

Abschlussprojekt: Space-Time B-Splines

In diesem Projekt soll für $d \in \{1, 2\}$ die Wärmeleitungsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u &= f && \text{in } (0, T] \times \Omega := (0, T] \times (0, 1)^d \\ u &= 0 && \text{auf } (0, T] \times \Gamma := (0, T] \times \partial\Omega \\ u &= u_0 && \text{auf } \{0\} \times \Omega \end{aligned} \tag{1}$$

mit einer Raum-Zeit-Methode basierend auf Tensorprodukt B-Splines gelöst werden. Die Lösung $u(t, x)$ hängt dabei von der Zeitkoordinate t und der Ortskoordinate x ab.

Zunächst wird eine schwache Formulierung von (1) gesucht. Hierzu wird die Gleichung mit einer glatten Testfunktion v multipliziert und über $(0, T) \times \Omega$ integriert. Partielle Integration der beiden Summanden führt zu

$$\begin{aligned} \int_{(0,T)} \int_{\Omega} f(t, x)v(t, x) \, dx \, dt &= \int_{(0,T)} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x)v(t, x) - \Delta u(t, x)v(t, x) \, dx \, dt \\ &= \int_{(0,T)} \int_{\Omega} -u(t, x)\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + \nabla_x u(t, x) \cdot \nabla_x v(t, x) \, dx \, dt \\ &\quad + \int_{\Omega} u(T, x)v(T, x) - u_0(x)v(0, x) \, dx - \int_{(0,T)} \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n}(t, x)v(t, x) \, d\Gamma(x) \, dt \end{aligned}$$

Der letzte Term verschwindet, wenn wir die homogene Dirichlet-Randbedingung auch für die Testfunktion fordern, also $v = 0$ auf $(0, T] \times \Gamma$. Da der Endzustand $u(T, \cdot)$ unbekannt ist, fordern wir, dass $v(T, \cdot) = 0$. Dies führt auf die *natürliche* schwache Raum-Zeit Formulierung:

$$\text{Finde } u \in \mathcal{X} : \quad b(u, v) = L(v) \quad \forall v \in \mathcal{Y}, \tag{2}$$

wobei $\mathcal{X} := L_2((0, T); H_0^1(\Omega))$ und $\mathcal{Y} := \{v \in L_2((0, T); H_0^1(\Omega)) \cap H^1((0, T); H_0^1(\Omega)') : v(T) = 0\}$. Die Bilinearform b und die Linearform L sind gegeben durch

$$b(u, v) = \int_{(0,T)} \int_{\Omega} -u(t, x)\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + \nabla_x u(t, x) \cdot \nabla_x v(t, x) \, dx \, dt, \tag{3}$$

$$L(v) = \int_{(0,T)} \int_{\Omega} f(t, x)v(t, x) \, dx \, dt + \int_{\Omega} u_0(x)v(0, x) \, dx. \tag{4}$$

Der *Bochner-Raum* $L_2((0, T); H_0^1(\Omega))$ enthält hilbertraumwertige Funktionen. Das heißt, jedes $v \in L_2((0, T); H_0^1(\Omega))$ ist eine Funktion $v: (0, T) \rightarrow H_0^1(\Omega)$, die als Funktion $(v(t))(x) = v(t, x)$ aufgefasst werden kann. Dabei ist v quadrat-integrierbar, also $\int_{(0,T)} \|v(t)\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \, dt < \infty$. Da L_2 und H_0^1 Hilberträume sind, ist die Norm von $L_2((0, T); H_0^1(\Omega))$ durch das Skalarprodukt $(u, v)_{L_2((0,T); H_0^1(\Omega))} := \int_{(0,T)} (u(t), v(t))_{H_0^1(\Omega)} \, dt$ induziert.

In der schwachen Formulierung (2) unterscheidet sich der Lösungsraum \mathcal{X} vom Testraum \mathcal{Y} . Verfahren dieser Art werden *Petrov-Galerkin-Verfahren* genannt. Es fällt auf, dass $\mathcal{Y} \subset \mathcal{X}$, sodass bei einer praktischen Realisierung ein unterbestimmtes Gleichungssystem entstehen könnte. Deswegen, und um ein stabiles Verfahren zu erhalten, wird der Testraum feiner als der Lösungsraum diskretisiert.

Seien $S_J \subset \mathcal{X}$ und $Q_\ell \subset \mathcal{Y}$ endlichdimensionale Räume zu den Leveln $J, \ell \in \mathbb{N}$. Die diskrete Lösung $u_J \in S_J$ ist charakterisiert durch

$$u_J = \arg \min_{v \in S_J} \sup_{0 \neq q \in Q_\ell} \frac{|b(v, q) - L(q)|}{\|q\|_{\mathcal{Y}}}. \tag{5}$$

Auf den diskreten Räumen können, nach Wahl einer Basis, die Bilinearform b durch eine Matrix \mathbf{B} mit $b(v, q) = \mathbf{q}^T \mathbf{B} \mathbf{v}$ und die Linearform L durch einen Vektor \mathbf{f} mit $L(q) = \mathbf{q}^T \mathbf{f}$ dargestellt werden. Die Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{Y}}$ kann

auf dem diskreten Raum Q_ℓ durch eine Gram-Matrix (Riesz-Operator) \mathbf{R} mittels $\|q\|_{\mathcal{Y}} = \sqrt{\mathbf{q}^T \mathbf{R} \mathbf{q}}$ bestimmt werden. Letztere repräsentiert das $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{Y}}$ -Skalarprodukt auf Q_ℓ : $(q, w)_{\mathcal{Y}} = \mathbf{q}^T \mathbf{R} \mathbf{w}$ für alle $q, w \in Q_\ell$.

Mit diesen Definitionen ist (5) äquivalent zu

$$\mathbf{u}_J = \arg \min_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{\dim(S_J)}} \|\mathbf{B} \mathbf{v} - \mathbf{f}\|_{\mathbb{R}^{-1}}, \quad (6)$$

wobei $\|\mathbf{v}\|_{\mathbb{R}} := \sqrt{(\mathbf{v}, \mathbf{R} \mathbf{v})_{\mathbb{R}^{\dim(S_J)}}} := \sqrt{\mathbf{v}^T \mathbf{R} \mathbf{v}}$. Das Minimierungsproblem (6) ist äquivalent zu der modifizierten Normalengleichung

$$\mathbf{B}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{u}_J = \mathbf{B}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{f}. \quad (7)$$

Der Riesz-Operator \mathbf{R} repräsentiert das Skalarprodukt von \mathcal{Y} auf Q_ℓ :

$$(q, w)_{\mathcal{Y}} = (q, w)_{L_2((0,T);H_0^1(\Omega))} + (q, w)_{H^1((0,T);H_0^1(\Omega)')} = \mathbf{q}^T \mathbf{R} \mathbf{w}. \quad (8)$$

Für den Riesz-Operator $\mathbf{R}_{H_0^1(\Omega)'}$ von $H_0^1(\Omega)'$ gilt

$$\mathbf{R}_{H_0^1(\Omega)'} = \mathbf{R}_{L_2(\Omega)} \mathbf{R}_{H_0^1(\Omega)}^{-1} \mathbf{R}_{L_2(\Omega)}, \quad \mathbf{q}^T \mathbf{R}_{H_0^1(\Omega)} \mathbf{w} = (q, w)_{H_0^1(\Omega)}, \quad \mathbf{q}^T \mathbf{R}_{L_2(\Omega)} \mathbf{w} = (q, w)_{L_2(\Omega)}. \quad (9)$$

Sei im Folgenden die Endzeit $T = 1$ festgesetzt, sodass $(0, T) \times \Omega = (0, 1)^{d+1}$. Als diskrete Teilräume S_J und Q_ℓ werden Tensorprodukt B-Splines auf uniformen Gittern mit Gitterweite 2^{-J} bzw. $2^{-\ell}$ verwendet. Sei $\mathcal{S}_{j,k} := \text{span}\{N_{i,k} : i = 1, \dots, 2^j + k - 1\}$ der Raum der B-Splines der Ordnung k auf einem erweiterten Knotenvektor mit Abstand 2^{-j} zum Intervall $[0, 1]$. Seien weiter $\mathcal{S}_{j,k}^{(00)} := \text{span}\{N_{i,k} : i = 2, \dots, 2^j + k - 2\}$ und $\mathcal{S}_{j,k}^{(0)} := \text{span}\{N_{i,k} : i = 1, \dots, 2^j + k - 2\}$. Dann ist eine stabile Diskretisierung durch Räume der Form $S_{J,k} = \mathcal{S}_{J,k} \times (\mathcal{S}_{J,k}^{(00)})^d$ und $Q_{J+1,\ell} = \mathcal{S}_{J+1,\ell}^{(0)} \times (\mathcal{S}_{J+1,\ell}^{(00)})^d$ gegeben.

Betrachten Sie das Problem (1) mit Endzeit $T = 1$, den Daten $u_0^{(d)}$, $f^{(d)}$ und exakten Lösungen $u^{(d)}$:

$$\begin{aligned} u^{(1)}(t, x) &= \cos(2\pi t) \sin(3\pi x), & u^{(2)}(t, \mathbf{x}) &= \cos(2\pi t) \sin(3\pi x_1) \sin(2\pi x_2), \\ f^{(1)}(t, x) &= \pi (9\pi \cos(2\pi t) - 2 \sin(2\pi t)) \sin(3\pi x), & f^{(2)}(t, \mathbf{x}) &= \pi (13\pi \cos(2\pi t) - 2 \sin(2\pi t)) \sin(3\pi x_1) \sin(2\pi x_2), \\ u_0^{(1)}(x) &= \sin(3\pi x), & u_0^{(2)}(\mathbf{x}) &= \sin(3\pi x_1) \sin(2\pi x_2). \end{aligned}$$

Verwenden Sie für alle Nummerierungen die lexikographische Sortierung. Nutzen Sie so oft es geht die Tensorprodukt-Struktur aus.

Aufgaben

- Zeigen Sie die Äquivalenz von (5), (6) und (7).
- Schreiben Sie eine Funktion $\mathbf{A} = \text{MatAssembly1D}(\text{knots}, \text{order}, \text{diff}, \text{startI}, \text{endI})$, welche die Matrix $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j=\text{startI}}^{\text{endI}}$ mit

$$a_{ij} = \int_a^b N_{j,k}^{(\text{diff}_1)} N_{i,k}^{(\text{diff}_2)} dx \quad i, j = \text{startI}, \dots, \text{endI}$$

aufbaut, wobei diff ein Vektor der Länge 2 mit den Ableitungsgraden ist. Der erweiterte Knotenvektor wird in knots und die B-Spline Ordnung in order übergeben. Beachten Sie, dass nur die B-Splines mit $i, j = \text{startI}, \dots, \text{endI}$ in der Matrix berücksichtigt werden.

- Schreiben Sie eine Funktion $\mathbf{R} = \text{RieszOp}(\text{knots}, \text{order}, \text{startI}, \text{endI})$, welche den Riesz-Operator \mathbf{R} nach (9) aufbaut. Hier sind startI und endI Vektoren der Länge $d + 1$, die für jede Dimension den Start- und End-Index der B-Spline Basisfunktionen angeben.
- Schreiben Sie eine Funktion $\mathbf{B} = \text{BMat}(\mathbf{d}, \text{knotsSol}, \text{orderSol}, \text{knotsTest}, \text{orderTest})$, welche die Matrix \mathbf{B} aus (3) aufbaut. Der Lösungsraum S_J ist dabei durch knotsSol , orderSol und der Testraum Q_ℓ durch knotsTest , orderTest festgelegt. Die Dimension des Raumes wird mit \mathbf{d} übergeben.

- e) Schreiben Sie eine Funktion $\mathbf{f} = \text{FVek}(\mathbf{d}, \text{knotsTest}, \text{orderTest})$, welche den Vektor \mathbf{f} aufbaut. Wählen Sie dabei die korrekten Daten anhand der Dimension \mathbf{d} und nutzen Sie die Tensorprodukt-Struktur der Daten.
- f) Schreiben Sie eine Funktion $\mathbf{u} = \text{SolvePG}(\mathbf{d}, \text{tol}, \text{knotsSol}, \text{orderSol}, \text{knotsTest}, \text{orderTest})$, welche die modifizierte Normalgleichung (7) mittels eines CG-Verfahrens löst. Das CG-Verfahren soll abgebrochen werden, wenn das Residuum die Toleranz tol erreicht. Verwenden Sie die Matlab-Funktion $\text{pcg}()$.
- g) Schreiben Sie ein Matlab-Programm, welches für $d \in \{1, 2\}$, die Level $J = 2, 3, 4, 5$ und die Ordnungen $k = \text{orderSol} = 2, 3, 4$ Problem (1) mit den obigen Daten löst. Fixieren Sie $\ell = \text{orderTest} = 2$ und lösen Sie das diskrete System jeweils bis auf Diskretisierungsfehlergenauigkeit (ggf. zuzüglich eines Toleranzfaktors). Berechnen Sie für jede Ordnung und jede Dimension den $L_2([0, 1]^{d+1})$ -Fehler und erstellen Sie damit einen doppelt-logarithmischen Konvergenzplot (Fehler gegen Gitterweite 2^{-J}), wobei die Kurven der verschiedenen Ordnungen in einen gemeinsamen Plot pro Dimension d abgetragen werden sollen. Berechnen Sie empirische Konvergenzraten und geben Sie für jede Dimension eine Tabelle mit den Raten der einzelnen Ordnungen aus.

Hinweise:

- Die obige Aufteilung in einzelne Funktionen kann zur mehrfachen Berechnung der eindimensionalen Matrizen führen. Sie können stattdessen auch eine weniger modulare Variante programmieren, die dafür effizienter funktioniert.
- Das CG-Verfahren benötigt nur Matrix-Vektor Produkte. Dies kann ausgenutzt werden, um die Matrix $\mathbf{R}_{H_0^1(\Omega)}$ in (9) nicht invertieren zu müssen. Es genügt nun, ein Gleichungssystem mit $\mathbf{R}_{H_0^1(\Omega)}$ zu lösen, was deutlich schneller ist als die gesamte Matrix zu invertieren.
Da $\mathbf{R}_{H_0^1(\Omega)}$ symmetrisch und positiv definit ist, könnte dieses Gleichungssystem ebenfalls näherungsweise mit dem CG-Verfahren gelöst werden.
- Eine Funktion zur Tensorprodukt-Gauß-Quadratur für 3 Dimensionen wird bei Bedarf bereitgestellt.

Literatur

- [Mol16] Christian Mollet. „Parabolic PDEs in Space-Time Formulations: Stability for Petrov-Galerkin Discretizations with B-Splines and Existence of Moments for Problems with Random Coefficients“. Diss. Universität zu Köln, Juli 2016.