

Pseudoinverse für zell-basierte finiten Elemente Operatoren

Bachelorarbeit

eingereicht von

Enes Witwit

betreut von

Prof. Dr. Kanschat

Fakultät für Mathematik und Informatik

Universität Heidelberg

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit selbständig verfasst habe. Ich versichere, dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe, und dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist.

1. Mai 2017

Heidelberg

Unterschrift

Zusammenfassung

Inhaltsverzeichnis

| | |
|------------------------------------------------------------------------|------------|
| Notation | V |
| Abbildungsverzeichnis | VI |
| Tabellenverzeichnis | VII |
| 1 Einführung | 1 |
| 2 Theorie | 2 |
| 2.1 Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen | 3 |
| 2.1.1 Schwache Lösungen | 3 |
| 2.1.2 Galerkin Verfahren | 6 |
| 2.1.3 Methode der finiten Elemente | 8 |
| 2.1.4 Diskontinuierliche Galerkin-Methode | 10 |
| 2.2 Tensor Dekomposition | 11 |
| 2.2.1 Einführung in die Tensor Architektur | 11 |
| 2.2.2 Singulärwertzerlegung höherer Ordnung | 13 |
| 3 Pseudoinverse für zell-basierte finiten Elemente Operatoren | 15 |
| 3.1 Summenfaktorisierung | 15 |
| 3.2 Singulärwertzerlegung höherer Ordnung | 21 |
| 4 Numerische Untersuchungen | 21 |
| 5 Resultate | 21 |

Notation

Abbildungsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|---|---------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1 | Ansatzfunktionen φ_i | 9 |
| 2 | Tensor 3.Ordnung $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I \times J \times K}$ | 11 |
| 3 | Rang Eins Tensor 3.Ordnung $\mathcal{X} = \mathbf{a} \circ \mathbf{b} \circ \mathbf{c}$ | 11 |
| 4 | HOSVD eines Tensors 3.Ordnung | 13 |

Tabellenverzeichnis

1 Einführung

2 Theorie

Das Ziel dieses Kapitels ist es die Verständigung über Notation zu klären und eine theoretische Grundlage für Kapitel 3 zu schaffen, um die dortigen Resultate gekonnt nachzuvollziehen. Zu erst behandeln wir einen funktionalanalytischen Ansatz für elliptische Probleme. Begriffe wie schwache Lösung, klassische Lösung, Variationsgleichung und Sobolev Raum werden geklärt. Dies liefert uns das Basiswissen für die Galerkin Methode, welche im 2. Unterkapitel besprochen wird. Im 3. Unterkapitel Methode der finiten Elemente ist das Ziel die Gleichung $Au = f$ herzuleiten mit A als globale Steifigkeitsmatrix. Im darauffolgenden Kapitel wollen wir uns eine flexiblere Methode anschauen, als die Methode der Finiten Elemente und die Wichtigkeit zu dieser Arbeit soll besonders hervorgehoben werden.

Dann kommen wir zu einem ganz anderen Thema nämlich dem der Tensor Dekomposition. Erstmal schauen wir uns grundlegende Definition an um mit diesem Basiswissen die Singulärwertzerlegung höherer Ordnung einzuführen. Mit dieser werden wir uns gewissen finite Elemente Operatoren als Tensoren umdefinieren und uns deren Zerlegung anschauen. Wir werden diese Untersuchungen in Kapitel 4 durchführen. In Hoffnung natürlich, dass die Zerlegung einfach ist und daraus die Pseudoinverse herleitbar ist.

2.1 Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen

2.1.1 Schwache Lösungen

Es ist naheliegend, dass wir uns zu erst mit notwendigen Funktionenräumen beschäftigen und uns auf analytischer Ebene eine Umformulierung der Differentialgleichung zu nutze machen, welche uns letztlich die Grundlage für die finiten Elementen Methode liefert.

Dazu schauen wir uns folgendes Randwert Problem an:

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f \text{ in } \Omega \\ u &= 0 \text{ in } \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.1}$$

Wir sehen von der Form der Differentialgleichung, dass die gesuchte Lösung bestimmte Differenzierbarkeits- und Stetigkeitsbedingungen zu erfüllen hat. Nämlich, dass u zweimal stetig differenzierbar sein sollte. Dementsprechend legen die Differenzierbarkeitsanforderungen den Raum $u \in C_0^2$ nahe.

Nun kann es aber sein, dass eine Lösung für dieses Problem garnicht in diesem Raum existiert. Wir können uns dafür als Beispiel die Betragsfunktion anschauen.

$$f(x) = |x| \tag{2.2}$$

Offensichtlich ist diese Funktion in 0 nicht stetig differenzierbar. Trotzdem können wir eine Ableitung finden, die wir schwache Ableitung nennen.

$$f'(x) = \begin{cases} -1 & \text{für } x < 0 \\ 0 & \text{für } x = 0 \\ 1 & \text{für } x > 0 \end{cases} \tag{2.3}$$

Nun um das was wir jetzt für die Betragsfunktion gemacht haben, für unser Randwertproblem zu machen nutzen wir eine funktionalanalytische Idee die aus der Distributionstheorie stammt. Wir multiplizieren mit einer Testfunktion ψ und integrieren über das Gebiet.

$$\int_{\Omega} -\Delta u \psi dx = \int_{\Omega} f \psi dx \tag{2.4}$$

Der nächste Schritt, welcher durchwegs fundamental für die Herleitung ist, ist die intuitive Nutzung der Struktur und Integrationswerkzeuge um zu erreichen,

dass an u weniger Differenzierbarkeitsanforderungen gebunden sind. Für diesen Schritt ist der Satz von Green und die partielle Integration von Wichtigkeit.

Lemma 2.1. *Satz von Green*

Lemma 2.2. *Partielle Integration*

Für unsere Differentialgleichung (2.4) nutzen wir die partielle Integration und erhalten.

$$\int_{\Omega} -\nabla u \nabla \psi \, dx = \int_{\Omega} f \psi \, dx \quad (2.5)$$

Dies ist die so genannte Variationsgleichung. Sie ist ein erster Indiz für die später gewünschte Bilinearform der zugrundeliegenden Topologie. Die Lösung u von (2.5) nennt man *schwache Lösung* für das Problem (2.1). Die Lösung $u \in C_0^2$ von (2.1) nennt man *klassische Lösung*. Nun wissen wir in welchem Raum die klassische Lösung liegt, aber welche Topologie ist für die schwache Lösung sinnvoll? Ein funktionalanalytischer Ansatz versucht nun die Räume zu definieren, in der die Lösung u für (2.5) liegt. In unserem Fall wäre folgender Raum ergiebig:

$$H_0^1(\Omega) = \{v \in L_2(\Omega) : \frac{\delta v}{\delta x_i} \in L_2(\Omega), v = 0 \text{ in } \partial\Omega, i = 1, \dots, d\}$$

Diese Räume nennt man Sobolev Räume. Allgemein sind sie definiert durch:

Definition 2.3. *Sobolev Raum*

Das heißt Sobolev Räume sind eine Teilmenge von den L_2 Räumen. Von der analytischen Perspektive ist die Wahl des Funktionenraumes essentiell für den Nachweis der Existenz der Lösung. Von der Perspektive der finiten Elementen Methode ist dies für die Fehlerabschätzung wichtig, da wir dann die induzierte Norm des Funktionenraumes benutzen [Joh08, 36]. Beide genannten Themen würden den Rahmen dieser Bachelorarbeit sprengen, daher verweise ich an gegebenen Stellen an weiterführende Literatur.

Die Sobolev Räume wurden mit Skalarprodukten ausgestattet, sodass unsere Variationsgleichung intuitiv als Skalarprodukt der zugrundeliegenden Sobolev Räume geschrieben werden kann.

Lemma 2.4. *Sobolev Norm*

Lemma 2.5. *Sobolev Skalarprodukt*

Lemma 2.6. *Falls die Bilinearform symmetrisch ist $u \in V$ ein Minimierer der Gleichung*

$$J(u) = \min_{v \in V} J(v) = \frac{1}{2}a(u, v) - f(v) \quad (2.6)$$

genau dann wenn u die schwache Formulierung löst.

2.1.2 Galerkin Verfahren

(Numerik 2 Skript Kanschä) Unser Ausgangspunkt ist nun

$$\text{Finde } u \in \Omega : a(u, v) = f(v) \forall u \in \Omega \text{ und } v \in V \quad (2.7)$$

Da die Sobolev Räume unendlich dimensional sind, ist es schwer sich mit der Konstruktion einer Lösung vertraut. Daher ist die Kernidee des Galerkin Verfahrens unseren Banachraum zu diskretisieren. Dazu führen wir eine sogenannte konforme Approximation durch. Wir wählen $V_n \subset V$, sodass $\dim V_n = n < \infty$. Nun gilt für die Minimierung in (2.6)

$$u = \arg \min_{v \in V} J(v) \text{ (stetig)}$$

$$u_n = \arg \min_{v_n \in V_n} J(v_n) \text{ (diskret)}$$

Daraus folgt

$$J(u_n) \geq J(u)$$

Dies folgt direkt aus der Wahl des Raumes als Teilraum des ursprünglichen Raumes. Man nennt diese Methode konforme Ritz-Galerkin Methode aus dem Grund, dass der diskrete Raum ein Teilraum von dem ursprünglichen Raum ist und die Funktion J gleich bleibt. Was hat uns das Ganze gebracht? Nun da, $\dim V_n = n < \infty$ können wir eine Basis für V_n . Das bringt uns den Vorteil, dass wir u_n als Linear Kombination der Basiselemente in V_n approximieren können.

Die schwache Formulierung sieht nun wie folgt aus

Lemma 2.7. *Schwache Formulierung (Galerkin)*

Finde $u_n \in V_n$, sodass $a(u_n, v_n) = f(v_n) \forall v_n \in V_n$.

Sei nun e_1, \dots, e_n eine Basis von V_n . Es ist nun ausreichend nur die Basis zum Testen zu nutzen. Die obere Gleichung in Lemma 2.7 reduziert sich auf

$$a(u_n, e_i) = f(e_i) \forall i \in \{1, \dots, n\} \quad (2.8)$$

Im nächsten Schritt erweitern wir u_n als Linearkombination wie folgt

$$u_n = \sum_{j=1}^n u_j e_j \quad (2.9)$$

und setzen dies in 2.8 ein und erhalten.

$$\begin{aligned} a\left(\sum_{j=1}^n u_j e_j, e_i\right) &= f(e_i) \iff \\ \sum_{j=1}^n u_j a(e_j, e_i) &= f(e_i) \end{aligned} \tag{2.10}$$

Das können wir zusammenfassen in einem Linearen Gleichungssystem mit $A_{ij} = a(e_j, e_i)$ und $u = (u_1, \dots, u_n)^T$. Insgesamt erhalten wir

$$Au = f \tag{2.11}$$

Bemerkung 2.8. *Eigenschaften Galerkin*

1. *Galerking Orthogonalität*

Eine Kerneigenschaft der Galerkin Methode ist, dass der Fehler orthogonal zu dem Teilraum von V liegt.

2. *Symmetrie*

Die Matrix A ist genau dann symmetrisch, wenn die Bilinearform symmetrisch ist.

2.1.3 Methode der finiten Elemente

Im Vorherigen Kapitel haben wir das Ritz-Galerkin Verfahren kennengelernt. Der Kernaspekt dieser konformer Approximation war eine diskretisierung des Raumes und mit einhergehend global einheitlich definierte Funktionen. Nun öffnen wir die letzt genannte Einschränkung und fordern nur noch stückweise definierte Funktionen, in der Regel Polynome. Wo genau eine Funktion definiert ist, hängt von unserer Gebietszerlegung ab. Das heißt für die Finite Elemente Methode (FEM) ist es zu erst notwendig das Grundgebiet in geometrisch einfache Teilgebiete $\Omega_h = \{\Omega_k\}_{k=1 \dots N}$ z.B. Dreiecke und Rechtecke bei Problemen in der Ebene oder Tetraeder und Quader bei Problemen im dreidimensionalen Raum. Dann folgt eine Definition von Ansatz- und Testfunktionen über Teilgebieten. Da wir zwischen den Teilgebieten eine Stetigkeit fordern, definiert man Übergangsbedingungen die dann die Sicherung der Stetigkeit global sichert. (Grossmann Seite 175). Die Stetigkeit wird gefordert damit wir $V_h \subset V$ bekommen, da beispielsweise gelten kann $V \subset H^1(\Omega)$.

Bemerkung 2.9. *Natürliche Voraussetzungen an Zerlegung (Grossman S.176)*

Die Voraussetzungen an die Zerlegung $\mathcal{Z} = \{\Omega_j\}_{j=1}^m$ sind

1.

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{j=1}^m \bar{\Omega}_j$$

2.

$$\text{int}\Omega_i \cap \text{int}\Omega_j = \emptyset, \text{ falls } i \neq j.$$

Beispiel 2.10. $\Omega = [a, b]$ (Grossmann S.184)

Wir definieren Gitterpunkte $\{x_i\}_{i=0}^N$ über $\bar{\Omega}$ beschrieben wie folgt:

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = b$$

und eine Zerlegung $\mathcal{Z} = \{\Omega_j\}_{j=1}^m$ mit $\Omega_i := (x_{i-1}, x_i)$ $i = 1, \dots, N$.

Ferner sei $h_i := x_i - x_{i-1}$, $i = 1, \dots, N$. Wir wählen lineare Ansatzfunktionen damit

gilt $V_h = \text{lin}\{\varphi_i\}_{i=0}^N$ wobei die Ansatzfunktionen definiert sind durch

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{1}{h_i}(x - x_{i-1}), & \text{für } x \in \Omega_i \\ \frac{1}{h_{i+1}}(x_{i+1} - x) & \text{für } x \in \Omega_{i+1} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.12)$$

Es gilt nach Konstruktion $\varphi \in C(\bar{\Omega})$ sowie $\varphi_i|_{\Omega_j} \in C^1(\bar{\Omega}_j)$, somit hat man insgesamt $\varphi_i \in H^1(\Omega)$. Die folgende Abbildung stellt die Graphen von Ansatzfunktionen φ_i dar.

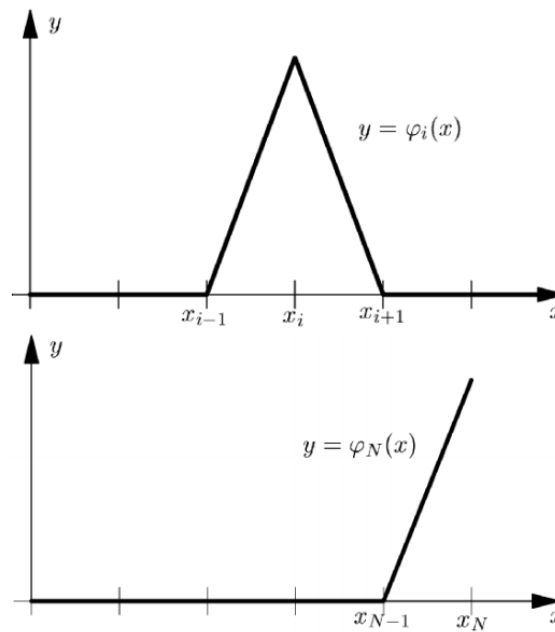


Abbildung 1: Ansatzfunktionen φ_i

Es gilt demnach $\varphi_i(x_k) = \delta_{ik}$, $i, k = 0, 1, \dots, N$.

Bemerkung 2.11. *Referenzzelle*

Satz 2.12. *Referenzzelle Transformation*

2.1.4 Diskontinuierliche Galerkin-Methode

Die diskontinuierliche Galerkin-Methode wurde 1973 erstmals von Reed und Hill eingeführt für hyperbolische Gleichung erster Ordnung. Es gab eine Reihe von Untersuchungen seither bezüglich hyperbolische Probleme erster Ordnung als auch für die Diskretisierung instationärer Probleme. Unabhängig davon wurde die diskontinuierliche Galerkin-Methode für elliptische Gleichungen vorgeschlagen. Man wollte mehr Flexibilität bezüglich der Stetigkeitsvoraussetzungen an unsere lokalen Funktionen und mehr Freiraum bei der Gitter Generierung, insbesondere bei adaptiven h-p-Methoden. Die Art von dGFEM-Code erleichtert Parallelisierbarkeit was in Zeiten von GPU Programmierung eine große Effizienzsteigerung erlaubt. Die Idee von dGFEM ist maßgeblich Strafterme einzuführen, welche Unstetigkeit zwar erlauben aber in ihrem Ausmaß einschränkt. Diese Freiheit erlaubt uns aber zum Beispiel lokal Polynome höherer Ordnung zu benutzen und Singularitäten damit gekonnt zu beseitigen, ohne von Vorne zu beginnen zu müssen. Zu mal pro Element ein hängender Knoten erlaubt ist. D.h. eine Verfeinerung des Gitters ist lokal erlaubt, ohne direkt Probleme zu bekommen. (S.292 Grossmann)

2.2 Tensor Dekomposition

2.2.1 Einführung in die Tensor Architektur

Definition 2.13. Tensor

Unter einem Tensor verstehen wir eine multidimensionale Matrix $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$

Die Ordnung ist die Anzahl der Dimensionen, in diesem Fall also N .

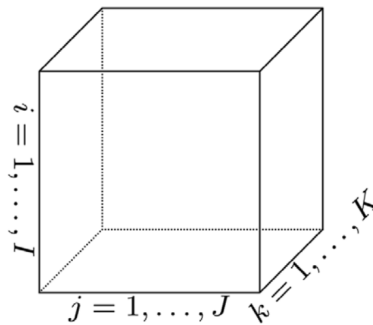


Abbildung 2: Tensor 3.Ordnung $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I \times J \times K}$

Definition 2.14. Rang Eins Tensor

Ein Tensor $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$ ist von Rang Eins wenn es als äußeres Produkt von N Vektoren

$$\mathcal{X} = \mathbf{a}^{(1)} \circ \dots \circ \mathbf{a}^{(N)}$$

geschrieben werden kann.

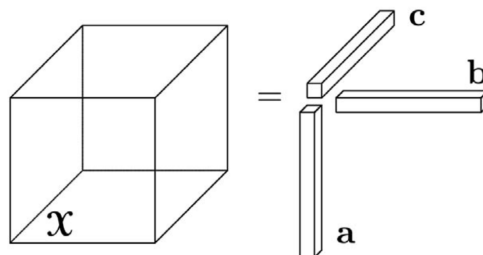


Abbildung 3: Rang Eins Tensor 3.Ordnung $\mathcal{X} = \mathbf{a} \circ \mathbf{b} \circ \mathbf{c}$

Bemerkung 2.15. Symmetrie

- Ein Tensor nennt man kubisch genau dann wenn jeder Mode dieselbe Dimension hat.
- Einen kubischen Tensor nennt man supersymmetrisch genau dann wenn die Elemente des Tensors konstant bleiben unter jeglicher Permutation der Indizes
- Ein Tensor kann stückweise symmetrisch sein wenn die Elemente konstant bleiben unter der Permutation von mindestens 2 Indizes.

Definition 2.16. Diagonal

Einen Tensor $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{l_1 \times l_2 \times \dots \times l_N}$ nennt man diagonal, wenn $x_{i_1, \dots, i_N} \neq 0$ genau dann wenn $i_1 = \dots = i_N$.

Definition 2.17. Faser

Eine Faser ist das multidimensionale Analog zu Matrixspalten und Matrixzeilen. Wir definieren eine Faser, indem wir jeden Index abgesehen von einem festhalten.

Bemerkung 2.18. Entfaltung

Einen Tensor kann man entfalten. Dies impliziert eine Neuordnung der Tensorelemente in eine Matrix. Wir betrachten nur die sogenannte Ordnung- n Entfaltung, da dies die einzig relevante Form der Entfaltung ist. Eine Ordnung- n Entfaltung eines Tensors $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{l_1 \times l_2 \times \dots \times l_N}$ wird mit $\mathbf{X}_{(n)}$ geschrieben und ordnet die Ordnung- n Fasern in die Spalten der Ergebnismatrix. Formal ist es eine Abbildung des Indizes N -tupels (i_1, \dots, i_N) auf Matrixindizes (i_n, j)

$$j = 1 + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N (i_k - 1) J_k \text{ mit } J_k = \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{k-1} l_m \quad (2.13)$$

Nun fehlt uns noch eine Tensor Multiplikation um mit der Dekomposition von Tensoren anzufangen.

Definition 2.19. n -Ordnung Produkt

Das n -Ordnung Produkt eines Tensors $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{l_1 \times l_2 \times \dots \times l_N}$ mit einer Matrix $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{J \times l_n}$ wird geschrieben als $\mathcal{X} \times_n \mathbf{U}$ und die Ergebnis Matrix hat die Größe $l_1 \times \dots \times l_{n-1} \times J \times l_{n+1} \times \dots \times l_N$

$$(\mathcal{X} \times_n \mathbf{U})_{i_1 \dots i_{n-1} j i_{n+1} \dots i_N} = \sum_{i_n=1}^{l_n} x_{i_1 \dots i_N} u_{j i_n} \quad (2.14)$$

Bemerkung 2.20. Jedes n -Ordnung Produkt kann mit Hilfe von entfalteten Tensoren äquivalent ausgedrückt werden.

$$\mathcal{Y} = \mathcal{X} \times_n \mathbf{U} \iff \mathbf{Y}_{(n)} = \mathbf{U} \mathbf{X}_{(n)} \quad (2.15)$$

2.2.2 Singulärwertzerlegung höherer Ordnung

Die Higher Order Singular Value Decomposition oder auch bekannt unter Tucker Decomposition ist eine uminterpretierte multidimensionale Hauptkomponentenanalyse. Man versucht durch Hauptachsentransformationen die Korrelation zwischen den verschiedenen Merkmalen durch Überführung in eine neue Basis zu minimieren. Die Hauptachsentransformation lässt sich durch eine orthogonale Matrix angeben, die aus den Eigenvektoren der Kovarianzmatrix gebildet wird. (Wikipedia: Hauptkomponentenanalyse).

Die HOSVD zerlegt den Tensor in einen Kern-Tensor (Core Tensor) multipliziert mit einer Matrix in jeder Ordnung.

Beispiel 2.21. HOSVD Tensor 3.Ordnung $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I \times J \times K}$

$$\mathcal{X} \approx \mathcal{G} \times_1 \mathbf{A} \times_2 \mathbf{B} \times_3 \mathbf{C} \quad (2.16)$$

Wobei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times P}$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{J \times Q}$ und $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{K \times R}$ die Faktormatrizen sind, welche orthogonal sind. \mathcal{G} bezeichnet den Kern-Tensor und zeigt wie hoch die Korrelation zwischen den verschiedenen Komponenten ist.

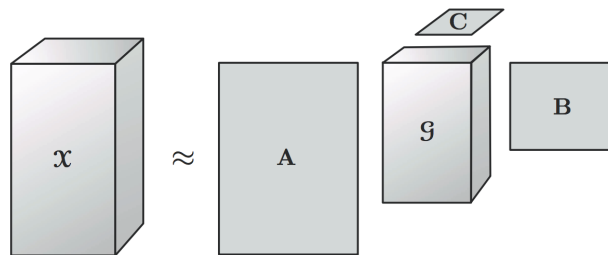


Abbildung 4: HOSVD eines Tensors 3.Ordnung

Bemerkung 2.22. Entfaltete HOSVD

$$\mathbf{X}_{(n)} = \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{G}_{(n)} (\mathbf{A}^{(N)} \otimes \dots \otimes \mathbf{A}^{(n+1)} \otimes \mathbf{A}^{(n-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{A}^{(1)})^T \quad (2.17)$$

Definition 2.23. n -Rang

$\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$. Der n -Rang eines Tensor wird geschrieben mit $\text{rang}_n(\mathcal{X})$ und ist der Spaltenrang des entfalteten Tensors $X_{(n)}$.

Bemerkung 2.24. Sei $R_n = \text{rang}_n(\mathcal{X})$ für $n = 1, \dots, N$. Dann können wir sagen, dass \mathcal{X} ein $\text{rang} - (R_1, \dots, R_N)$ Tensor ist.

Bemerkung 2.25. Berechnung der HOSVD (Wikipedia)

Die Berechnung der HOSVD von $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$ geht wie folgt

1. Berechne die Ordnung- k Entfaltungen $\mathcal{X}_{(k)}$ für alle k
2. Berechne die SVD $\mathcal{X}_{(k)} = U_k \Sigma_k V_k^T$ und speichere U_k
3. Der Kerntensor \mathcal{S} ergibt sich aus der Projektion des Tensors auf die Tensorbasis geformt von den Faktormatrizen $\{U_k\}_{k=1}^N$ also $\mathcal{S} = \mathcal{X} \times_{n=1}^N U_n^T$

Bemerkung 2.26. Eindeutigkeit der HOSVD

Die HOSVD ist keine eindeutige Zerlegung. Dies führen wir an einem Tensor 3.Ordnung an. Sei $U \in \mathbb{R}^{P \times P}$, $V \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$ und $W \in \mathbb{R}^{R \times R}$. Dann folgt

$$\mathcal{X} = \mathcal{G} \times_1 A \times_2 B \times_3 C = (\mathcal{G} \times_1 U \times_2 V \times_3 W) \times_1 AU^{-1} \times_2 BV^{-1} \times_3 CW^{-1} \quad (2.18)$$

In anderen Worten: Wir können den Kerntensor \mathcal{G} modifizieren ohne die Gleichung zu ändern, solange wir das Inverse der Modifizierung auf den zugehörigen Faktormatrizen multiplizieren.

Mit diesen Kenntnissen können wir nun zum Beispiel versuchen so viele Elemente des Kerntensor wie möglich auf 0 zu bekommen oder so klein wie möglich zu machen. Weiterführende Liteartur S.479 TENSOR DECOMPOSITIONS AND APPLICATIONS.

3 Pseudoinverse für zell-basierte finiten Elemente Operatoren

3.1 Summenfaktorisierung

Das Ziel ist es die Tensorprodukt Struktur für die Massematrix und den Laplace Bilinearform herzuleiten und für die Berechnung der Pseudoinversen zu nutzen.

Angenommen wir hätten eine Lösung $u \in V$ der Form

$$u(x, y) = \sum_{h=1}^{n^2} \psi_h(x, y) u_h, \quad u_h \in \mathbb{R} \quad \forall h = 1, \dots, n^2 =: N \quad (3.1)$$

mit ψ_h ist eine globale Ansatzfunktion. Diese Anstazfunktionen können als das Tensorprodukt von zwei ein dimensional Polynomen ausgedrückt werden. Die Überführung ist definiert mit

$$h = j(n-1) + i, \quad i < n \leftrightarrow (i, j) \quad (3.2)$$

was uns eine alternative Representation von u gibt

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \varphi_i(x) \varphi_j(y) u_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n \quad (3.3)$$

Seien $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)^T$ Quadraturpunkte einer 1-dimensionalen Quadraturegel mit zugehörigen Gewichten $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_n)^T$. Wir können die 2-dimensionale Regel erhalten indem wir wieder das Tensorprodukt ausnutzen und erhalten $(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$ und Gewichten $(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_N)$ mit $\mathbf{q}_h = (q_i, q_j)$ and $\mathbf{w}_h = w_i w_j$.

Erstmals wollen wir u in jedem Quadraturpunkt evaluieren. Das können wir mit einem Matrix Vektor Produkt ausdrücken:

$$\begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{q}_1) & \dots & \psi_N(\mathbf{q}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\mathbf{q}_N) & \dots & \psi_N(\mathbf{q}_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(\mathbf{q}_1) \\ \vdots \\ u(\mathbf{q}_N) \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Die Matrix kann als Tensorprodukt zweier, in diesem Fall sogar identischer, Ma-

trizen:

$$\mathcal{N}^T \otimes \mathcal{N}^T = \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{q}_1) & \dots & \varphi_n(\mathbf{q}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(\mathbf{q}_n) & \dots & \varphi_n(\mathbf{q}_n) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{q}_1) & \dots & \varphi_n(\mathbf{q}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(\mathbf{q}_n) & \dots & \varphi_n(\mathbf{q}_n) \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Sei $(\mathcal{U}_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Matrix mit den Koeffizienten u_{ij} als Elemente. Durch die Nutzung der Summenfaktorisierung können wir diese Matrizen multiplizieren anstatt der Formel in (4). Wir erhalten:

$$\mathcal{N}^T \mathcal{U} \mathcal{N} = \bar{\mathcal{U}}, \quad \bar{\mathcal{U}}_{ij} = u(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \quad (3.6)$$

Die Quadraturgewichte und die Summe über die Elemente kann in einer effiziente Weise vollzogen werden, wenn wir die Tensorprodukt Struktur ausnutzen. Die Multiplikation $\bar{\mathcal{U}}$ mit den Quadraturgewichten \mathbf{w} von der rechten Seite wird uns die gewichteten Spalten aufsummieren, multipliziert mit \mathbf{w}^T wird den Rest erledigen. Die ganze Operation sieht wie folgt aus:

$$\int \int u(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \approx \mathbf{w}^T \mathcal{N}^T \mathcal{U} \mathcal{N} \mathbf{w} \quad (3.7)$$

Wir haben nun u integriert. Jedoch können wir nun mit Ansatzfunktionen testen ohne viel zu verändern. Wir schauen uns $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = g(\mathbf{x})h(\mathbf{y})$ an. Also ist f separabel und somit müssen wir nur den letzten Schritt ändern. Anstatt nur den Gewichten zu multiplizieren, werden wir auch mit den Ansatzfunktionen, an den bestimmten Quadraturpunkten evaluiert, multiplizieren:

$$\bar{\mathbf{w}}^x = (\mathbf{w}_1 g(\mathbf{q}_1), \dots, \mathbf{w}_n g(\mathbf{q}_n))^T \quad \bar{\mathbf{w}}^y = (\mathbf{w}_1 h(\mathbf{q}_1), \dots, \mathbf{w}_n h(\mathbf{q}_n))^T$$

$$\int \int u(\mathbf{x}, \mathbf{y}) f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \approx (\bar{\mathbf{w}}^x)^T \mathcal{N}^T \mathcal{U} \mathcal{N} \bar{\mathbf{w}}^y \quad (3.8)$$

Wenn wir eine Menge von Ansatzfunktionen haben, welche hergeleitet sind von dem Tensorprodukt von identischen 1-dimensionalen Ansatzfunktionen, können wir die Matrizen multiplizieren anstatt die Vektoren im letzten Schritt, was nun die Operation vollständig macht. Wir definieren:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1 \varphi_1(\mathbf{q}_1) & \dots & \mathbf{w}_n \varphi_1(\mathbf{q}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{w}_1 \varphi_n(\mathbf{q}_1) & \dots & \mathbf{w}_n \varphi_n(\mathbf{q}_n) \end{pmatrix}$$

Da $\mathcal{W}\mathcal{N}^T$ auf Beiden Seiten auftaucht, können wir diese Operation mit 3 Matrixmultiplikationen ausdrücken. Finale Form der Gleichung:

$$\mathcal{V} = \mathcal{W}\mathcal{N}^T \mathcal{U} (\mathcal{W}\mathcal{N}^T)^T \quad (3.9)$$

Die Formel leicht geändert kann benutzt werden um andere Bilinearformen auszudrücken:

$(\nabla u, \nabla v)$.

$$(\nabla u, \nabla v) = (\partial_x u, \partial_x v) + (\partial_y u, \partial_y v) \quad (3.10)$$

$$= \sum_{i,j} u_{ij} (\varphi'_i(x) \varphi_j(y), \varphi'_i(x) \varphi_j(y)) \quad (3.11)$$

$$+ \sum_{i,j} u_{ij} (\varphi_i(x) \varphi'_j(y), \varphi_i(x) \varphi'_j(y)) \quad (3.12)$$

Nun werden wir 2 Matrizen \mathcal{W}' und \mathcal{N}' vorstellen. Diese Matrizen sind ähnlich zu den oben, aber anstatt die Ansatzfunktionen zu evaluieren, evaluieren sie die Ableitung der Ansatzfunktionen. Die resultierende Form ergibt sich aus:

$$\mathcal{V} = \mathcal{W}'\mathcal{N}'^T \mathcal{U} (\mathcal{W}\mathcal{N}^T)^T + \mathcal{W}\mathcal{N}^T \mathcal{U} (\mathcal{W}'\mathcal{N}'^T)^T$$

Sei $(-\Delta u, v) = -(\partial_{xx} u, v) + -(\partial_{yy} u, v)$.

Wir führen \mathcal{N}'' ein, was die Werte der 2. Ableitung der Ansatzfunktionen in den Quadraturgewichten speichert. Bemerke, dass die Matrix \mathcal{W} nicht modifiziert wurde. Als Resultat erhalten wir

$$\mathcal{V} = -\mathcal{W}\mathcal{N}''^T \mathcal{U} (\mathcal{W}\mathcal{N}^T)^T - \mathcal{W}\mathcal{N}^T \mathcal{U} (\mathcal{W}\mathcal{N}''^T)^T$$

Zusammengefasst erhalten wir für die Masse Matrix die Form

$$\mathbf{M} * \mathbf{u} = (\mathcal{W}\mathcal{N}^T) \otimes (\mathcal{W}\mathcal{N}^T) * \mathbf{u} \quad (3.13)$$

und für die Laplace Bilinearform

$$\mathcal{V} * \mathbf{u} = -((\mathcal{W}\mathcal{N}''^T) \otimes (\mathcal{W}\mathcal{N}^T)) * \mathbf{u} - ((\mathcal{W}\mathcal{N}^T) \otimes (\mathcal{W}\mathcal{N}''^T)) * \mathbf{u} \quad (3.14)$$

Die Berechnung der Pseudoinversen passiert mit diesem Ansatz quasi on the fly, da wir hier gleich als Ergebnis nicht die Pseudoinverse bekommen, sondern

das Matrix Vektor Produkt mit der Pseudoinversen als Matrix.

Für die Berechnung der Inversen brauchen wir folgendes Ergebnis:

Bemerkung 3.1.

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1} \quad (3.15)$$

Nun haben wir uns mit Hilfe der Tucker Dekomposition eine Herleitung für die Pseudoinverse erarbeitet. Nun geht es um die effiziente Berechnung dieser Formel. Dazu wollen wir uns die Summenfaktorisierung zu nutze machen, wie sie auch in [Tea, 9-11] vorgeschlagen wird. Sei $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{I_1 \times \dots \times I_n}$. Die Formel für die Pseudoinverse lautet:

$$\mathcal{A}^\dagger = \mathcal{S}^\dagger \times_{n=1}^N \mathbf{U}^{(n)\top} \quad (3.16)$$

Wobei $\mathcal{S} \in \mathbb{R}^{I_1 \times \dots \times I_n}$ und $\mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}^{J_n \times I_n}$. Man kann 3.15 nach [TK09, 462] äquivalent umformen zu

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{(n)}^\dagger &= \mathbf{U}^{(n)\top} \mathcal{S}_{(n)}^\dagger (\mathbf{U}^{(N)\top} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(n+1)\top} \otimes \mathbf{U}^{(n-1)\top} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(1)\top})^\top \\ \iff \mathcal{A}_{(n)}^\dagger &= \mathbf{U}^{(n)\top} \mathcal{S}_{(n)}^\dagger (\mathbf{U}^{(N)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(n+1)} \otimes \mathbf{U}^{(n-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(1)}) \end{aligned} \quad (3.17)$$

Nun betrachten wir uns das Matrix-Vektor Produkt und überlegen uns wie wir uns die Strukturen dort zu nutze machen.

$$\mathcal{A}_{(n)}^\dagger \mathbf{v} = \mathbf{U}^{(n)\top} \mathcal{S}_{(n)}^\dagger (\mathbf{U}^{(N)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(n+1)} \otimes \mathbf{U}^{(n-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(1)}) \mathbf{v} \quad (3.18)$$

Wir schauen uns die Struktur mal für den Fall, dass $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{I_1 \times \dots \times I_4}$. Das heißt 3.17 reduziert sich auf:

$$\mathcal{A}_{(n)}^\dagger \mathbf{v} = \mathbf{U}^{(n)\top} \mathcal{S}_{(n)}^\dagger (\mathbf{U}^{(N_1)} \otimes \mathbf{U}^{(N_2)} \otimes \mathbf{U}^{(N_3)}) \mathbf{v} \quad (3.19)$$

mit $N_i \neq n$.

Zu Zwecken der Veranschaulichung nehmen wir eine Umdefinierung vor: $A := \mathbf{U}^{(N_3)}$, $B := \mathbf{U}^{(N_2)}$, $C := \mathbf{U}^{(N_1)}$. Wenn wir uns die Struktur in der Klammer anschauen sieht diese wie folgt aus

$$z := \begin{pmatrix} c_{11}b_{11}A & \dots & c_{11}b_{1n}A & \dots & \dots & c_{1n}b_{11}A & \dots & c_{1n}b_{1n}A \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{11}b_{n1}A & \dots & c_{11}b_{nn}A & \dots & \dots & c_{1n}b_{n1}A & \dots & c_{1n}b_{nn}A \\ c_{21}b_{n1}A & \dots & c_{21}b_{nn}A & \dots & \dots & c_{2n}b_{n1}A & \dots & c_{2n}b_{nn}A \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{n1}b_{n1}A & \dots & c_{n1}b_{nn}A & \dots & \dots & c_{nn}b_{n1}A & \dots & c_{nn}b_{nn}A \end{pmatrix} * v \quad (3.20)$$

Wir sehen hier sich zwei wiederholende Strukturen die wir ausnutzen können um bei einem Matrix-Vektor Produkt operationen zu sparen.

$$z = \begin{pmatrix} c_{11}\textcolor{red}{b}_{11}A & \dots & c_{11}\textcolor{red}{b}_{1n}A & \dots & \dots & c_{1n}\textcolor{red}{b}_{11}A & \dots & c_{1n}\textcolor{red}{b}_{1n}A \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{11}\textcolor{red}{b}_{n1}A & \dots & c_{11}\textcolor{red}{b}_{nn}A & \dots & \dots & c_{1n}\textcolor{red}{b}_{n1}A & \dots & c_{1n}\textcolor{red}{b}_{nn}A \\ c_{21}\textcolor{red}{b}_{n1}A & \dots & c_{21}\textcolor{red}{b}_{nn}A & \dots & \dots & c_{2n}\textcolor{red}{b}_{n1}A & \dots & c_{2n}\textcolor{red}{b}_{nn}A \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{n1}\textcolor{red}{b}_{n1}A & \dots & c_{n1}\textcolor{red}{b}_{nn}A & \dots & \dots & c_{nn}\textcolor{red}{b}_{n1}A & \dots & c_{nn}\textcolor{red}{b}_{nn}A \end{pmatrix} * v \quad (3.21)$$

Nun wollen wir uns dies zu nutze machen. Wir schauen uns erstmal die einzelnen Einträge von z an und bekommen. Vorher definieren wir unser v um zu einem Tensor $\mathcal{V} \in \mathbb{R}^{l_1 \times l_2 \times l_3}$. Der erste Index repräsentiert in welcher Spalteneintrag von C wir uns befinden, der zweite in welchem Spalteneintrag von B und der Dritte in welchem Spalteneintrag von A .

$$z_1 = \mathcal{V}(1, 1, 1)c_{11}\textcolor{red}{b}_{11}\textcolor{red}{a}_{11} + \dots + \mathcal{V}(1, 1, n)c_{11}\textcolor{red}{b}_{11}\textcolor{red}{a}_{1n} + \dots + \mathcal{V}(1, n, 1)c_{11}\textcolor{red}{b}_{1n}\textcolor{red}{a}_{11} \\ + \dots + \mathcal{V}(n, 1, 1)c_{1n}\textcolor{red}{b}_{11}\textcolor{red}{a}_{11} + \dots + \mathcal{V}(n, n, n)c_{1n}\textcolor{red}{b}_{1n}\textcolor{red}{a}_{1n} \quad (3.22)$$

Definiere $w_1(i, j) := \mathcal{V}(i, j, 1)\textcolor{red}{a}_{11} + \dots + \mathcal{V}(i, j, n)\textcolor{red}{a}_{1n}$. Dann erhalten wir:

$$z_1 = w_1(1, 1)c_{11}b_{11} + \dots + w_1(1, n)c_{11}b_{1n} + \dots + w_1(n, 1)c_{1n}b_{11} + \dots + w_1(n, n)c_{1n}b_{1n}$$

Damit haben wir uns die sich wiederholende Struktur von der Matrix A zu nutze gemacht. Im nächsten Schritt machen wir uns die sich wiederholende Struktur von $\textcolor{red}{b}_{ij}$ zu nutze. Definiere hierfür $\mathfrak{w}_{1,k}(i) := w_k(i, 1)\textcolor{red}{b}_{11} + \dots + w_k(i, n)\textcolor{red}{b}_{1n}$. Damit erhalten wir:

$$z_1 = \mathfrak{w}_{1,1}(1)c_{11} + \cdots + \mathfrak{w}_{1,1}(n)c_{1n} \quad (3.23)$$

Wir wollen nun z genau so umformen wie wir das auch für v gemacht haben. Damit erhalten wir für allgemeines z_i folgende Formel:

$$\mathcal{Z}(i, j, k) = \mathfrak{w}_{j,k}(1)c_{i1} + \cdots + \mathfrak{w}_{j,k}(n)c_{in} \quad (3.24)$$

Wobei j und k den Zeilen jeweils in den Matrizen B und C entsprechen.

Der komplette Algorithmus würde nun wie folgt aussehen:

```

for k=1 < n do
  for i= 1 < n do
    for j= 1 < n do
       $w_k(i, j) = \mathcal{V}(i, j, 1)a_{k1} + \cdots + \mathcal{V}(i, j, n)a_{kn}$ 
    end for
  end for
end for
for k=1 < n do
  for i= 1 < n do
    for j= 1 < n do
       $\mathfrak{w}_{i,j}(k) := w_k(i, 1)b_{11} + \cdots + w_k(i, n)b_{1n}$ 
    end for
  end for
end for
for k=1 < n do
  for i= 1 < n do
    for j= 1 < n do
       $\mathcal{Z}(i, j, k) = \mathfrak{w}_{j,k}(1)c_{i1} + \cdots + \mathfrak{w}_{j,k}(n)c_{in}$ 
    end for
  end for
end for

```

Wenn wir annehmen, dass die Matrizen $A, B, C \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Dann haben wir bei 3.20 eine Matrix-Vektor Multiplikation von einer Matrix der Größe $n^3 \times n^3$. Dementsprechend hätten wir n^6 Multiplikationen und n^6 Additionen. Die Komplexität des vorgeschlagenen Algorithmuses reduziert sich auf $3n^4$ Multiplikationen und genau so viele Additionen. Ein enorme Reduktion, vor allem für großes n .

3.2 Singulärwertzerlegung höherer Ordnung

4 Numerische Untersuchungen

5 Resultate

Literatur

- [Joh08] Claes Johnson. *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Dover Publications, 2008.
- [Tea] *Efficient evaluation of weak forms in discontinuous Galerkin methods*.
- [TK09] Brett Bader Tamara Kolda. *Tensor Decompositions and Applications*. SIAM, 2009.