Projekt 7: 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

$$-\Delta u + u^3 = f(x) \qquad \text{für } x \in \Omega \tag{1}$$
$$u = 0 \qquad \text{auf } \Gamma \tag{2}$$

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 $\{(ih, 1-jh) \,|\, 0 \leq i,j \leq n+1\}$ 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 $(i,j) \in \{1,\ldots,n\}$ erzeugt werden; die Gesamtzahl der zu bestimmenden Werte ist also $N = n^2$.

Zur Vermeidung von "Doppelindizes" führt man mit $\nu : \{(i,j) \,|\, i = 1,\ldots,n\} \to \{1,\ldots,N\}$ eine geeignete Nummerierung der Punkte $\{(ih, 1-jh) \,|\, 1 \leq i,j \leq n\}$ 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

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

wobei L_h die Matrix ist, die sich durch Anwendung von $-\Delta_h$ an jedem Punkt ergibt, und $\bar{u^3}_{\nu(i,j)} := (\bar{u}_{\nu(i,j)})^3$ die komponentenweise Erhebung zur 3. Potenz darstellt. Analog ist $\bar{f}$ der Vektor mit Einträge $\bar{f}_{\nu(i,j)} = f(ih, 1-jh)$.

a) $(L_h\bar{u})_{\nu(i,j)}$ stellt Ihre Approximation von $-\Delta u$ an der Stelle $(ih, 1-jh)$ dar. Geben Sie $(L_h\bar{u})_{\nu(i,j)}$ für $i,j \in \{1,\ldots,n\}$ 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?

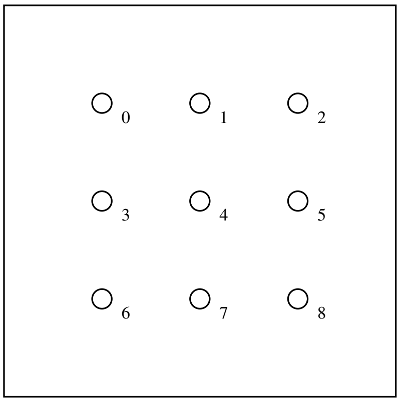

Abbildung 1: Beispielgitter für $h = 1/4$ mit lexikographischer Nummerierung

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 MATLABprogramm[1] das die diskrete Gleichung (4) mit Hilfe des Newtonverfahrens löst. Stellen Sie sicher, daß Sie die Matrix L_h als `sparse`-Matrix aufstellen, z.B. durch $L = \texttt{sparse}(I, J, A)$, wobei I, J, A Vektoren sind, die die i, j, und den Wert L_{ij} enthalten.

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. $\bar{u}^{(n+1)} := \bar{u}^{(n)} + \bar{\delta}$.

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

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

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

[1] Stellen Sie sicher, daß Sie Version ≥ 7.3 verwenden—Version 7.2 hat leider bugs bei der sparse arithmetic. Sie können das Programm auch in C/C++ schreiben—ein direkter Löser zum Lösen von LGS kann Ihnen dann zur Verfügung gestellt werden.

b) Machen Sie eine Reihe von Experimenten für $h = 2^{-4}, 2^{-5}, \ldots$ und plotten Sie die Fehler doppelt logarithmisch gegen h. 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 $\|\bar{u}^{(n+1)} - \bar{u}^{(n)}\|_\infty \leq \varepsilon$ 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 $\|\bar{u}^{(n+1)} - \bar{u}^{(n)}\|_\infty$ 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: $\|\bar{u}^{(n+1)} - \bar{u}^{(n)}\|_\infty < \varepsilon$
2. Bedingung 2: $\|F(\bar{u}^{(n+1)})\|_\infty < \varepsilon$
3. Bedingung 3: $\|DF(\bar{u}^{(n)})^{-1} F(\bar{u}^{(n+1)})\|_\infty < \varepsilon$

a) Erweitern Sie Ihr Programm um diese drei Bedingungen.

b) Plotten Sie (semilogarithmisch) für dasselbe Problem (z.B. $h = 1/128$ oder $h = 1/256$) die Werte der Abbruchbedingungen als Funktion des Iterationsindexes n.

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

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.

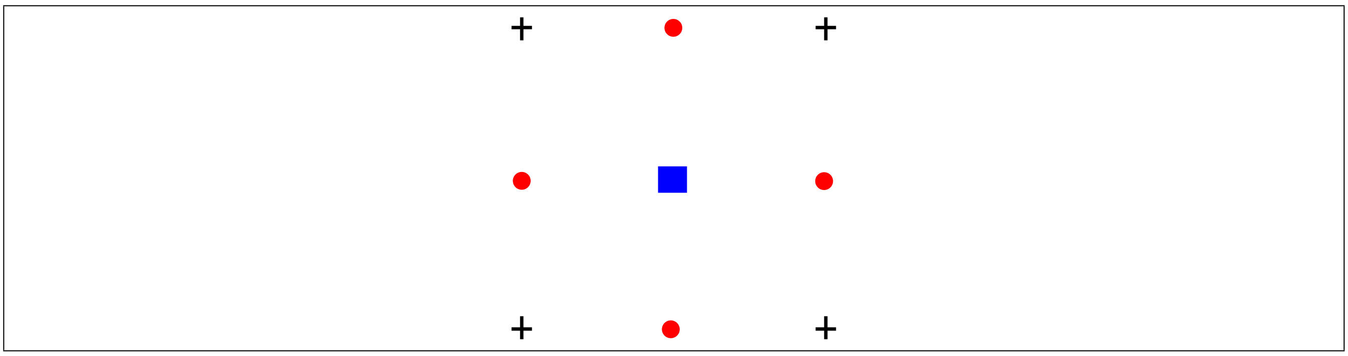

Abbildung 2: Idee der linearen Interpolation: Die Punkte (+) stehen für Knoten des Gitters mit Gitterweite h, die Punkte (●) und (■) für Knoten des Gitters der Gitterweite $h/2$, die hinzukommen. Der Wert an der hinzugekommenen Stelle (●) ergibt sich als der Mittelwert der Werte in den beiden nächstgelegenen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

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 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 für $h = 1/256$ oder $h = 1/512$ 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 wesentlichen Bestandteile eines Iterationsschritts:

1. Funktionsauswertung: $y = F(\bar{u}^{(n)})$
2. Lösen des LGS in jedem Newtonschritt

Bestimmen Sie die mittlere Zeit für diese beiden Teile Ihres Newtonverfahrens. Plotten Sie (doppelt logarithmisch) diese mittleren Zeiten gegen die Problemgröße N ($h = 2^{-i}$, $i = 2, \ldots, 10$). Fitten Sie die letzten 5 Werte der Zeiten an ein Gesetz der Form $t = CN^{\alpha}$. Geben Sie jeweils α an. Welche Kosten dominieren das Newtonverfahren? Erklären Sie.

10. 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.