Serie 2, Teil 2

Theoretischer Hintergrund — Poisson-Problem

Der Laplace-Operator einer Funktion $u \in C^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{R})$ ist definiert durch

$$\Delta u \coloneqq \sum_{\ell=1}^{d} \frac{\partial^2 u}{\partial x_\ell^2}$$

Für ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ mit Rand $\partial\Omega$, eine Funktion $f \in C(\Omega; \mathbb{R})$ und eine Funktion $g \in C(\partial\Omega; \mathbb{R})$ beschreibt das Poisson-Problem die Suche einer Funktion u als Lösung der partiellen Differentialgleichung (PDE)

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f \quad \text{in } \Omega \\ u &= g \quad \text{auf } \partial\Omega. \end{aligned}$$

Im Rahmen des Projektpraktikums werden wir nur den Fall $\Omega = (0,1)^d$, $d \in \{1,2,3\}$ und $g \equiv 0$ betrachten.

Eine Möglichkeit diese PDE numerisch zu lösen besteht in der Disretisierung des Gebietes Ω und anschließender Diskretisierung des Laplace-Operators durch finite Differenzen. Dieser Ansatz führt auf ein lineares Gleichungssystem $A^{(d)}\hat{u} = b$, wobei der gesuchte Vektor $\hat{u} \in \mathbb{R}^N$ die Werte der Funktion u an den N inneren Diskretisierungspunkten approximiert.

Diskretisierung des Gebietes Im eindimensionalen Fall wird das Intervall $\Omega = (0,1)$ äquidistant in n Teilintervalle zerlegt. Es ergeben sich die inneren Diskretisierungspunkte $X_1 \coloneqq \{j/n \colon 1 \leq j \leq n-1\}$.

Für $d > 1$ ergeben sich Diskretisierungspunkte X_d als kartesisches Produkt, dass heißt $X_d \coloneqq X_1^d$. Beispielsweise ergeben sich für den zweidimensionalen Fall so die Punkte $X_2 = X_1 \times X_1 = \{(j/n, k/n) \colon 1 \leq j,k \leq n-1\}$.

Diskretisierung des Laplace-Operators Für $1 \leq \ell \leq d$ bezeichne e_ℓ den ℓ-ten Einheitsvektor in $\mathbb{R}^d$. Weiter sei für $x \in X_d$ die Abbildung $u_{x,\ell} \colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ gegeben durch

$$u_{x,\ell}(t) \coloneqq u(x + te_\ell).$$

Damit lässt sich die zweite partielle Ableitung von u in Richtung e_ℓ durch die aus Serie 1 bekannte finite Differenz zweiter Ordnung wie folgt approximieren. Es gilt

$$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_\ell^2} = u''_{x,\ell}(0) \approx \mathrm{D}_h^{(2)} u_{x,\ell}(0).$$

Der diskrete Laplace-Operator Δ_h von u ergibt sich dann als

$$\Delta_h u(x) := \sum_{\ell=1}^{d} \mathrm{D}_h^{(2)} u_{x,\ell}(0).$$

Da $h = 1/n$ gilt für $x \in X_d$, dass $x \pm he_\ell \in X_d \cup \partial\Omega$. Da $u = 0$ auf $\partial\Omega$ lässt sich also der diskrete Laplace-Operator von u durch die Werte an den benachbarten Diskretisierungspunkten approximieren.

Aufstellen des Linearen Gleichungssystems Die Approximation $\hat{u}$ soll die Lösung der diskretisierten PDE

$$\begin{aligned} -\Delta_h u(x) &= f(x) \quad && \forall x \in X_d \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega. \end{aligned}$$

an den N Diskretisierungspunkten repräsentieren. Durch die beschriebene Approximation des Laplace-Operators ergeben sich N lineare Gleichungen. Um diese als lineares Gleichungssystem zu schreiben muss jedem Diskretisierungspunkt $x \in X_d$ eindeutig eine Gleichungsnummer $m \in \{1, \ldots, N\}$ zugeordnet werden. Dazu seien die Diskretisierungspunkte $x = (x_1, \ldots, x_d) \in X_d$ und $y = (y_1, \ldots, y_d) \in X_d$ durch die Relation

$$x <_X y \iff \sum_{\ell=1}^{d} x_\ell \cdot 10^\ell < \sum_{\ell=1}^{d} y_\ell \cdot 10^\ell$$

geordnet (vgl. Abbildung 1 für $d = 2$). Die Gleichungen werden dann aufsteigend nach $<_X$ sortiert und die entstehende Matrix ist $h^{-2}A^{(d)}$. Der m-te Eintrag der gesuchte Lösung $\hat{u}$ des linearen Gleichungssystems ist dann eine Approximation der exakten Lösung u am m-ten Diskretisierungspunkt.

Aufgaben Teil 2

Verfassen Sie einen Bericht in LaTeX. Der Schwerpunkt dieses Bericht liegt in der Ausarbeitung der oben skizzierten Theorie. Es werden nur wenige Experimente durchgeführt und dokumentiert. Der Hauptteil der Experimente und der Auswertung erfolgt in Serie 3 und 5, wenn das Gleichungssystem gelöst wird.

Nehmen Sie insbesondere Bezug auf die nachfolgenden Aufgaben.

Aufgabe 2.2: Herleitung des linearen Gleichungssystems

- Entwickeln Sie eine Funktion $\mathrm{idx}\colon \{1, \ldots, n-1\}^d \to \{1, \ldots, N\}$, die zu einem Diskretisierungspunkt $x = (j_1/n, \ldots, j_d/n) \in X_d$ mit $j_\ell \in \{1, \ldots, n-1\}$, $\ell \in \{1, \ldots, d\}$ die zugehörige Gleichungsnummer $m \in \{1, \ldots, N\}$ berechnet.
- Entwickeln Sie auch eine explizite Darstellung für die Funktion idx^{-1}

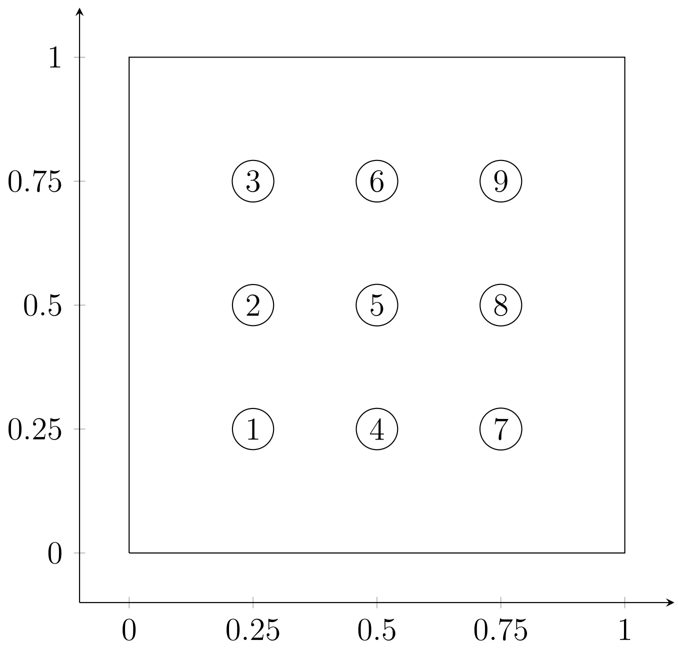

Abbildung 1: Diskretisierung des Einheitsquadrates für $n = 4$

- Leiten Sie ausführlich das Aufstellen der linearen Gleichungssysteme $A^{(d)}\hat{u} = b$ zur Lösung des Laplace-Problems mit Hilfe des Finite-Differenzen-Verfahrens in Abhängigkeit von der Funktion f auf der rechten Seite der PDE her.

  Gehen Sie insbesondere auf die Erstellung der rechten Seite b ein.

Aufgabe 2.3: sparse-Matrizen

Untersucht werden die Matrizen $A^{(d)}$.

- Untersuchen Sie analytisch, wie sich der Speicherplatzbedarf in Abhängigkeit von n und d verhält. Vergleichen Sie dabei die Speicherung als vollbesetzte bzw. als *sparse*-Matrix.
- Stellen Sie die Anzahl der Nicht-Null-Einträge in Abhängigkeit von n und d geeignet grafisch dar. Zeichnen Sie zusätzlich die Anzahl der Einträge in einer vollbesetzten Matrix in Abhängigkeit von n ein.

Aufgabe 2.4: Erweiterung der Implementation

Erweitern Sie ihre Klasse `BlockMatrix` aus Serie 2a um eine Methode `rhs(d,n,f)`, welche den Vektor $b \in \mathbb{R}^N$ zurück gibt. Die Schnittstellenbeschreibung finden Sie auf der folgenden Seite.

```python
def rhs(d, n, f):
    """ Computes the right-hand side vector `b` for a given function `f`.

    Parameters
    ----------
    d : int
        Dimension of the space
    n : int
        Number of intervals in each dimension
    f : callable
        Function right-hand-side of Poisson problem

    Returns
    -------
    array
        vector to the right-hand-side f

    Raises
    ------
    ValueError
        If d < 1 or n < 2

    """
```