MATHEMATISCHES INSTITUT
DER UNIVERSITÄT ZU KÖLN

Prof. Dr. A. Klawonn
J. Knepper, M. Sc.
J. Weber, M. Sc.

Wintersemester 2018/2019

11. Oktober 2018

1. Übung zu Wissenschaftliches Rechnen I

Hinweis 1: Schreiben Sie bitte auf **jedes Blatt ihren Namen**. Auf die erste Seite Ihrer Übung schreiben Sie bitte zusätzlich Ihre Matrikelnummer und die Nummer der Ihnen zugewiesenen Übungsgruppe.

Hinweis 2: Dieses Blatt beinhaltet zwei Programmieraufgaben. Für die Zulassung zur Klausur müssen **alle** Programmieraufgaben erfolgreich bearbeitet werden. Das heißt nicht, dass das Programm fehlerfrei laufen muss. Es muss jedoch in jedem Fall eine Abgabe erfolgen und es sollte eine ernsthafte Auseinandersetzung mit der Aufgabe zu erkennen sein. Ihre Abgabe wird bepunktet, jedoch nur, um Ihnen ein Feedback zu geben (Diese Punkte werden nicht zur Klausurzulassung benötigt).

Hinweis 3: Schreiben Sie Ihr Programm in Matlab und schicken Sie Ihren Quellcode bitte an **beide** Ihrer Übungsleiter*innen.

Aufgabe 1: $(3 + 3 + 4 + 4 = 14$ Punkte)
Auf dem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2, 3$, sei die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} -\Delta u &= g && \text{in } \Omega \\ u &= g_D && \text{auf } \partial\Omega_D \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} &= g_N && \text{auf } \partial\Omega_N \end{aligned} \tag{1}$$

mit $\partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N = \partial\Omega$ und $\partial\Omega_D \cap \partial\Omega_N = \emptyset$ gegeben. Aus der schwachen Formulierung dieser Differentialgleichung resultiere durch Diskretisierung das System $Ku = f$.

Sei R die Menge aller Freiheitsgrade auf $\partial\Omega$ und I die Menge aller Freiheitsgrade von $\Omega \setminus \partial\Omega$. Wir definieren die Teilmatrizen K_{RR} als K eingeschränkt auf R und K_{II} als K eingeschränkt auf I. Analog sei dies für die Vektoren u und f definiert. Die Nebendiagonalmatrizen K_{IR} und K_{RI} ergeben sich nach dem Erstellen von K_{RR} und K_{II} bei entsprechender Nummerierung durch

$$K = \begin{pmatrix} K_{II} & K_{IR} \\ K_{RI} & K_{RR} \end{pmatrix}.$$

Bemerkungen:

- Beachten Sie, dass in obiger Notation die Randwerte in K noch nicht eliminiert wurden.
- In der Vorlesung wurde eine andere Partitionierung der Freiheitsgrade vorgenommen; hier betrachten wir jedoch nur ein Teilgebiet, d.h. es gibt insb. kein Interface.

$\partial\Omega_D$ habe zunächst positives Oberflächenmaß.

i) Betrachten Sie die Gleichung

$$K_{II}u_I + K_{IR}u_R = f_I. \tag{2}$$

Geben Sie das Randwertproblem an, sodass die Lösung der zugehörigen diskretisierten schwachen Formulierung der Lösung von (2) entspricht.

ii) Angenommen es existiert eine Lösung u von $Ku = f$. Bestimmen Sie eine Matrix S, sodass die Gleichheit

$$Su_R = f_R - K_{RI}K_{II}^{-1}f_I \tag{3}$$

gilt. Zeigen Sie dafür zunächst, dass K_{II} invertierbar ist. Existiert immer solch eine Lösung u?

Sei nun $\partial\Omega_D = \partial\Omega$.

iii) Sei u die Galerkinlösung der schwachen Formulierung zu (1). Folgende Systeme zur Bestimmung von u sind äquivalent:

$$\begin{pmatrix} K_{II} & K_{IR} \\ 0 & I_R \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_I \\ u_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_I \\ g_D \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} K_{II} & 0 \\ 0 & I_R \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_I \\ u_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_I - K_{IR}g_D \\ g_D \end{pmatrix}, \tag{5}$$

wobei I_R die Einheitsmatrix ist. Welchen Vorteil hat (5) gegenüber (4) im Bezug auf die Verwendung eines Lösers?

Sei nun $\partial\Omega_D = \emptyset$.

iv) Zeigen Sie, dass

$$K = \begin{pmatrix} K_{II} & K_{IR} \\ K_{RI} & K_{RR} \end{pmatrix}$$

einen nichttrivialen Kern hat.

Programmieraufgabe 1 (PCG): (8 Punkte)
Implementieren Sie das vorkonditionierte, konjugierte Gradientenverfahren für eine symmetrisch, positiv definite Matrix K und rechter Seite b sowie einem symmetrisch, positiv definitem Vorkonditionierer M^{-1}.

Initialisierung: Sei ein Startvektor x_0 gegeben (z.B. $x_0 = 0$).

$$\begin{aligned} r_0 &:= b - Ax_0 \\ z_0 &:= M^{-1}r_0 \\ p_0 &:= z_0 \end{aligned}$$

Iteration über k:

$$\begin{aligned}
\alpha_k &:= \frac{r_k^T z_k}{p_k^T A p_k} \\
x_{k+1} &:= x_k + \alpha_k p_k \\
r_{k+1} &:= r_k - \alpha_k A p_k \\
z_{k+1} &:= M^{-1} r_{k+1} \\
\beta_k &:= \frac{z_{k+1}^T r_{k+1}}{z_k^T r_k} \\
p_{k+1} &:= z_{k+1} + \beta_k p_k
\end{aligned}$$

Konvergenz: Iterieren Sie bis das relative Residuum kleiner als eine benutzerdefinierte Toleranz ist.

Testen Sie Ihre Implementierung anhand der Diskretisierung mit linearen Dreieckselementen der Gleichung $-\Delta u = 1$ auf dem Quadrat $\Omega := (0,1)^2$ mit $u|_{\partial\Omega} = 0$. Wählen Sie dafür eine strukturierte Dreieckszerlegung mit 4 verschiedenen Feinheiten. Für den Vorkonditionierer nutzen Sie $M^{-1} = I$ und $M^{-1} = L^{-T}L^{-1}$, wobei L mit Hilfe einer unvollständigen Choleskyzerlegung bestimmt wird:

```
L = ichol(K);
```

Wählen Sie für das Konvergenzkriterium die Toleranz 10^{-8}. Geben Sie die benötigte Anzahl an Iterationen für die 8 Varianten an.

Hinweis: In Ihrer Implementierung sollten Sie `L'\(L\x)` für einen Vektor x schreiben und nicht `inv(L')*inv(L)*x`, um den Rechenaufwand deutlich zu verringern. Übergeben Sie den Vorkonditionierer an Ihre PCG-Implementierung mit Hilfe eines *function handles*:

```
invM = @(x) L'\(L\x);
```

Programmieraufgabe 2 (Eigenwertschätzer PCG - Lanczos-Prozess): (6 Punkte)
Zum Modellproblem aus der 1. Programmieraufgabe mit Systemmatrix K seien die Koeffizienten $\alpha_0, \ldots, \alpha_k$ und $\beta_0, \ldots, \beta_{k-1}$ des vorkonditionierten CG-Verfahrens gegeben. Stellen Sie die Matrix

$$T_k := \begin{pmatrix}
\frac{1}{\alpha_0} & \frac{\sqrt{\beta_0}}{\alpha_0} & & & \\
\frac{\sqrt{\beta_0}}{\alpha_0} & \frac{1}{\alpha_1}+\frac{\beta_0}{\alpha_0} & \ddots & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & \ddots & \ddots & \frac{\sqrt{\beta_{k-1}}}{\alpha_{k-1}} \\
& & & \frac{\sqrt{\beta_{k-1}}}{\alpha_{k-1}} & \frac{1}{\alpha_k}+\frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}}
\end{pmatrix}$$

auf und berechnen Sie $\kappa_2(T_k) := \frac{\lambda_{max}(T_k)}{\lambda_{min}(T_k)}$. Dann ist $\kappa_2(T_k)$ eine Approximation an $\kappa_2(K)$, welche mit wachsendem k immer besser wird; siehe auch Yousef Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*, 2003, Gleichung (6.103).

Vergleichen Sie in Matlab die exakte Konditionszahl der (vorkonditionierten) Matrix mit der Konditionszahlschätzung, welche im letzten Schritt des PCG-Verfahrens (jeweils für

$M^{-1} = I$ und für die unvollständige Choleskyzerlegung als Vorkonditionierer) bestimmt wird anhand derselben Gitterfeinheiten wie in der 1. Programmieraufgabe.

Achtung: Hier definieren wir

$$\kappa_2(M^{-1}K) := \frac{\lambda_{max}(M^{-1}K)}{\lambda_{min}(M^{-1}K)},$$

obwohl $M^{-1}K$ nicht symmetrisch positiv definit ist; siehe Übung.

Allgemeine Hinweise zum Programmierteil

- Der Code **muss sinnvoll kommentiert** sein. Ein nicht kommentiertes Programm gilt als nicht erfolgreich bearbeitet.
- Das Programm muss ausführbar sein, ohne Änderungen am Code vornehmen zu müssen (d.h. ein Klick auf „Ausführen“ muss ausreichen). Schreiben Sie daher ein oder mehrere Skripte für die Teilaufgabe(n). Benennen Sie das Skript / die Skripte sinnvoll (z.B. `aufg1c.m`).
- Schreiben Sie bitte Funktionen in eigene Dateien und nicht in Skriptdateien (*Ausnahme:* anonyme Funktionen der Art `f = @(x) x.^2;`).
- Enthält ihr Code mehrere Funktionen, so ist jede Funktion in eine eigene Datei zu schreiben. *Ausnahme:* Die Funktion wird ausschließlich von anderen Funktionen derselben Datei aufgerufen. In diesem Fall steht an oberster Stelle der Funktionsdatei die Funktion, welche von außerhalb (z.B. von einem Skript) aufgerufen wird.

Abgabe des Programmierteils

- Packen Sie Ihre Dateien in ein Archiv (Formate: .zip, oder .tar.gz) mit einem Dateinamen der Art:

  `ueb01_nachname_vorname.zip`

- Den Quellcode schicken Sie bitte an die E-Mail-Adresse Ihrer Übungsgruppenleiter / Übungsgruppenleiterinnen, mit einem Betreff der Art:

  `Betreff: Uebung1, Nachname, Vorname`

- Geben Sie bitte immer eine **ausgedruckte Version** Ihrer Programmcodes mit den schriftlichen Aufgaben ab ($\rightarrow$ Kasten), sofern dies in der Aufgabenstellung nicht eindeutig anders vermerkt wurde.
- Sofern es zur sinnvollen Lösung der Aufgabenstellung nötig ist, drucken Sie bitte auch die Ausgabe von Matlab aus. Dies sollte nicht zwei DIN-A4-Seiten überschreiten. Gleiches gilt für Grafiken.

Abgabe: Bis Donnerstag, 18. Oktober 2018 , 12:00 Uhr, im entsprechenden Kasten in Raum 3.01 des Mathematischen Instituts.