DEPARTMENT MATHEMATIK
UND INFORMATIK
DER UNIVERSITÄT ZU KÖLN

Sommersemester 2022

Prof. Dr. Axel Klawonn

Lea Saßmannshausen, M. Sc.
Dr. Janine Weber

05. Mai 2022

2. Projekt zum Wissenschaftlichen Rechnen II

Hinweise zu den Abgabemodalitäten: Beachten Sie die Abgabemodalitäten, welche im ILIAS-Übungskurs beschrieben werden:

`https://www.ilias.uni-koeln.de/ilias/goto_uk_frm_4577805.html`

Aufgabe 1: (Deflation/Balancing):
Wir betrachten im Folgenden auf $\Omega = (0,1)^2$ das folgende Variationsproblem:

Finde $u \in H_0^1(\Omega)$, sodass

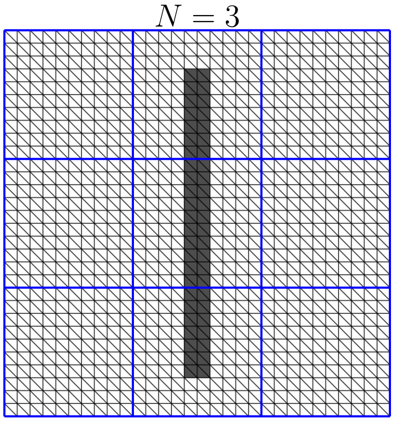
$$\int_\Omega \rho \nabla u \cdot \nabla v \,\mathrm{d}x = \int_\Omega v \,\mathrm{d}x \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

Das Gebiet Ω sei durch eine strukturierte Dreieckszerlegung ($P1$) diskretisiert und $\rho : \Omega \to \mathbb{R}$ sei konstant auf den Elementen. Wir partitionieren Ω in $N \times N$ quadratische Teilgebiete mit jeweils $2 \cdot 10^2$ Elementen.

Integrieren Sie sowohl den Deflation-Vorkonditionierer M_{PP}^{-1} sowie den Balancing-Vorkonditionierer M_{BP}^{-1} in Ihr FETI-DP-Programm und testen Sie Ihre Implementierung anhand des folgenden Problems:

- Die hier dargestellte Gebietszerlegung und Kanal-Koeffizientenfunktion (*Koeffizientenfunktion (i)*):

Koeffizientenfunktion (i)
$N = 3$



Die Funktion $\rho : \Omega \to \mathbb{R}$ sei definiert durch:

$$\rho = \begin{cases} 10^6, & \frac{16}{30} \geq x \geq \frac{14}{30} \ \wedge\ \frac{27}{30} \geq y \geq \frac{3}{30}, \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Setzen Sie also $\rho = 10^6$ in dunkelgrau gefärbten Elementen und sonst $\rho = 1$.

- Alle Eckknoten werden primal gewählt.

- Es sei $P := U(U^TFU)^{-1}U^TF$ die Projektion, die zur Aufstellung der Vorkonditionierer M_{PP}^{-1} und M_{BP}^{-1} benötigt wird. Definieren Sie als eine erste Möglichkeit für zusätzliche primale Bedingungen die Matrix U in der Projektion P wie folgt:

  Sei m die Anzahl dualer Knoten (d.h. hier Kantenknoten) und n_ε die Anzahl Kanten. Stellen Sie $U \in \mathbb{R}^{m\times n_\varepsilon}$ auf, indem Sie für jede Kante e einen Vektor c_e in U schreiben, der definiert ist durch:

$$c_e := \begin{cases} \rho_{\max}(x^h), & x^h \text{ ist FE-Knoten von } e \setminus \partial e, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

  wobei

$$\rho_{\max}(x) := \max_{\substack{T\in\tau_h \\ x\in\overline{T}}} \rho(T).$$

- Wählen Sie in Ihren Untersuchungen der daraus resultierenden Vorkonditionerer M_{PP}^{-1} und M_{BP}^{-1} als jeweiliges Abbruchkriterium das **relative vorkonditionierte Residuum** mit einer Toleranz von 10^{-8}.

- Wählen Sie als Startvektor $\lambda^{(0)} := 0$.

Vergleichen Sie die Anzahl der Iterationen sowie die Konditionszahl für die folgenden Vorkonditionierer: $M^{-1} = I$ (Identität), $M^{-1} = M_D^{-1}$ (Dirichlet-Vorkonditionierer), $M^{-1} = M_{PP}^{-1}$ und $M^{-1} = M_{BP}^{-1}$. Nutzen Sie die Konditionszahlschätzung des Lanczos-Prozess im PCG-Verfahren.

Stellen Sie nur U^TFU explizit auf (jedoch nicht explizit die Inverse). Die Projektion P und die Vorkonditionierer implementieren Sie als Verkettung von Matrix-Vektor-Operationen.

Beantworten Sie zusätzlich die **folgenden Fragen** in Ihrem Projektbericht:

Warum soll in der Implementierung für das Abbruchkriterium das **vorkonditionierte** Residuum genutzt werden? Nehmen Sie hierbei (mathematisch) Bezug auf die verschiedenen Vorkonditionierer. Kann alternativ auch das nicht-vorkonditionierte Residuum genutzt werden? Falls nein, gibt es eine Alternative (abgesehen vom vorkonditionierten Residuum)?

Aufgabe 2: (Adaptive FETI-DP):
Wir betrachten im Folgenden erneut auf $\Omega = (0,1)^2$ das Variationsproblem aus Aufgabe 1:

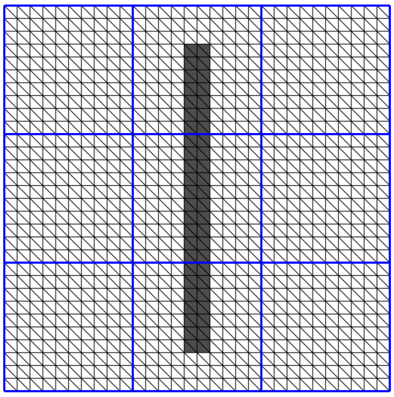
Finde $u \in H_0^1(\Omega)$, sodass

$$\int_\Omega \rho \nabla u \cdot \nabla v \, \mathrm{d}x = \int_\Omega v \, \mathrm{d}x \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

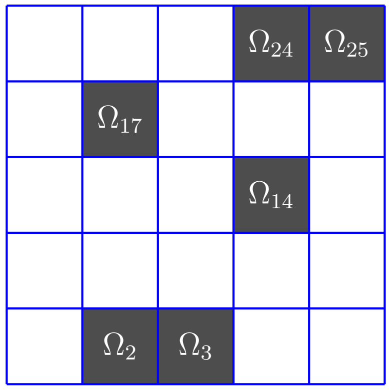
Das Gebiet Ω sei erneut durch eine strukturierte Dreieckszerlegung ($P1$) diskretisiert und $\rho : \Omega \to \mathbb{R}$ sei konstant auf den Elementen. Wir partitionieren Ω in $N \times N$ quadratische Teilgebiete mit jeweils $2 \cdot 10^2$ Elementen.

Teil 1
Implementieren Sie in Ihrem FETI-DP Programm die adaptive Berechnung der Nebenbedingungen nach Mandel und Sousedík mit dem Deflation-Ansatz aus der Vorlesung und testen Sie Ihre Implementierung an folgenden Problemen:

- Die hier dargestellten Gebietszerlegungen und Koeffizientenfunktionen (*Koeffizientenfunktion (i)-(iii)*):



Koeffizientenfunktion (i)
$N = 3$



Koeffizientenfunktion (ii)
$N = 5$

$$\rho = \begin{cases} 10^6, & \frac{16}{30} \geq x \geq \frac{14}{30} \;\wedge\; \frac{27}{30} \geq y \geq \frac{3}{30}, \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases} \qquad \rho = \begin{cases} 10^6, & \text{in } \Omega_i, i \in \{2, 3, 14, 17, 24, 25\}, \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Es ist $\rho = 10^6$ in dunkelgrau gefärbten Gebieten bzw. Elementen und sonst $\rho = 1$.

(iii) Zufalls-Koeffizientenfunktion mit $N = 5$, $\rho_{\min} = 1$ und $\rho_{\max} = 10^6$.

```
% Setze alle Koeffizienten der Elemente auf 'rhoMin'.
rho = rhoMin*ones(size(tri,1),1);

% Setze nun alle 'rhoMax' Koeffizienten.
rho(rand(length(rho),1) < 0.25) = rhoMax;
```

- Alle Eckknoten werden primal gewählt.
- Setzen Sie zunächst TOL $= 100$ zur Auswahl der Eigenwerte, d.h. konstruieren Sie zu jeder Eigenfunktion $w_{ij,k}$, die zu einem Eigenwert $\mu_{ij,k} \geq$ TOL gehört, den Vektor $u_{ij,k} := B_{D_{ij}} S_{ij} P_{D_{ij}} w_{ij,k}$. Diesen setzen Sie durch Null auf die restlichen Freiheitsgrade fort und schreiben ihn in eine Spalte der Matrix U, sodass in Ihrer Deflation-Implementierung die Nebenbedingung $u_{ij,k}^T B_\Delta w = 0$ erfüllt wird.
- Wählen Sie als Abbruchkriterium das **relative vorkonditionierte Residuum** mit einer Toleranz von 10^{-8}.
- Wählen Sie als Startvektor $\lambda^{(0)} := 0$.

Vergleichen Sie ähnlich wie in Aufgabe 1 die Anzahl der Iterationen und die Konditionszahl für die folgenden Vorkonditionierer: $M^{-1} = M_D^{-1}$ (Dirichlet-Vorkonditionierer) und $M^{-1} = M_{PP}^{-1}$ (Deflation mit adaptiven Nebenbedingungen). Nutzen Sie erneut die Konditionszahlschätzung des Lanczos-Prozess im PCG-Verfahren. Geben Sie zusätzlich für die Berechnung mit M_{PP}^{-1} den Fehler $||u - u_{\text{FETI-DP}}||_2$ an, wobei Sie u über die direkte Lösung des Globalsystems, d.h. mit `u = K\b` bestimmen. Geben Sie zudem für M_{PP}^{-1} jeweils die benötigte Anzahl an Nebenbedingungen für die entsprechenden Koeffizientenfunktionen an.

Teil 2
Untersuchen Sie numerisch

- die Abhängigkeit der Kondition des vorkonditionierten Problems $M_D^{-1}F$ (Dirichlet-Vorkonditionierer) vom Kontrast $\rho_{\max}/\rho_{\min}$ der Koeffizientenfunktion sowie

- die Abhängigkeit der Kondition des vorkonditionierten Problems $M_{PP}^{-1}F$ (Deflation-Vorkonditionierer mit adaptiven Nebenbedingungen) von der Wahl der Toleranz TOL.

Berechnen Sie dazu jeweils die 50 größten Eigenwerte des vorkonditionierten Systems $M^{-1}F$ für verschiedene Werte des Koeffizientenkontrasts $\rho_{\max}/\rho_{\min}$ sowie, im Falle des adaptiven Deflation-Vorkonditionierers, für verschiedene Werte der Toleranz TOL und stellen Sie diese geeignet graphisch dar.

Welche Beobachtungen können Sie machen und wie lassen sich die Ergebnisse im Einklang mit der Theorie aus der Vorlesung verallgemeinern?

Zwischenpräsentation Projekt 2: Dienstag, 31. Mai, 10:00 Uhr bzw. 12:00 Uhr.

Abgabe Code Projekt 2: Bis Donnerstag, 09. Juni 2022, 12:00 Uhr.

Abgabe ALLER Projektberichte: Bis Montag, 01. August, 12:00 Uhr.

Abschlusspräsentation: Dienstag, 13. September, 10:00 Uhr.