Prom. Nr. 2328

DIE ANWENDUNG DER METHODE DER KONJUGIERTEN GRADIENTEN UND IHRER MODIFIKATIONEN AUF DIE LOESUNG LINEARER RANDWERTPROBLEME

von der

EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung

DER WÜRDE EINES DOKTORS DER MATHEMATIK

genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von

URS HOCHSTRASSER

von Zürich und Gisikon (LU.)

Referent: Herr Prof. Dr. E. Stiefel

Korreferent: Herr Priv. Doz. Dr. H. Rutishauser

Druck: E. Truninger, Urania, Zürich 1954

EINLEITUNG

Eines der häufigsten Probleme, das in den verschiedensten Zusammenhängen sich dem angewandten Mathematiker stellt, ist die Auflösung von linearen Gleichungssystemen. Diese Aufgabe scheint einfach zu sein und wurde theoretisch schon vor langer Zeit gelöst. Die numerische Behandlung des Problems bietet jedoch, sobald die Zahl der Gleichungen gross ist, erhebliche Schwierigkeiten, obwohl die Aufgabe nur die Anwendung der elementarsten Rechenoperationen verlangt. Die Schwierigkeiten liegen eigentlich nur in der enormen Häufung von Operationen, die einen grossen Zeitaufwand verursacht und die Genauigkeit der Resultate erheblich beeinträchtigen kann.

Das älteste praktische Verfahren ist die Eliminationsmethode, die von Gauss in systematische Form gebracht wurde und deshalb meist als Gauss'scher Algorithmus bezeichnet wird. Seither sind noch einige andere Methoden entwickelt worden, jedoch hat sich dieser Algorithmus für die Auflösung kleinerer Gleichungssysteme als einfacher und rascher erwiesen. Einzig bei speziellen Gleichungssystemen, deren Koeffizientenmatrix ausserhalb der Hauptdiagonalen eine grosse Zahl von verschwindenden Elementen besitzt, haben sich die besonders in den letzten Jahren stark entwickelten iterativen Methoden (Relaxationsrechnung) überlegen gezeigt und deshalb eine breitere Anwendung gefunden.

Mit dem Bau von programmgesteuerten Rechenmaschinen mit grosser Rechengeschwindigkeit haben sich allerdings die Gesichtspunkte, unter denen die Lösungsmethoden beurteilt werden, verschoben, da die Zahl der Rechenoperationen nicht mehr eine solche Rolle spielt. Hingegen wirkt bei der Anwendung des Gauss'schen Algorithmus auf grössere Gleichungssysteme die Notwendigkeit des Mitführens einer grossen Zahl von Stellen zur Erzielung einer genügenden Genauigkeit sehr hinderlich. Dazu kommt als weiterer Nachteil dieser Methode beim Gebrauch von programmgesteuerten Rechenmaschinen, dass sie nicht in einfacher Weise zyklisch ist, d.h. die Lösungen werden nicht durch mehrmalige Anwendung desselben Rechenprogrammes gefunden. Die erwähnten Nachteile führten in letzter Zeit zur Entwicklung eines neuen Verfahrens, das sich speziell für die Verwendung auf programmgesteuerten Rechenmaschinen eignet. Dieses unter dem Namen "Methode der konjugierten Gradienten" bekannte Verfahren wurde gleichzeitig von Hestenes[1] und Mitarbeitern, sowie unabhängig von diesen, von Stiefel[2] gefunden und später in einer gemeinsamen Arbeit[3] ausführlich diskutiert. Die von C. Lanczos entwickelte Methode der "minimalisierten Iterationen"[4] ist damit nahe verwandt. Die Methode der konjugierten Gra-

1) M.R. Hestenes, Iterative Methods for Solving linear Equations, NAML Report 52-9 National Bureau of Standards, Los Angeles, 1951

2) E. Stiefel, Ueber einige Methoden der Relaxationsrechnung, ZAMP 3, 1952

3) M.R. Hestenes und E. Stiefel, Method of conjugate Gradients for solving linear Systems NBS J. Res. 49, 409-436, (Dez.1952)

4) C. Lanczos, Solution of Systems of Linear Equations by Minimized Iterations NBS J. Res. 49, 33-53 (Jul.1952)

dienten stellt in gewissem Sinne eine Verallgemeinerung der von G. Temple[5] diskutierten Methode des steilsten Abstieges dar. Im Gegensatz zur letzteren benützt sie jedoch in jedem Stadium die ganze Vorgeschichte der Relaxationsrechnung so, dass man theoretisch nur endlich viele Iterationen zur Bestimmung der exakten Lösung eines linearen Gleichungssystemes braucht. Zudem kommt man in jedem Schritt dem Lösungspunkt näher. In günstigen Fällen muss man deshalb nicht alle der theoretisch notwendigen Iterationen ausführen, um eine brauchbare Lösung zu erhalten. Andererseits kann man durch wenige zusätzliche Iterationen Lösungen mit grossen Rundungsfehlern verbessern. Zudem kann durch geeignete Vorbehandlung der Ausgangsdaten erreicht werden, dass die Methode stabil bezüglich der Ausbreitung von Rundungsfehlern ist. Die Methode der konjugierten Gradienten hat sich dank dieser Eigenschaften bei der Auflösung sehr umfangreicher linearer Gleichungssysteme bewährt und eignet sich besonders für die Verwendung mit programmgesteuerten Rechenmaschinen. Als Beispiel haben wir die von uns auf der programmgesteuerten Rechenmaschine des Institutes für angewandte Mathematik der E.T.H. durchgeführte Berechnung einer parallelogrammförmigen Scheibe in die vorliegende Arbeit aufgenommen.

Bei der numerischen Lösung linearer Randwertprobleme treten Differenzengleichungssysteme auf, deren Koeffizientenmatrix ausserhalb der Hauptdiagonalen zum grössten Teil Nullen aufweist. In einem solchen Fall stellt die Berechnung der beiden Parameter in jedem Schritt im Verhältnis zu den übrigen Operationen einen erheblichen Aufwand dar, da sie die Bildung von mindestens zwei Skalarprodukten erfordert. Deshalb haben wir eine Modifikation der Methode untersucht, bei der die Parameter festgehalten werden. Die Verwendung von zwei festen Parametern wurde schon von Frankel[6] in Betracht gezogen, eine ausführliche Diskussion und richtige Würdigung des Verfahrens fehlte jedoch bis jetzt. Bei dem modifizierten Verfahren gehen natürlich viele Eigenschaften der Methode der konjugierten Gradienten verloren. Vor allem erhalten wir nicht mehr in endlich vielen Schritten die exakte Lösung. Praktisch ist dies von keiner grossen Bedeutung. Es genügt, wenn das Verfahren eine gute Konvergenz gegen die exakte Lösung aufweist, da man die Lösung in der angewandten Mathematik immer nur auf eine beschränkte Zahl von Stellen genau kennen muss.

Das modifizierte Verfahren, das wir "Frankel'sches Verfahren" nennen wollen, verlangt eine ungefähre Kenntnis des grössten und kleinsten Eigenwertes der Gleichungsmatrix. Wenn diese nur mit grossem Zeitaufwand bestimmbar sind, wird man mit Vorteil zuerst die Methode der konjugierten Gradienten anwenden und nach einigen Iterationen mit Hilfe der so gesammelten Informationen auf das Frankel'sche Verfahren übergehen. Dieses Vorgehen wird im § 6 an einem Beispiel näher erläutert werden. Der Uebergang ist auch bei der Verwendung von

5) G. Temple, The general Theory of Relaxation Methods applied to Linear Systems, Proc. Roy.Soc. ser A, 169 476-500 (1939)

6) S.P. Frankel, Convergence Rates of Iterative Treatments of Partial Differential Equations, Math. Tables and other Aids f.Comput. 4,30 (1950) Frankel bezeichnet in dieser Arbeit diese Methode als "Second order Richardson's method"

programmgesteuerten Rechenmaschinen leicht zu bewerkstelligen, da das Rechenprogramm nur kleiner Abänderungen bedarf.

Eine spezielle Eigenheit des Frankel'schen Verfahrens besteht im Auftreten von Schwingungen, die sich unter Umständen zur Verbesserung der Konvergenz des Verfahrens verwenden lassen. Allerdings wird man bei der praktischen Anwendung oft nicht genügend Informationen besitzen, um ohne grossen Rechenaufwand den Schwingungscharakter ausnützen zu können. Ein weiterer Vorteil dieses Verfahrens gegenüber der Methode der konjugierten Gradienten besteht vom rechentechnischen Standpunkt aus in der Möglichkeit, die Rechnung so anzulegen, dass man neben der Matrix D des Gleichungssystemes zu keiner Zeit mehr als zwei Vektoren gespeichert halten muss. Im Hinblick auf die bei vielen Maschinen beschränkte Speicherkapazität ist dies vielleicht ein nicht unwesentlicher Punkt. Gegenüber dem Gesamtschrittverfahren[7], das als Spezialfall des Frankel'schen Verfahrens betrachtet werden kann, besitzt das Frankel'sche Verfahren den Vorteil, rascher zu konvergieren. Die Konvergenz ist speziell bei schlecht konditionierten Matrizen D, d.h. falls die Eigenwerte von D weit voneinander liegen, wesentlich besser. Deshalb eignet sich das Frankel'sche Verfahren auch für umfangreiche Differenzengleichungssysteme, die bei der Wahl eines Differenzennetzes mit sehr kleiner Maschenweite entstehen und die wegen der Proportionalität des kleinsten Eigenwertes zur Maschenweite eine schlecht konditionierte Koeffizientenmatrix besitzen.

Am nützlichsten wird sich wahrscheinlich das Frankel'sche Verfahren in Verbindung mit der Methode der konjugierten Gradienten zur Abkürzung der Rechnung erweisen.

7) für eine Diskussion dieses Verfahrens siehe:
L.F. Richardson, The Approximate Arithmetical Solution by finite Differences of physical Problems, Phil. Trans. Roy. Soc. ser. A 210 307-357 (1911)