KV Wissenschaftliches Rechnen, WS 2024/25

Hausübung 4

Einleitung In dieser Hausübung soll wieder die Klasse TridiagSparseMatrix<T> für Tridiagonalmatrizen verwendet werden, weiters kann der in der dritten Hausübung entwickelte LU-Solver verwendet werden. Es kann auch ein Löser für Tridiagonalsysteme aus anderer Quelle eingebunden werden, dies bitte im Protokoll festhalten.

Wir betrachten ein Problem der Akustik, nämlich die Berechnung von Eigenschwingungen/Eigenkreisfrequenzen einer gedeckten Pfeife. Als eindimensionales Modell für eine Pfeife der Länge $L = 0.5$ m mit Schallgeschwindigkeit $c = 343$ m/s gilt die Wellengleichung für die Longitudinalverschiebung, $u : (0, L) \to \mathbb{R}$ mit

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad u(0) = u(L) = 0. \tag{1}$$

Im Frequenzraum ergibt sich das Eigenwertproblem

$$\omega^2 u = -c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad u(0) = u(L) = 0. \tag{2}$$

Die Eigenkreisfrequenzen und Eigenformen lauten

$$u_i(x) = \sin(n\pi x/L), \qquad \omega_i = cn\pi/L. \tag{3}$$

Wir betrachten eine Finite-Elemente-Diskretisierung auf einem äquidistanten Gitter bestehend aus n_e Elementen, und $n = n_e - 1$ Netzpunkten $x_i = (i+1)L/n_e$ für $i = 0 \ldots n$. Die Netzfeinheit ist somit $h = L/n_e$. Ohne näher auf die Details der FE-Modellierung einzugehen, erhalten wir ein verallgemeinertes Eigenwertproblem der Form

$$\lambda \mathbf{M}\boldsymbol{u} = \mathbf{K}\boldsymbol{u}. \tag{4}$$

Dabei enthält der Lösungsvektor $\boldsymbol{u}$ die Näherungswerte $u(x_i)$ in den Gitterpunkten x_i, der Eigenwert entspricht der quadratischen Eigenkreisfrequenz $\lambda = \omega^2$, und Steifigkeits- sowie Massenmatrix haben Tridiagonalform,

$$K_{ii} = \frac{2c^2}{h}, \qquad K_{i\,i-1} = K_{i-1\,i} = -\frac{c^2}{h}, \tag{5}$$

$$M_{ii} = \frac{4h}{6}, \qquad M_{i\,i-1} = M_{i-1\,i} = \frac{h}{6}. \tag{6}$$

Abzugeben sind

- sämtlicher Quellcode, der für die Aufgaben entwickelt wurde, (Header aus der LVA-Bibliothek brauchen nicht abgegeben werden),
- Protokoll als `.pdf` File.

Aufgabe 1 (Berechnen einzelner Eigenmoden) – 4 Punkte Setzen Sie die einfache inverse Iteration mit Shift *unter Verwendung des LVA-Frameworks, NICHT der Eigen-Lib* so um, dass

- die erste Eigenform u_1 mit Eigenkreisfrequenz ω_1 (Grundton), bzw
- die zehnte Eigenform u_{10} mit Eigenkreisfrequenz ω_{10} (Oberton) bestimmt wird.

Der Shift-Parameter muss dabei entsprechend geeignet gewählt werden. Verwenden Sie zur Implementierung der Inversen der Steifigkeitsmatrix bzw. der geshifteten Matrix idealerweise die LU-Faktorisierung aus der dritten Hausübung, alternativ kann auch ein geeignetes iteratives Verfahren gewählt werden.

Dokumentieren Sie im Protokoll:

1. Diskretisierung mit $n = 100$ Unbekannten, kein Shift: Welche Eigenfrequenz ω wird berechnet? Wie groß ist der Fehler im Vergleich zum analytischen Wert? Wie viele Iterationen benötigen Sie? Stellen Sie die Eigenform graphisch dar!

2. Berechnung von ω_{10}: Welchen Shift-Parameter wählen Sie? Wie viele Unbekannte n brauchen Sie etwa, um die Eigenkreisfrequenz ω_5 auf 0.1% Genauigkeit zu errechnen? Wie viele Iterationen benötigen Sie (wählen Sie dazu die Toleranz geeignet und geben Sie diese an)? Stellen Sie die Eigenform graphisch dar!

Punkteverteilung

- 1 Punkt – Korrektes Aufstellen von $\boldsymbol{u}$, $\mathbf{K}$ und $\mathbf{M}$ als Tridiagonalmatrix,
- 1 Punkt – Umsetzen der Inversen Iteration mit Shift,
- 1 Punkt – Umsetzung und Ausarbeitung Frage 1 oben,
- 1 Punkt – Umsetzung und Ausarbeitung Frage 2 oben.

Hinweis um LU-Solver: Die Umsetzung des Tridiag-LU-Solvers wird in dieser HÜ nicht bewertet, daher darf auch Source-Code, der von Dritten zur Verfügung gestellt wird, verwendet werden.

Hinweis zur Wahl des Shift-Parameters: Bei Verwendung des eigenen Tridiagonal-LU-Solvers beachten Sie, dass keine Pivotsuche implementiert ist. Der LU-Solver funktioniert nicht für singuläre Matrizen, uU schlecht für das Problem mit Shift. In diesem Fall sollte eine leichte Änderung des Shift-Parameters Abhilfe schaffen. Bei Verwendung des CG-Solvers beachten Sie, dass dieser nur für positiv definite Matrizen geeignet ist.

Aufgabe 2 (Berechnung mehrer Eigenmoden) – 4 oder 6 Punkte Setzen Sie die beschleunigte inverse Iteration zur Errechnung mehrerer Eigenmoden so um, dass die kleinsten $m = 5$ Eigenkreisfrequenzen und -moden gleichzeitig berechnet werden. Verwenden Sie dazu wieder das LVA-Framework, nicht die Eigen-Lib. In jedem Schritt muss ein $2m \times 2m$ verallgemeinertes Eigenwertproblem gelöst werden. Dabei haben Sie zwei Varianten zur Wahl

- für das $2m \times 2m$ verallgemeinerte Eigenwertproblem (und nur hier) rufen Sie die Eigen-Lib auf wie in der LVA, oder
- für das $2m \times 2m$ verallgemeinerte Eigenwertproblem wählen Sie eine geeignete LAPACK-Routine und binden diese ein.

Berechnen Sie die kleinsten 5 Eigenkreisfrequenzen und -moden auf einem Gitter mit $n = 100$ Unbekannten. Stellen Sie diese graphisch dar und geben Sie den relativen Fehler für die einzelnen ω_i an.

Führen Sie im Protokoll aus, wie Anfangswerte gewählt wurden, ob ein Shift notwendig war/-durchgeführt wurde, wieviele Iterationen für die von Ihnen gewählte Toleranz notwendig waren. Falls LAPACK verwendet wurde, geben Sie an welche Routine gewählt wurde, begründen Sie Ihre Wahl!

Punkteverteilung

- entweder 2 Punkte – Umsetzen der beschleunigten inversen Iteration unter Verwendung Eigen-Lib für das $2m \times 2m$ Problem,
- oder 4 Punkte – Umsetzen der beschleunigten inversen Iteration unter Verwendung LAPACK für das $2m \times 2m$ Problem,
- 2 Punkte – Berechnung der Eigenformen und deren Darstellung.

Zusatzaufgabe *Diese Aufgabe ersetzt die mündliche Prüfung durch ein Prüfungsgespräch zu Ihrer Ausarbeitung und dem QR-Verfahren. Wenn Sie planen, diese Möglichkeit wahrzunehmen, schreiben Sie mir dazu ein Mail zur Information. Keine Gruppenarbeit!*

Entwickeln Sie einen Lösungsalgorithmus für das $2m \times 2m$ verallgemeinerte Eigenwertproblem

$$\lambda \mathbf{M}_s \boldsymbol{y} = \mathbf{K}_s \boldsymbol{y}. \tag{7}$$

Dazu verwenden Sie die QR-Iteration mit Beschleunigung durch Arnoldi-Iteration sowie Shift-Strategie für die vollbesetze, nichtsymmetrische Matrix $\mathbf{M}_s^{-1}\mathbf{K}$. Die Eigenvektoren $\boldsymbol{y}$ müssen ebenfalls bestimmt werden. Dazu sind in etwa folgende Schritte notwendig:

- die Transformationsmatrix $\mathbf{V}$ aus dem Arnoldi-Algorithmus muss berechnet werden,
- sämtliche Transformationsmatrizen $\mathbf{Q}^{(k)}$ aus dem QR-Algorithmus müssen darauf von rechts angewandt werden,
- die Eigenvektoren $\mathbf{W}$ der Dreiecksmatrix $\mathbf{T}$, die der QR-Algorithmus liefert, müssen berechnet werden, und die Rotationsmatrix aus den ersten beiden Punkten entsprechend darauf angewendet.

Aufgrund der Struktur des Problems ($\mathbf{K}$ und $\mathbf{M}$ sind reell symmetrisch) dürfen Sie dabei annehmen, dass alle Eigenwerte reell sind und alle Eigenräume maximale Dimension haben, d.h. die Eigenvektoren der Dreiecksmatrix $\mathbf{T}$ auch tatsächlich berechnet werden können.

Halten Sie alle Schritte im Protokoll fest!