

Tentamen Computational Methods of Science

27 okt 2008

10 L^2_{xy}

$$\boxed{I}(a) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial xy} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}}_{\text{"div"}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -1/2 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix}}_A \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}}_{\text{grad} u} u = zxy \equiv f(x,y)$$

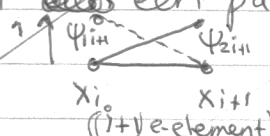
10 b) $a=1$ $b=-1/2$ $c=1$ $b^2 - ac = 1/4 - 1 = -3/4 < 0$ namelijk $\lambda_1 = 1/2$ $\lambda_2 = -3/2$
 Dus deze ~~oors~~ diff vgl is elliptisch. (Bovendien eigenwaarden van $A > 0$)
 We onderscheiden hyperbolische, elliptische en parabolische
~~oors~~ vergelijkingen omdat elke klasse een andere numerieke
 aanpak nodig heeft en er andere randvoorwaarden nodig zijn.

10 c) Vier, ("voor de hoogste orde afgeleiden in elke richting, een ~~te~~ voor elke keer ~~afleiden~~/integreer") randvoorwaarde

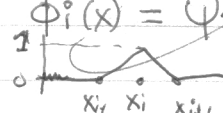
10 d) (i) Verdeel het domein in stukken:



Nu kun je op elk element ~~ook~~ een paar basisfuncties definiëren. In het lineaire geval: $\psi_{1,i}$ $\psi_{2,i}$. Deze $\psi_{1,i}$ en $\psi_{2,i}$ zijn



buiten dit interval gelijk aan nul. Nu maken we de (ii) globale basisfuncties $\phi_i(x) = \psi_{1,i}(x) + \psi_{2,i}(x)$. Deze zijn continu en zien er zo uit:



Nu geldt dus $\phi_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{als } i=j \\ 0 & \text{als } i \neq j \end{cases}$

10 (iii) We zoeken een benadering ^(van u) $u = \sum_{i=0}^n c_i \phi_i(x)$. Maar omdat deze benadering ^(bijna altijd) niet voor elke x goed kan zijn, willen we dat

$0 = (\phi_i, L u - f)$ voor elke $i=0, \dots, n$. Hierbij zijn ϕ_i nu de testfunctie en is de testruimte dus hetzelfde als de zoek ruimte.

$$L u = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sum_{i=0}^n c_i \phi_i(x) - \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \sum_{i=0}^n c_i \phi_i(x) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \sum_{i=0}^n c_i \phi_i(x)$$

~~En we krijgen het lineaire systeem~~
 Dus we krijgen het lineaire systeem

We willen voor elke i dus:

$$(\phi_i, L\hat{u}) - (\phi_i, f) = 0$$

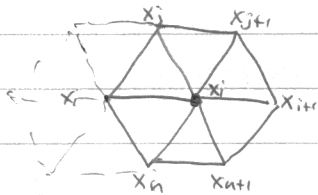
$$\Rightarrow (\phi_i, \sum_{j=1}^n c_j \frac{\partial^2 \phi_j}{\partial x^2 \partial y} (x,y) - \sum_{j=1}^n c_j \frac{\partial^2 \phi_j}{\partial x \partial y} \phi_j(x,y) + \sum_{j=1}^n c_j \frac{\partial^2 \phi_j}{\partial x \partial y} \phi_j(x,y)) - (\phi_i, f) = 0$$

$$\Rightarrow (\phi_i, \sum_{j=1}^n c_j (\phi_{jxx} - \phi_{jxy} + \phi_{jyy})) - (\phi_i, f) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^n c_j (\underbrace{\phi_i, \phi_{jxx} - \phi_{jxy} + \phi_{jyy}}_{\text{noem dit } a_{ij}}) - \underbrace{(\phi_i, f)}_{b_i} = 0$$

Vicn, Dan krijg je het lineaire systeem $A\bar{c} = \bar{b}$
 met $A = (a_{ij})$, $\bar{b} = (b_i)$ en $\bar{c} = (c_1, \dots, c_n)^T$.

(i) Verdeel het domein in driehoekjes, en nummer de punten:



Nu maken we op elk driehoekje Δ die lineaire basisfuncties $\phi_1(x,y)$ is dan gelijk

aan 1 in \bar{x}_1 , maar 0 in \bar{x}_2 en \bar{x}_3 , en

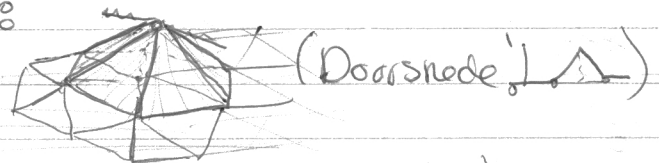
lineair daartussen, $\phi_2(x_2) = 1$ $\phi_2(x_1 \text{ of } x_3) = 0$

en $\phi_3(x_3) = 1$ en $\phi_3(x_1 \text{ of } x_2) = 0$ ($\phi(x,y)$ is buiten driehoekje)

(ii) De globale basisfuncties zien eruit als tenten. ~~ze zijn kubus~~

De basisfunctie ϕ_i heeft dan de waarde 1 is x_i , en 0 in alle andere punten. In de zes omliggende driehoekjes neem je de juiste lokale basisfuncties en in alle andere driehoekjes is ϕ_i nul.

Dus 't ziet er ongeveer zo uit:



Nu maken we (meer)

$$\hat{u} = \sum_{i=1}^n c_i \phi_i(x,y), \text{ zie verder op vorige pagina, vraag 1(d)(iii)}$$

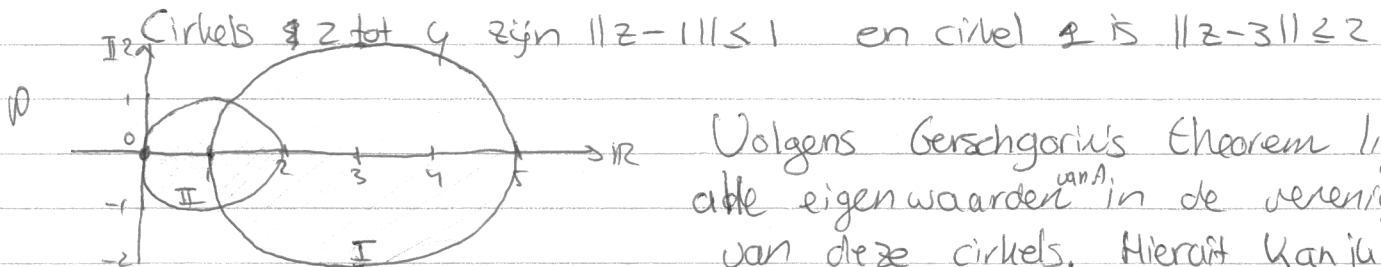
2(a) $r_1 = |0| + |-1| + |-1| = 1+1=2$ $r_i = \sum_{j=1}^n |p_{ij}|$

$r_2 = |0| + |-1| + |0| = 1$

$r_3 = |0| + |-1| + |0| = 1$

$r_4 = |-1| + |0| + |0| = 1$

Maak cirkels/schijven $\|z - a_{ii}\| \leq r_i$



Volgens Gerschgorin's Theorem liggen alle eigenwaarden ^{van A} in de vereniging van deze cirkels. Hieruit kan ik

afleiden dat de eigenwaarden ook allemaal in $\|z-0\| \leq 5$ liggen want cirkel I en II liggen daarbinnen. Dus de spectrale radius van deze matrix is ≤ 5 .

(b) Verwissel rij 2 en 3, en ook kolom 2 en 3 met permutatiematrix $P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. Dan ziet PAP^T er zo uit:

$$PAP^T = \begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot P^T = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Hierbij is PAP^T duidelijk van de vorm $\begin{pmatrix} A_1 & S \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}$, met A_1 en A_2 vierkant en $0 = \mathbb{E}$ nulmatrix, dus A is reducibel.

(c) Yes/ja. Taussky's theorem vertelt ons dat als de matrix A irreducibel is, ~~de~~ ^{een} eigenwaarde van A alleen op de rand van de vereniging van Gerschgorin-cirkels kan liggen als elke Gerschgorin cirkel door dat punt gaat. Nu ligt ~~de~~ ^{het} punt 0 wel op de rand van cirkel II, maar niet in cirkel I. Dus als A irreducibel zou zijn, zou 0 geen eigenwaarde kunnen zijn. Echter, A is reducibel, dus kunnen we Taussky's theorie helemaal niet gebruiken en dus ook niets zeggen over of A wel of niet de eigenwaarde 0 zou kunnen hebben.

(d) Voor toepassingen die bijvoorbeeld over iets als concentraties van stoffen gaat. Bij zulke toepassingen wil je graag dat al

$\bar{b} \geq 0$ dat dan $A\bar{x} = \bar{b}$ een ~~positieve~~ niet-negatieve oplossing \bar{x} heeft. Voor een monotone A geldt dat A^{-1} bestaat en niet-negatief is. Dus dan is $\bar{x} = A^{-1}\bar{b}$ ook niet-negatief, zelfs als je \bar{b} niet helemaal ~~positief~~ (maar wel nog $\bar{b} \geq 0$) met het echte systeem ~~(discretisatiefouten en afneefouten)~~ (maar wel nog $\bar{b} \geq 0$) met het echte systeem ~~(discretisatiefouten en afneefouten)~~ (door discretisatiefouten en afneefouten).

3 (a) Forward Euler: sketch:

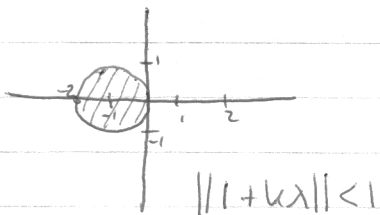


fig 1

Backward Euler: sketch

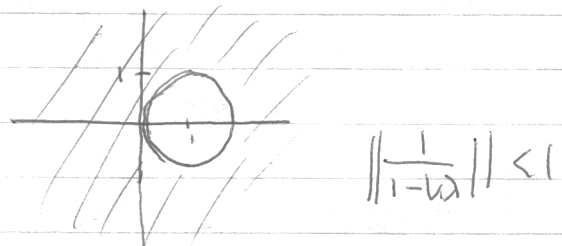


fig 2

Stel er is gegeven $U_t = AU + b^{(t)}$ en $U(0) = U_0$ ^{benadering}
 Dan benaderen/discretiseren ~~we~~ ^{schied oplossing} $u(t)$ met iteraties $u^{(t)}$, tijdstapjes k .

Forward Euler $U^{(t)} = U^{(t-1)} + k \cdot U_t(t-1) = U^{(t-1)} + kAU^{(t-1)} + kb^{(t-1)}$

Backward Euler $U^{(t)} = U^{(t-1)} + k \cdot U_t(t) = U^{(t-1)} + kAU^{(t)} + kb^{(t)}$

• Forward Euler $U^{(t)} = (I + kA)U^{(t-1)} + kb^{(t-1)}$

~~we~~ Fout op tijdstip t : $\bar{e}_t = U^{(t)} - u(t) = (I + kA)U^{(t-1)} + kb^{(t-1)} - u(t)$
 $= (I + kA)U^{(t-1)} - (I + kA)u^{(t-1)} + (I + kA)u^{(t-1)} + kb^{(t-1)} - u(t)$
 $= (I + kA)\bar{e}_{t-1} + \underbrace{u^{(t-1)} - u(t)}_{=0} + \underbrace{kU_t(t-1)}_{\approx -(u^{(t-1)} - u(t))}$
 $\approx (I + kA)\bar{e}_{t-1}$

10

~~We willen dat de fout niet groeit,~~

Diagonaliseer $I + kA$ met matrix P : $P^{-1}(I + kA)P = D = \text{diag}(\lambda_i \text{ van } I + kA)$

dan krijgen we scalar vergelijkingen:

$\tilde{e}_i^t = \tilde{\lambda}_i \tilde{e}_i^{t-1}$, voor $\tilde{\lambda}_i$ eigenwaarden van $I + kA$, dus als je de eigenwaarden λ_i van A bekijkt: $\tilde{e}_i^t = (1 + k\lambda_i) \tilde{e}_i^{t-1}$ ^(of zelfs afneemt)

We willen graag dat de fout niet groeit, dus dat $\|1 + k\lambda_i\| \leq 1$

Dus de eigenwaarden van A moeten aan $\|1 + k\lambda\| \leq 1$ voldoen, dus de $k\lambda$ moeten allemaal in de cirkel liggen die in geshetst heb in fig. 1.

~~$(I - kA)u^{(t)} = u^{(t-1)} + kb(t)$~~

~~is de numerieke oplossing~~

(3a) Backward Euler $u^{(t)} = u^{(t-1)} + kAu^{(t)} + kb(t)$ impliciet!

$\Rightarrow (I - kA)u^{(t)} = u^{(t-1)} + kb(t)$

Fout op tijdstip t : $\bar{e}_t = u^{(t)} - u(t) = u^{(t-1)} + kAu^{(t)} + kb(t) - u(t)$

$\Leftrightarrow \bar{e}_t - kAu^{(t)} + kAu(t) = u^{(t-1)} + kb(t) + (I + kA)u(t)$

$\Leftrightarrow \bar{e}_t - kA\bar{e}_t = \bar{e}_{t-1} + \underbrace{u(t-1) + kb(t) - u(t)}_{\approx 0}$

Dus $(I - kA)\bar{e}_t \approx \bar{e}_{t-1}$

$\bar{e}_t \approx (I - kA)^{-1} \bar{e}_{t-1}$

Weer diagonaliseren en zo geeft de scalar vgl-jes:

$\tilde{e}_i^{(t)} \approx \frac{1}{1 - k\lambda_i} \tilde{e}_i^{(t-1)}$ voor λ_i eigenwaarden van A .

We willen dat fout niet toeneemt: $\|\frac{1}{1 - k\lambda}\| \leq 1$.

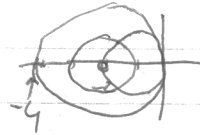
Daarom moeten de eigenwaarden van A voor de absolute stabiliteit bij Backward Euler buiten de cirkel $|1 - k\lambda| \leq 1$ liggen, zie fig. 2.

(3b) Als stabiel, dan gaat de fout uiteindelijk naar nul.

Ook de ~~oplossing~~ afgeleide van de oplossing wordt nul, dus $u \rightarrow 0$ dus $Au - b \rightarrow 0$ Dus $Au = b$

hoe weet je dat?

(c) Voor deze A liggen de eigenwaarden \in (m.b.v. Gerschgorin theoreem) tussen -4 en 0 .



~~Dus als~~
voor FE: $|1 + k\lambda| \leq 1$
 $-1 \leq 1 + k\lambda \leq 1$
 $-2 \leq k\lambda \leq 0$

Dus k maximaal $1/2$

voor BE ~~$|1 - k\lambda| \leq 1$~~

$\lambda \leq 0$ dus $-k\lambda \geq 0$ \Rightarrow geen restrictie op tijd step
dus $|1 - k\lambda| > 1 \forall k$

4) (a) Schrijf $x^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i v_i$ voor v_i eigenvector bij λ_i . Dit kan want A is ~~reëel~~ reëel en symmetrisch, dus A heeft een compleet set eigenvectoren, die \mathbb{R}^n opspannen.

$$\begin{aligned} \text{Nu is } x^{(n+1)} &= A x^{(n)} = A^n x^{(0)} = A^n \sum_{i=1}^n \alpha_i v_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i A^n v_i \\ &= \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^n v_i = \alpha_1 \lambda_1^n v_1 + \sum_{i=2}^n \alpha_i \lambda_i^n v_i \\ &= \alpha_1 \lambda_1^n v_1 + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^n v_i \end{aligned}$$

10

$\frac{\lambda_i}{\lambda_1} < 1$, dus $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^n \rightarrow 0$ als $n \rightarrow \infty$

Dus voor grote n geldt dat $x^{(n+1)}$ ongeveer $\alpha_1 \lambda_1^n v_1$ is, wat een constante maal v_1 is, dus $\alpha_1 \lambda_1^n v_1$ is ook een/eigenvector bij λ_1 .

Dus $x^{(n+1)}$ convergeert naar de eigenvector die hoort bij eigenwaarde λ_1 .

(Tussendoor de vector delen door z'n lengte zou wel handig zijn, anders wordt ie heel groot of klein). We nemen wel aan dat $\alpha_1 \neq 0$.

(b) Krylov subspace, m -dimensional, voor A en $u \in K_{(A,u)}^m = \text{span}\{u, Au, \dots, A^{m-1}u\}$
 $K^m(A, u) = K^m(\alpha A + \beta I, u)$, [want elke basisvector voor $K^m(\alpha A + \beta I, u)$ bij $(\alpha A + \beta I)^j u$, is een lin. comb. van $A^j v$ voor $j=0, \dots, i$].

Dus met verschuiven en schalen van A blijft Krylov subspace hetzelfde. De eigenwaarden verschuiven en schalen dan ook, maar alleen λ_{\min} en λ_{\max} zijn een kandidaat voor $\max |\lambda_i|$.

Omdat $A^n u$ naar de grootste eigenvector convergeert die bij de grootste (in abs. waarde) eigenwaarde hoort, is $\frac{1}{\lambda_1}$ de eigenwaarde bij λ_1 al snel rijk vertegenwoordigd in $K^m(A, u)$.

(als $(v_i, u) \neq 0$). Maar ook λ_n is vertegenwoordigd, omdat $K^m(A - \lambda_n I, u) = K^m(A, u)$ en van $A - \lambda_n I$ is λ_n de grootste eigenwaarde (in abs. waarde).

Dus deze twee eigenvectoren worden het eerst goed benaderd.

(c) Arnoldi

• Neem een v_k . Neem $v_1 = \frac{u}{\|u\|}$ en

$t = Av_1$. Orthonormaliseer met Gram-Schmidt methode zodat $\text{span}\{v_1, v_2\} = \text{span}\{u, t\}$, en $(v_1, v_2) = 0$ en $\|v_1\| = \|v_2\| = 1$

• Stel je hebt al k orthonormale vectoren. Neem $t = Av_k$.

10

Orthogonaliseer t , ^{om uit te vinden, met Gram-Schmidt} zodat $\text{span}(v_1, \dots, v_{k+1}) = \text{span}(v_1, \dots, v_k, t)$.

Dit is samen de vectoren als

$$V_j = [v_1, \dots, v_j]$$

$$AV_j = V_{j+1} \cdot \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} X$$

$R = H_{j+1,j}$, resultaat van Gram-Schmidt proces

Maar als $A = A^T$ dan $A = L^T L$ voor L onder/bovendriehoeksmatrix

$$V_j^T L^T L V_j = V_j^T A V_j = V_j^T V_{j+1} H_{j+1,j} = [I \ 0] H_{j+1,j} = H_{j,j} \quad (\text{eerste } j \text{ rijen van } H_{j+1,j})$$

Dus $(H_{j,j})^T = H_{j,j}$. Dus $H_{j,j}$ ^{moet} tridiagonaal zijn

(vanwege de nullen die er sowieso in staan)

Daarom is $H_{j+1,j}$ ook tridiagonaal.

Het voordeel hiervan is dat voor het orthogonaliseren je alleen de vorige twee vectoren hoeft te gebruiken. Dat gaat een stuk sneller (en makkelijker) dan wanneer je ze allemaal zou moeten gebruiken. \square