungen in Gleichungsform gestellt:

$$\begin{aligned} F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ F_m(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Aufgabe:

Die Unbekannten x_i sind so zu bestimmen, dass sie eine Lösung des Gleichungssystems (2.1) darstellen.

Anmerkung:

In der Regel gilt $m = n$, d. h. die Anzahl der Unbekannten stimmt mit Anzahl der Gleichungen überein

Aber auch:

- $m > n$: überbestimmtes System, mehr Gleichungen als Unbekannte
- $m < n$: unterbestimmtes System, weniger Gleichungen als Unbekannte

auszeichnet, dass alle Einträge unterhalb (obere Dreiecksmatrix) bzw. oberhalb (untere Dreiecksmatrix) der Hauptdiagonalen null sind.

Rechte obere Dreiecksmatrix R (im Englischen U)

Quadratische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $a_{ij} = 0$ für $i > j$.

Linke untere Dreiecksmatrix L (im Englischen L)

Quadratische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $a_{ij} = 0$ für $i < j$.

Dreiecksmatrizen werden zum Lösen von linearen Gleichungssystemen benötigt, wie wir in den späteren Abschnitten noch sehen werden.

2.3 Dreieckszerlegung einer Matrix

Durch elementare Umformungen wie dem Vertauschen von Zeilen oder Spalten, der Multiplikation einer Zeile mit einer von 0 verschiedenen Zahl oder der Addition eines Vielfachen einer Zeile zu einer anderen Zeile kann das System $\overleftrightarrow{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ in ein gestaffeltes Gleichungssystem $\overleftrightarrow{R} \cdot \vec{x} = \vec{c}$ mit

$$\overleftrightarrow{R} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & r_{23} & \cdots & r_{2n} \\ & & r_{33} & & r_{3n} \\ & \emptyset & & \ddots & \vdots \\ & & & & r_{nn} \end{pmatrix}$$

überführt werden, welches eine Lösung besitzt, falls das Gleichungssystem (2.2) **regulär** mittels

$$\det A \neq 0 \tag{2.4}$$

ist. Die Lösung kann dann eindeutig durch **Rückwärtssubstitution**

Rückwärtssubstitutionsgleichung

$$x_i = \frac{1}{r_{ii}} \left(c_i - \sum_{k=i+1}^n r_{ik} x_k \right) \tag{2.5}$$

mit $i = n - 1, n - 2, \dots, 1$ und $x_n = \frac{c_n}{r_{nn}}$

bestimmt werden.

Für reguläre linke untere Dreiecksmatrizen kann die **Vorwärtssubstitution** angewendet werden. Entsprechend $\overleftarrow{A} \cdot \vec{x} = \vec{b} \rightarrow \overleftarrow{L} \cdot \vec{x} = \vec{c}$ mit

$$\overleftarrow{L} = \begin{pmatrix} \ell_{11} & & & & \\ \ell_{21} & \ell_{22} & & & \\ \ell_{31} & \ell_{32} & \ell_{33} & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \dots & \ell_{n,n-1} & \ell_{nn} \end{pmatrix}$$

gilt

Vorwärtssubstitutionsgleichung

$$x_i = \frac{1}{\ell_{ii}} \left(c_i - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik} x_k \right) \quad (2.6)$$

mit $i = 2, 3, \dots, n$ und $x_1 = \frac{c_1}{\ell_{11}}$

Des Weiteren gilt für Diagonalmatrizen

Diagonalmatrizensubstitution

$$x_i = \frac{c_i}{r_{ii}} \text{ bzw. } x_i = \frac{c_i}{\ell_{ii}} \text{ mit } i = 1, 2, \dots, n$$

Löseroutine in Python (SciPy):

- `scipy.linalg.solve_triangular (...)`

Frage: Wie gelingt nun aber die Transformation von \overleftarrow{A} zu \overleftarrow{R} ?

2.3.1 Prinzip des Gaußschen Eliminationsverfahrens

Das Gaußsche Eliminationsverfahren ist ein Verfahren, um den Übergang von \overleftarrow{A} zu \overleftarrow{R} in $n - 1$ Eliminationsschritten durchzuführen.

Hauptprinzip:

Mithilfe einer Gleichung soll eine Unbekannte aus den restlichen Gleichungen entfernt werden $\rightarrow m - 1$ Gleichungen mit $n - 1$ Unbekannten (1. Schritt) usw.

Elementaroperationen:

Für das System (Glg. (2.3)) $\overleftarrow{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ (im Folgenden als Koeffizientenmatrix $(A|b)$ dargestellt), können folgende Operationen vorgenommen werden:

Elementaroperationen

1. Vertauschung zweier Gleichungen (Zeilentausch in $(A|b)$)
2. Vertauschung zweier Spalten in \vec{x} und \overleftarrow{A} (Variablentausch)
3. Addition eines Vielfachen einer Zeile zu einer anderen Zeile
4. Multiplikation einer Zeile mit einer Konstanten $d \neq 0$

Ziel der Elementaroperationen:

Bringe Matrix $(A|b)$

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

spaltenweise auf Dreiecksform.

1. Schritt: Es sei $a_{11} \neq 0$ (Pivotelement, vgl. Abschnitt 2.3.3), ansonsten Vertauschung der Gleichungen

2. Schritt: Überführung der Matrix \overleftarrow{A} nach Matrix \overline{A} ; Vertausche die 1. und die r -te Zeile von \overleftarrow{A}

3. Schritt: Überführung der Matrix \overline{A} nach \overleftarrow{A}_1 ($(\overline{A}|b) \rightarrow (A_1|b_1)$); Subtrahiere für $i = 2, 3, \dots, n$ das ℓ_{i1} -fache der 1. Zeile von der i -ten Zeile der Matrix \overline{A}

Ergebnis:

$$\overleftarrow{A}_1 = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & a_{32}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix} \quad \vec{b}_1 = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

Farbige Teilmatrix ist vom Typ $(n-1, n-1)$ und wird analog zu \overleftarrow{A} im nächsten Schritt zu \overleftarrow{A}_2 überführt.

Die Elemente in \overleftarrow{A}_1 und \vec{b}_1 lassen sich mit:

$$a_{ik}^{(1)} = \overline{a}_{ik} - \ell_{i1} \cdot \overline{a}_{1k} \quad \text{mit} \quad \ell_{i1} = \frac{\overline{a}_{i1}}{\overline{a}_{11}}$$

$$b_i^{(1)} = \overline{b}_i - \ell_{i1} \cdot \overline{b}_1$$

für $i, k = 2, 3, \dots, n$ berechnen.

Durch sukzessives Wiederholen kann schlussendlich die gewünschte Form $\overleftarrow{R} \cdot \vec{x} = \vec{c}$ ermittelt werden, d. h. das Verfahren wird beendet, wenn alle $a_{ik}^{(r-1)} = 0$ für $i, k \geq r$ sind. Dann gilt $(A_{r-1}|b_{r-1}) = (R|c)$.

Lösungsverhalten:

1. Fall: Das System ist unlösbar für $a_{ik}^{(r-1)} \neq 0$ für $i, k \geq r$.
2. Fall: Das System ist lösbar für $a_{ik}^{(r-1)} = 0$ für $i, k \geq r$.

Im Speziellen gilt dann:

- i) $r = n$: Die Lösung ist eindeutig.
- ii) $r < n$: Die Lösung ist nicht eindeutig, $n - r$ Unbekannte sind frei wählbar.

2.3.2 Ein Beispiel zur Gauß-Elimination

Gegeben sei folgendes Gleichungssystem

$$\begin{aligned}5x_1 - x_2 + 2x_3 &= 3 \\7x_2 + x_3 &= 4 \\10x_1 + x_2 + x_3 &= 1\end{aligned}$$

welches folgende Koeffizientenmatrix liefert:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 5 & -1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 1 & 4 \\ 10 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right) \begin{array}{l} \mathbf{E}_1 \\ \mathbf{E}_2 \\ \mathbf{E}_3 \end{array}$$

mit dem kanonischen Pivotelement $a_{11} = 5$ (vgl. Abschnitt 2.3.3). Die jeweiligen \mathbf{E}_1 , \mathbf{E}_2 und \mathbf{E}_3 kennzeichnen die jeweiligen Zeilen in der Koeffizientenmatrix, wobei die veränderten Zeilen nach p Elementaroperationen mit $\mathbf{E}_i^{(p)}$ für $i = 1, 2, 3$ notiert werden.

1. Schritt: Vertausche E_3 mit E_2 :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_1 \\ \mathbf{E}_2 \\ \mathbf{E}_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{E}_1 \\ \mathbf{E}_3 \\ \mathbf{E}_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{E}'_1 \\ \mathbf{E}'_2 \\ \mathbf{E}'_3 \end{pmatrix}$$

2. Schritt: Multipliziere E'_1 mit (-2) und addiere zu E'_2 :

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 5 & -1 & 2 & 3 \\ 0 & 3 & -3 & -5 \\ 0 & 7 & 1 & 4 \end{array} \right) \begin{array}{l} \mathbf{E}''_1 \\ \mathbf{E}''_2 \\ \mathbf{E}''_3 \end{array}$$

3. Schritt: Multipliziere E_2'' mit $(-\frac{7}{3})$ und addiere zu E_3'' :

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 5 & -1 & 2 & 3 \\ 0 & 3 & -3 & -5 \\ 0 & 0 & 8 & \frac{47}{3} \end{array} \right)$$

Obige Matrix hat die gewünschte rechte obere Dreiecksform und kann nun eindeutig durch Rückwärtssubstitution (Glg. (2.5)) oder durch Einsetzen der Werte gelöst werden.

Lösung durch Einsetzen:

i) $8x_3 = \frac{47}{3} \rightarrow x_3 = \frac{47}{24}$

ii) $3x_2 - 3 \cdot \frac{47}{24} = -5 \rightarrow x_2 = \frac{7}{24}$

iii) $5x_1 - \frac{7}{24} + 2 \cdot \frac{47}{24} = 3 \rightarrow x_1 = -\frac{1}{8}$

Lösung durch Rückwärtssubstitution (Glg. (2.5)):

i) $x_3 = \frac{\frac{47}{3}}{8}$ mit $i = n = 3$.

ii) $x_2 = \frac{1}{r_{22}}(c_2 - r_{23} \cdot x_3) = \frac{1}{3}(-5 + 3 \cdot \frac{47}{24}) = \frac{7}{24}$ mit $i = n - 1$.

iii) $x_1 = \dots$

2.3.3 Zur Bestimmung des Pivotelements

Das bereits erwähnte Element a_{r1} heißt Pivotelement (franz./engl. "Drehpunkt"), da es den

Dreh- und Angelpunkt des iterativen Verfahrens der Gausss-Elimination darstellt.

⇒ Numerisch günstig für Wahl des Pivotelements: $a_{r1} \gg 1$

Wahlmöglichkeiten für Pivotelement

1. **Kanonische Pivotwahl:** keine Vertauschungen!
Einsatz nur bei Sicherstellung $a_{r1} \gg 1$
Anmerkung: Verfahren scheitert schon bei $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
2. **Spaltenpivotwahl:** Pivotelement ist das betragsmäßig größte Element in der Spalte
(Vertauschung der Zeilen, aber Variablenreihenfolge bleibt unverändert.)
3. **Totalpivotwahl:** Bestimme als Pivotelement das betragsgrößte Element in der Restmatrix
(Spalten- und Zeilentausch nötig!)
Abfolge:
 - a) Vertauschung der Zeilen
 - b) Vertauschung der Spalten

Anmerkungen zur Gauß-Elimination:

Benötigte Anzahl von Rechenoperationen bei Gauß-Elimination: $O(n^3)$

In Python: Keine Gauß-Elimination (zu langsam)

Stattdessen in Python für eine eindeutig lösbare Matrix: `scipy.linalg.solve()`

Basiert auf LR-Zerlegung (vgl. Abschnitt 2.3.6)

2.3.4 Matrixinversion

Es sei $\overleftrightarrow{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär, d.h. eine quadratische Matrix mit existierender Inverser $\overleftrightarrow{A}^{-1}$.

Es gilt weiterhin das allgemeine Gleichungssystem (Glg. (2.3)) $\overleftrightarrow{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$.

Man kann dann zeigen, dass zu einer regulären Matrix \overleftrightarrow{A} immer eine inverse Matrix $\overleftrightarrow{A}^{-1}$ existiert mit

$$\overleftrightarrow{A} \cdot \overleftrightarrow{A}^{-1} = \overleftrightarrow{A}^{-1} \cdot \overleftrightarrow{A} = \overleftrightarrow{E} \rightarrow \vec{x} = \overleftrightarrow{A}^{-1} \cdot \vec{b}$$

wobei \overleftrightarrow{E} die Einheitsmatrix ist.

Anmerkung zum Abschnitt 2.3.2:

Rücksubstitutionsmethode (Glg. (2.3.1)) liefert implizit die Inverse von \overleftrightarrow{A}

Weitere Möglichkeit zur Lösung des Gleichungssystems (Glg. (2.3)):

Berechnung der inversen Matrix durch Gauß-Elimination

Dazu Transformation: $A|B \rightarrow E|A^{-1}$ mit $n \times n$ Einheitsmatrix E

Ablauf der Matrizeninversion

1. Gauß-Elimination mit Spaltenpivotwahl
Elimination der Elemente unter- **und** oberhalb der Diagonalen
(Erzeugung der Diagonalmatrix $\overleftrightarrow{A} \rightarrow \overleftrightarrow{D}$)
2. Multiplikation der Pivotzeile mit $\frac{1}{a_{ii}}$ für $\overleftrightarrow{D} \rightarrow \overleftrightarrow{E}$
(Bedingung für Diagonalelemente)

2.3.5 Beispiel zur Matrizeninversion

Aufgabe:

Berechnung der Inversen von

$$\overleftrightarrow{A} = \begin{pmatrix} 3 & 5 & 1 \\ 2 & 4 & 5 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \mathbf{E}_1 \\ \mathbf{E}_2 \\ \mathbf{E}_3 \end{matrix}$$

unter Berücksichtigung der Benutzung der Notation von Abschnitt 2.3.2.

Genereller Ablauf:

1. Vertauschung von E_1 und E_3 :

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 3 & 5 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 5 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 4 & 5 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 5 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right) \begin{matrix} \mathbf{E}'_1 \\ \mathbf{E}'_2 \\ \mathbf{E}'_3 \end{matrix}$$

2. $E'_2 - (E'_1 \cdot 2)$:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -2 \\ 3 & 5 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

3. $E''_3 - (E''_1 \cdot 3)$:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -2 \\ 0 & -1 & -5 & 1 & 0 & -3 \end{array} \right)$$

4. $E_2''' \leftrightarrow (E_3''' \cdot (-1))$:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 5 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -2 \end{array} \right)$$

5. $E_1'''' - (E_2'''' \cdot 2)$:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -8 & 2 & 0 & -5 \\ 0 & 1 & 5 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -2 \end{array} \right)$$

6. $E_1^V + (E_3^V \cdot 8)$:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 2 & 8 & -21 \\ 0 & 1 & 5 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -2 \end{array} \right)$$

7. $E_2^{VI} - (E_3^{VI} \cdot 5)$:

$$\underbrace{\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 2 & 8 & -21 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & -5 & 13 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -2 \end{array} \right)}_{\text{E}} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{A}^{-1}}$$

Aber:

- Verfahren ist numerisch nicht sehr günstig
 - Skalierung wie bei der Gauß-Elimination: $O(n^3)$ Rechenoperationen
- Verfahren ist häufig numerisch nicht stabil

In Python: Lösungsroutine `scipy.linalg.inv()`

2.3.6 LR-Zerlegung

Wie schon erwähnt:

”Python” benutzt die LR-Zerlegung, anstatt der Gauß-Elimination um ein Gleichungssystem (Glg. (2.3)) zu lösen, da die LR-Zerlegung numerisch effizienter ist.

Anmerkung:

Im Englischen wird die LR-Zerlegung auch als LU-Decomposition bezeichnet.

Die grundlegende Idee der LR-Zerlegung basiert auf der **Matrixfaktorisierung**.



Matrixfaktorisierung in der LR-Zerlegung

Die quadratische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ wird in die linke untere Dreiecksmatrix L und in die rechte obere Dreiecksmatrix R zerlegt:

$$\overleftrightarrow{A} = \overleftrightarrow{L} \cdot \overleftrightarrow{R}$$

Nebenbedingung:

Definition der Diagonalelemente $\ell_{ii} = 1$ für $i = 1, 2, \dots, n$
(Zuordnung zur L-Matrix)

Durch Anwendung der Dreiecksform:

Lösung des Gleichungssystems (Glg. (2.3)) mittels

$$\overleftrightarrow{A} \cdot \vec{x} = \overleftrightarrow{L} \cdot \overleftrightarrow{R} \cdot \vec{x} = \vec{b}$$

durch Vorwärts (L)- und der Rückwärtssubstitution (R) entsprechend den Gleichungen (2.6) und (2.5)!

Beweis der Äquivalenz der LR-Zerlegung zum Ausgangssystem:

Das Gleichungssystem

$$\overleftrightarrow{A} \cdot \vec{x} = \vec{b} \tag{2.7}$$

kann mittels

$$\overleftrightarrow{A} = \overleftrightarrow{L} \cdot \overleftrightarrow{R} \tag{2.8}$$

mit

$$\overleftrightarrow{L} \cdot \vec{y} = \vec{b} \text{ und } \overleftrightarrow{R} \cdot \vec{x} = \vec{y}. \tag{2.9}$$

dargestellt werden. Einsetzen von Gleichung (2.8) in obige allgemeine Matrixgleichung (vgl. Glg. (2.3)) ergibt

$$\overleftrightarrow{A} \cdot \vec{x} = (\overleftrightarrow{L} \cdot \overleftrightarrow{R}) \cdot \vec{x} = \overleftrightarrow{L} \cdot (\overleftrightarrow{R} \cdot \vec{x}) = \overleftrightarrow{L} \cdot (\vec{y}) = \vec{b}$$

welches genau mit den obigen Forderungen übereinstimmt.

Lösung eines Gleichungssystems mittels LR-Zerlegung

1. Berechnung des Hilfsvektors \vec{y} durch Vorwärtssubstitution (Glg.(2.6)):

$$\overleftarrow{L} \cdot \vec{y} = \vec{b} \quad (2.10)$$

2. Berechnung der Lösung \vec{x} durch Rückwärtssubstitution (Glg. (2.5)):

$$\overleftarrow{R} \cdot \vec{x} = \vec{y} \quad (2.11)$$

Ein Beispiel für eine Matrixfaktorisierung mittels LR-Zerlegung:

$$\overleftarrow{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 6 \\ 2 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1 & 0 \\ 2/3 & 1/2 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 3 & 1 & 6 \\ 0 & 2/3 & -1 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{R}} \quad (2.12)$$

Die Bestimmung der einzelnen Koeffizienten in den Dreiecksmatrizen erfolgt nach:

$$\ell_{11} \cdot r_{11} = a_{11}$$

$$r_{1i} = \frac{a_{1i}}{\ell_{11}} \quad \text{und} \quad \ell_{i1} = \frac{a_{i1}}{r_{11}} \quad \text{für } i = 2, 3, \dots, n$$

$$\ell_{ii} \cdot r_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik} \cdot r_{ki} \quad \text{für } i = 2, 3, \dots, n-1$$

$$r_{ij} = \frac{1}{\ell_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik} \cdot r_{kj} \right) \quad \text{und} \quad \ell_{ji} = \frac{1}{r_{ii}} \left(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{jk} \cdot r_{ki} \right) \quad \text{für alle } j = i+1, i+2, \dots, n$$

$$\ell_{nn} \cdot r_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} \ell_{nk} \cdot r_{kn}$$

3 Literaturverzeichnis

- [1] BÖHM, Jan M. ; HOOCK, Claudia ; POPPER, Karl R.: *Karl Poppers kritischer Rationalismus heute: zur Aktualität kritisch-rationaler Wissenschaftstheorie*. Tübingen, Deutschland : Mohr Siebeck, 2002
- [2] FRENKEL, Daan ; SMIT, Berend: *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Orlando, FL, USA : Academic Press, Inc., 1996
- [3] VERLET, Loup: Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. In: *Phys. Rev.* 159 (1967), Nr. 1, S. 98