

Die uniform sparse FFT am Beispiel von PDEs mit zufälligen Koeffizienten

Viele moderne Problemstellungen führen zu partiellen Differentialgleichungen, deren Koeffizienten Unsicherheiten unterliegen, welche durch zufällige Parameter modelliert werden. Daher hat auch das numerische Lösen solcher Gleichungen für die Quantifizierung von Unsicherheit in den vergangenen Jahren zunehmende Aufmerksamkeit erhalten, insbesondere mit Fokus auf Effizienz, Zuverlässigkeit und Stabilität der Algorithmen. Ein übliches Beispiel ist das folgende parametrische, elliptische Problem, welches die Diffusion eines inhomogenen Materials beschreibt:

Seien die Gebiete $D \subseteq \mathbb{R}^d$, typischerweise mit $d = 1, 2$ oder 3 , und $D_{\mathbf{y}} \subseteq \mathbb{R}^{d_{\mathbf{y}}}$ sowie $a : D \times D_{\mathbf{y}} \rightarrow \mathbb{R}$ und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben. Dann finde $u : D \times D_{\mathbf{y}} \rightarrow \mathbb{R}$, so dass für alle $\mathbf{y} \in D_{\mathbf{y}}$ die Differentialgleichung

$$-\nabla \cdot (a(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla u(\mathbf{x}, \mathbf{y})) = f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in D, \mathbf{y} \in D_{\mathbf{y}}$$

mit der Randbedingung

$$u(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \quad \mathbf{x} \in \partial D, \mathbf{y} \in D_{\mathbf{y}}$$

gilt. Der Differentialoperator ∇ bezieht sich hierbei nur auf die Ortsvariable \mathbf{x} . Die Komponenten des Vektors \mathbf{y} sind jeweils eindimensionale, unabhängige, identisch verteilte Zufallsvariablen mit einer gegebenen Verteilung und die Dimension $d_{\mathbf{y}}$ des Vektors \mathbf{y} ist typischerweise sehr groß.

Wir präsentieren hier einen effizienten Algorithmus zur Lösung solcher Differentialgleichungen, die sogenannte *uniform sparse FFT* oder kurz *usFFT*. Ziel ist die Approximation der Lösung u auf einer Diskretisierung $\{\mathbf{x}_g \in D, g = 1, \dots, G\}, G < \infty$, des Ortsbereiches, welche beispielsweise ein Finite-Elemente-Gitter sein kann. Für jeden Diskretisierungspunkt \mathbf{x}_g ergibt sich eine Approximation

$$u_{\mathbf{x}_g}(\cdot) := u(\mathbf{x}_g, \cdot) \approx \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{I}} c_{\mathbf{k}}^{\text{usFFT}}(u_{\mathbf{x}_g}) e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \cdot}.$$

Der verwendete dimensions-inkrementelle Ansatz bestimmt hierbei adaptiv eine gute Frequenzmenge \mathbf{I} sowie die dazugehörigen approximierten Fourier-Koeffizienten $c_{\mathbf{k}}^{\text{usFFT}}(u_{\mathbf{x}_g}), \mathbf{k} \in \mathbf{I}$, simultan für alle Punkte $\mathbf{x}_g, g = 1, \dots, G$. Insbesondere benötigt die usFFT bis auf eine Kandidatenmenge $\Gamma \supset \mathbf{I}$ keine besonderen Annahmen oder Eingabewerte. Ferner ist die gefundene Frequenzmenge \mathbf{I} unabhängig von g und stellt damit uniform für alle $\mathbf{x}_g, g = 1, \dots, G$, eine gute Approximationsbasis. Der Algorithmus benötigt lediglich Auswertungen der Lösungen u an verschiedenen Punkten \mathbf{y} , welche mittels eines herkömmlichen PDE-Lösers berechnet werden können. Durch Austauschen dieses Lösers kann die usFFT daher leicht an veränderte Differentialgleichungen mit zufälligen Koeffizienten angepasst werden.

Wir testen den Algorithmus an Beispielen mit unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten $a(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ und gleichverteilten oder standardnormalverteilten Zufallsvariablen \mathbf{y} . Die Resultate wurden anschließend in simplen Fehlernormen auf Genauigkeit geprüft. Die ausgegebene Frequenzmenge \mathbf{I} sowie die approximierten Fourier-Koeffizienten $c_{\mathbf{k}}^{\text{usFFT}}(u_{\mathbf{x}_g}), \mathbf{k} \in \mathbf{I}$, ermöglichen insbesondere einen detaillierten Einblick in den Einfluss der einzelnen Komponenten von \mathbf{y} auf die Lösung u sowie deren Kopplungen untereinander.