Projekt 13: Lösung nichtlinearer partieller Differentialgleichung

Ziel des Projektes ist, das Newtonverfahren für ein großes nichtlineares Gleichungssystem einzusetzen. Es soll gesehen werden, wie durch geeignete Abbruchkriterien und Techniken zum Erzeugen von Startwerten die Anzahl Newtonschritte (und damit die Rechenzeit) gesenkt werden kann.

Sei $\Omega = [0,1]^2$ und $\Gamma = \partial\Omega$. Wir betrachten die Gleichung

$$\begin{aligned} -\Delta u + u^3 &= f \qquad \text{in } \Omega && (1)\\ u &= 0 \qquad \text{auf } \Gamma && (2) \end{aligned}$$

Dabei ist $\Delta u := (\partial_x^2 + \partial_y^2)u$.
Zur Approximation der Lösung u verwenden Sie das Verfahren der finiten Differenzen. Hierzu werden Ableitungen durch Differenzenquotienten zur Schrittweite h ersetzt. Z.B. kann die erste Ableitung $g'(x)$ approximiert werden durch

$$g'(x) \approx \frac{g(x+h)-g(x)}{h} \qquad \text{oder} \qquad g'(x) \approx \frac{g(x)-g(x-h)}{h} \tag{3}$$

1. Überlegen Sie sich, wie Sie mit Differenzenquotienten die zweite Ableitung $g''(x)$ approximieren können. Entwicklen Sie basierend auf Ihrer Approximation der zweiten Ableitung eine Approximation $\Delta_h u(x,y)$ für $\Delta u(x,y) = \partial_x^2 u(x,y) + \partial_y^2 u(x,y)$, die nur die Werte $u(x,y)$, $u(x \pm h, y \pm h)$ beinhaltet.

2. Sei $h = \frac{1}{2^p}$ für $p \in \mathbb{N}$ und $n = 1/h - 1$. Die Punkte $\{(ih, 1-jh) \,|\, 0 \le i,j \le n+1\}$ liegen in $[0,1]^2$. Es sollen Approximationen an die Werte $u(ih, 1-jh)$ gefunden werden. Offensichtlich liefert (2) bereits die Werte für die Fälle $i \in \{0, n+1\}$ oder $j \in \{0, n+1\}$. Es müssen also nur noch Approximationen für die Fälle $(i,j) \in \{1,\dots,n\}$ erzeugt werden; die Gesamtzahl der zu bestimmenden Werte ist also $N = n^2$.

Zur Vermeidung von "Doppelindizes" führt man mit $\nu : \{(i,j) \,|\, i = 1,\dots,n\} \to \{1,\dots,N\}$ eine geeignete Nummerierung der Punkte $\{(ih, 1-jh) \,|\, 1 \le i,j \le n\}$ ein. Die Lösung u von (1) im Punkte $(ih, 1-jh)$ wird approximiert durch $\bar{u}_{\nu(i,j)} \approx u(ih, 1-jh)$. Der Vektor $\bar{u} \in \mathbb{R}^N$ ergibt sich als Lösung der diskreten Gleichung

$$\begin{aligned} &F(\bar{u}) = 0, && (4)\\ &F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N, \bar{u} \mapsto L_h \bar{u} + \bar{u^3} - \bar{f}, && (5) \end{aligned}$$

wobei L_h die Matrix ist, die sich durch Anwendung von Δ_h an jedem Punkt ergibt, und $\bar{u^3}_{\nu(i,j)} := (\bar{u}_{\nu(i,j)})^3$ die komponentenweise Erhebung zur 3. Potenz darstellt.

a) $(L_h\bar{u})_{\nu(i,j)}$ stellt Ihre Approximation von Δu an der Stelle $(ih, 1-jh)$ dar. Geben Sie $(L_h\bar{u})_{\nu(i,j)}$ für $i,j \in \{1,\dots,n\}$ an. Beachten Sie, daß die Fälle $i \in \{1,n\}$ und $j \in \{1,n\}$ besonders sind.

b) Die konkrete Darstellung von L_h hängt von der gewählten Nummerierung der Freiheitsgrade ab. Bei der *lexikographischen Nummerierung* werden die Freiheitsgrade von links nach rechts und von oben nach unten durchnummeriert, siehe Fig. 1. Geben Sie die Gestalt von L_h mit lexikographischer Nummerierung an. Wieviele Einträge sind in Abhängigkeit von N ungleich null? Welche Bandbreite hat die Matrix?

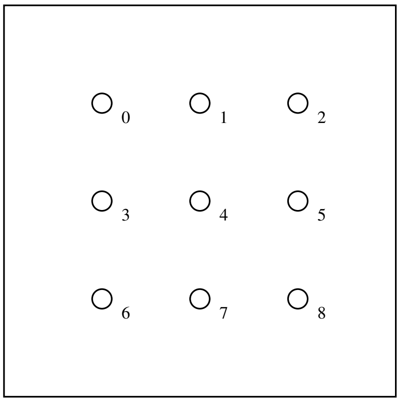

Abbildung 1: Beispielgitter für $h = 1/4$ mit lexikographischer Nummerierung

c) Formulieren Sie das Newtonverfahren für (4).

d) Berechnen Sie die Ableitung $DF(\bar{u}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ von F.

3. Es ist bekannt, daß die Matrix L_h (für jedes $h > 0$) symmetrisch positiv definit ist. Zeigen Sie, daß das nichtlineare Gleichungsssystem (4) eine Lösung hat. *Hinweis:* Betrachten Sie die Funktion

$$\mathcal{F} : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}, \qquad \mathcal{F}(\bar{u}) := \frac{1}{2}\bar{u}^\top L_h \bar{u} - \bar{f}^\top \bar{u} + \frac{1}{4}\sum_{i,j} \bar{u}^4_{\nu(i,j)},$$

überlegen Sie sich, daß $\mathcal{F}$ ein Minimum hat, und berechnen Sie die Ableitung $D\mathcal{F}$.

4. Schreiben Sie ein C/C++-Programm, das die diskrete Gleichung (4) mit Hilfe des Newtonverfahrens löst. Ein Newtonschritt $\bar{u}^{(n+1)} := \bar{u}^{(n)} - (DF(\bar{u}))^{-1}F(\bar{u})$ besteht aus:

1. Berechne $F(\bar{u}^{(n)})$ und $DF(\bar{u}^{(n)})$,
2. löse das LGS $DF(\bar{u}^{(n)})\bar{\delta} = -F(\bar{u}^{(n)})$
3. $\bar{u}^{(n+1)} := \bar{u}^{(n)} + \bar{\delta}$.

Die Matrizen L_h und $DF(x)$ sind symmetrische (und auch positiv definite) schwachbesetzte Matrizen. Verwenden Sie daher die in Ihrer Gruppe erarbeitete Lösung zu Projekt 6, um die Lösung des LGS $DF(\bar{u}^{(n)})\bar{\delta} = -F(\bar{u}^{(n)})$ zu realisieren.

Dokumentieren Sie Ihr Programm. Zum Testen können Sie Aufg. 5 verwenden.

5. Die Funktion $u(x, y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$ löst (1) für $f(x, y) = 2\pi^2 \sin(\pi x)\sin(\pi y) + \sin^3(\pi x)\sin^3(\pi y)$.

Der Fehler der diskreten Lösung $\bar{u}_h$ ist definiert als

$$e(\bar{u}_h) := \max_{i,j=1,\dots,n} |u(ih, 1 - jh) - (\bar{u}_h)_{\nu(i,j)}| \tag{6}$$

a) Erweitern Sie Ihr Programm um die Berechnung des Fehlers bei Eingabe der kontinuierlichen Lösung.

b) Machen Sie eine Reihe von Experimenten für $h = 2^{-4}, 2^{-5}, \dots$ und notieren Sie Fehler. Vergewissern Sie sich, daß der Fehler des Newtonverfahrens nicht den Diskretisierungsfehler des Finite Differenzen Verfahrens dominiert (d.h. brechen Sie das Newtonverfahren erst ab, wenn die Abbruchbedingung $\|\bar{u}^{(n+1)} - \bar{u}^{(n)}\|_2 \le \varepsilon$ für $\varepsilon = 10^{-10}$ erfüllt ist). Welches Fehlerverhalten beobachten Sie?

6. Das Konvergenzverhalten des Newtonverfahrens hängt von der Wahl des Startwertes ab. Um das zu sehen, betrachten Sie den Fall $h = 1/256$ für das Problem aus Aufg. 5. Plotten Sie (semilogarithmisch) den Fehler $\|\bar{u}^{(n+1)} - \bar{u}^{(n)}\|_2$ gegen den Iterationsindex n, welcher von 1 bis 15 läuft. Als Startvektoren verwenden Sie folgende 3 Wahlen:

1. den Nullvektor,
2. einen Vektor mit Zufallszahlen zwischen 0 und 10,
3. einen Vektor mit Zufallszahlen zwischen 0 und 100

Vergleichen Sie.

7. Zum Beenden der Newtoniteration sind verschiedene Bedingungen denkbar. Sei $\varepsilon > 0$.

1. Bedingung 1: $\|\bar{u}^{(n+1)} - \bar{u}^{(n)}\|_2 < \varepsilon$
2. Bedingung 2: $\|F(\bar{u}^{(n+1)})\|_2 < \varepsilon$
3. Bedingung 3: $\|DF(\bar{u}^{(n)})^{-1}F(\bar{u}^{(n+1)})\|_2 < \varepsilon$

a) Erweitern Sie Ihr Programm um diese drei Bedingungen.

b) Geben Sie für dasselbe Problem die Werte der Abbruchbedingungen für jeden Iterationsschritt aus uns plotten Sie diese (als Funktion über dem Iterationsindex n).

c) Diskutieren Sie die Bedingungen in Hinsicht auf ihrer Komplexität und die Auswirkung auf die Iterationszahl des Newtonverfahrens.

8. Zur Erzeugung guter Startwerte kann hierarchisch vorgegangen werden. Sei h die Schrittweite des Gitters, auf dem die Lösung ausgerechnet werden soll. Als Startwert für das Problem zu h verwendet man die Interpolation der Lösung vom Problem zu $2h$. Den Startwert für dieses Problem wiederum wird aus der Lösung zu $4h$ erzeugt, usw.

a) Schreiben Sie eine Funktion, die aus den Knotenwerten auf einem Gitter der Schrittweite h die Knotenwerte für ein Gitter der Schrittweite $h/2$ linear interpoliert. Nutzen Sie dabei aus, daß die Lösung auf Γ gleich Null ist. Fig. 2 illustriert das Vorgehen.

b) Implementieren Sie die Varianten mit rekursiver Startwerterzeugung. Das gröbste Gitter sei dabei für $h = 1/4$; der Startvektor des Newtonverfahrens auf diesem groben Gitter

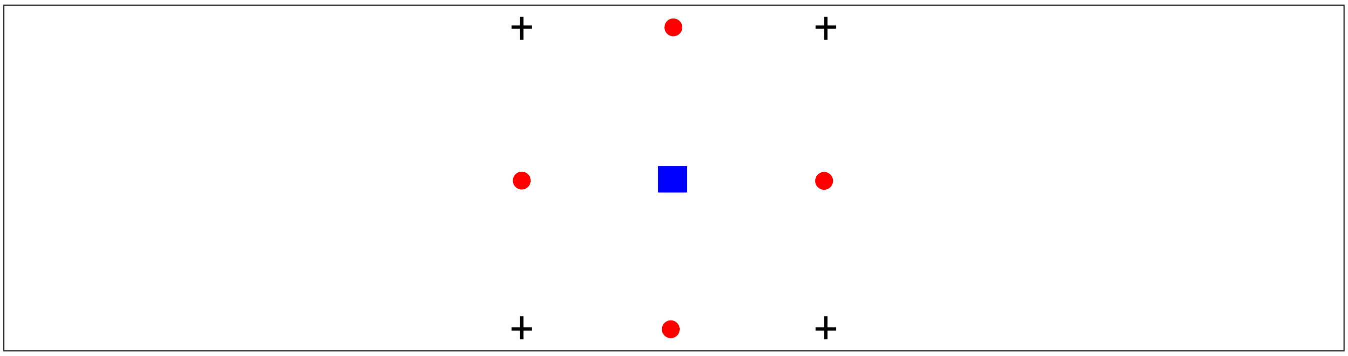

Abbildung 2: Idee der linearen Interpolation: Die Punkte (+) stehen für Knoten des Gitters mit Gitterweite h, die Punkte (•) und (■) für Knoten des Gitters der Gitterweite $h/2$, die hinzukommen. Der Wert an der hinzugekommenen Stelle (•) ergibt sich als der Mittelwert der Werte in den beiden nächstgelegenen Knoten vom Typ (+); der Wert an der hinzugekommenen Stelle (■) als der Mittelwert der Werte in den 4 nächstgelegenen Knoten vom Typ (+).

soll jede der 3 Wahlen aus Aufg. 6 möglich sein. Wählen Sie eines der beiden Abbruchkriterien “Bedingung 1” oder “Bedingung 3” mit $\varepsilon = 10^{-10}$ als Abbruchkriterium auf jedem der auftretenden Gitter.

c) Lösen Sie das Problem aus Aufg. 6 mit der hierarchischen Konstruktion des Startvektors. Welche Auswirkung hat die hierarchische Startwerterzeugung auf die Gesamtlaufzeit und die Anzahl der Newtonschritte auf dem feinsten Gitter? Auf dem gröbsten Gitter können Sie den Startvektor wie in Aufg. 6 wählen. Beobachten Sie einen signifikanten Einfluß der Wahl der Startvektors auf dem gröbsten Gitter auf die Gesamtrechenzeit?

9. Erweitern Sie Ihr Programm um Zeitmessungen der “atomaren” Bestandteile eines Iterationsschritts:

1. Funktionsauswertung: $y = F(\bar{u}^{(n)})$
2. Berechnung der Ableitung und ihrer Cholskyzerlegung: $LL^T = DF(\bar{u}^{(n)})$
3. Anwendung der Inversen der Ableitung: $z = (LL^T)^{-1}y$
4. Auswerten der Abbruchbedingung.

Machen Sie nochmals die Experimente aus Aufgabe 5 und geben Sie dabei die gemessenen Zeiten aus.

a) Wie verändern sich die Zeiten von einem Iterationsschritt zum nächsten?

b) Wie verändern sich die Zeiten beim Übergang von $h \to h/2$?

c) Wie verteilt sich der Gesamtaufwand auf die atomaren Bestandteile?

10. Die Berechnung der Inversen der Ableitung in jedem Newtonstritt ist sehr zeitaufwendig. Beim vereinfachten Newtonverfahren macht man die Annahme, daß sich die Ableitung nur langsam verändert und verzichtet darauf, sie in jeden Schritt neu zu invertieren.

Erweitern Sie Ihr Programm durch einen Parameter `recompute_DFInv_after`, der steuert, nach wieviel Schritten die Inverse der Ableitung neu berechnet wird (`recompute_DFINV_after=1` ergibt das Standardnewtonverfahren).

Vergleichen Sie das Konvergenzverhalten des Standardnewtonverfahrens mit dem des vereinfachten Newtonverfahrens mit `recompute_DFInv_after=10` für $h = 1/256$ und den Startwerten aus Aufgabe 6.

11. Sei $G : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ eine glatte Funktion. Sei $B \in \mathbb{R}^{N\times N}$ regulär. Setze $\widehat{G}(x) := BG(x)$. Dann haben G und $\widehat{G}$ dieselben Nullstellen. Zeigen Sie: Das Newtonverfahren für G und für $\widehat{G}$ liefert dieselben Iterierten, wenn mit dem gleichen Startwert x_0 begonnen wird.