# ${\bf Vorlesung smitschrift}$

# REDUZIERTE BASIS METHODEN

# UNIVERSITÄT STUTTGART, SS15 Prof. Dr. Bernard Haasdonk

AUTOREN: STAND: Stefan Simeonov 20. Juli 2015 Frank Schneider

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung 1.1 Modellreduktion	<b>2</b> 3
2	Grundlagen	8
3	RB-Methoden für lineare koerzive Probleme	17
	3.1 Primales RB-Problem	17
	3.2 Fehleranalyse	20
	3.3 Offline/Online-Zerlegung	31
	3.4 Basisgenerierung	
	3.5 Primal-Duale RB-Verfahren	
	3.6 Geometrieparametrisierung	74
4	Allgemeinere Lineare Probleme	82
	4.1 Allgemeine Parameterabhängigkeit	82
	4.2 Inf-sup stabile Probleme	
5	Nichtlineare Probleme	98
6	Zeitabhängige Probleme	102

# 1 Einleitung

#### Parameterabhängige Probleme

Beispiel 1.1 (Parameterabhängige PDE)

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$  polygonales Gebiet. Zu Parametervektor  $\mu \in \mathcal{P} \subset \mathbb{R}^p$  aus einer Menge  $\mathcal{P}$  von "erlaubten" Parametern ist eine Funktion (z. B. "Temperatur")  $u(\mu) : \Omega \to \mathbb{R}$ , s. d.:

$$\nabla \cdot (\kappa(\mu)\nabla u) = q(\mu) \qquad \text{in } \Omega$$
$$u(\mu) = 0 \qquad \text{auf } \delta\Omega$$

mit  $\kappa(\mu): \Omega \to \mathbb{R}$  (z. B. "Wärmeleitungskoeffizient") und  $q(\mu): \Omega \to \mathbb{R}$  (z. B. "Wärmequelle/-senke")

z. B. 
$$q(x; \mu) := \begin{cases} 1 & \text{für } x \in \Omega_q \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Weiter kann Ausgabe erwünscht, z.B. mittlere Temperatur

$$s(\mu) = \frac{1}{|\Omega_s|} \int u(x; \mu) \, dx$$

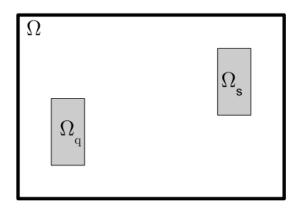


Abbildung 1: Beispiel Wärmeleitung mit Quelle  $\Omega_q$  und Messbereich  $\Omega_s$  (aus B. Haasdonk, Reduzierte-Basis-Methoden, Skript zur Vorlesung SS 2011, Universität Stuttgart, IANS-Report 4/11, 2011.)

Beispiel 1.2 (Parametrisches stationäres System)

Zu Parameter  $\mu \in \mathcal{P} \subseteq \mathbb{R}^p$  ist Zustandsvektor  $u(\mu) \in \mathbb{R}^n$  und Ausgabe  $s(\mu) \in \mathbb{R}^k$  gesucht, s. d.:

$$0 = A(\mu) \cdot u(\mu) + B(\mu)w(\mu)$$
  
$$s(\mu) = C(\mu) \cdot u(\mu)$$

mit parameterabhängigen Matrizen  $A(\mu) \in \mathbb{R}^{n \times n}, B(\mu) \in \mathbb{R}^{n \times m}, C(\mu) \in \mathbb{R}^{k \times n}$  mit Eingabevektor  $w \in \mathbb{R}^m$ .

#### Schwache Formulierung in Hilberträumen

Sei X reeller Hilbertraum (reel, seperabel). Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  ist gesucht ein  $u(\mu) \in X$  und  $s(\mu) \in \mathbb{R}$ 

$$a(u(\mu), v; \mu) = f(v; \mu)$$
  
$$s(\mu) = l(u(\mu); \mu) \qquad \forall v \in X$$

Mit Bilinearform  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  und Linearform  $f(\cdot;\mu),\ l(\cdot;\mu)$ . Beide Beispiele lassen sich so formulieren.

z. B. 1.1:

$$X = H_0^1(\Omega) := \{ f \in L^2(\Omega) | \frac{\partial}{\partial x_i} f \in L^2(\Omega), f_{|\delta\Omega} = 0 \}$$

$$\underbrace{\int_{\Omega} \kappa(x; \mu) \nabla u(x; \mu) \cdot \nabla v(x) dx}_{a(u(\mu), v; \mu)} = \underbrace{\int_{\Omega} q(x; \mu) \cdot v(x) dx}_{f(v; \mu)} \qquad \forall v \in X$$

$$s(\mu) = \frac{1}{|\Omega_s|} \int_{\Omega_s} u(x; \mu) =: l(u(\mu); \mu)$$

Zu Bsp. 1.2 (k = 1, "single output")  $X = \mathbb{R}^n$ 

$$\underbrace{v^T A(\mu) u(\mu)}_{a(u(\mu), v; \mu)} = \underbrace{-v^T B w}_{f(v; \mu)}$$
 
$$s(\mu) := \underbrace{C(\mu) u(\mu)}_{l(u(\mu); \mu)}$$

In der Vorlesung werden weitere Verallgemeinerungen zu  $a: X_1 \times X_2 \to \mathbb{R}$  mit  $X_1 \neq X_2$ , nichtlinear und instationäre Probleme behandelt.

#### 1.1 Modellreduktion

#### Grundidee/Motivation

- $\mathcal{M} := \{u(\mu) | \mu \in \mathcal{P}\} \subset X$  für  $\mathcal{P} \subseteq \mathbb{R}^p$  ist die durch  $\mu$  parametrisierte Lösungsmannigfaltigkeit.
- X ist im allgemeinen ∞-dimensional (Sobolev-Raum) oder endlich- aber sehr hochdimensional (FEM, FV, FD-Raum). M ist aber höchstens p-dimensional.
  ⇒ Motivation für Suche nach einem niedrigdimensionalen Teilraum X<sub>N</sub> ⊆ X zur Approximation von M und einer Approximation u<sub>N</sub>(µ) ≈ u(µ), u<sub>N</sub>(µ) ∈ X<sub>N</sub>
- Insbesondere bei Reduzierten-Basis-Methoden (RB-Methoden):  $X_N$  durch Beispiellösungen erzeugt, sog. "Snapshots"  $X_N \subseteq \operatorname{span}\{u(\mu_1),...,u(\mu_n)\}$  für geeignete Parameterwerte  $\mu_i \in \mathcal{P}$ . Ziel ist außerdem Fehlerkontrolle durch Schranken  $\Delta_N(\mu)$ :

$$||u(\mu) - u_N(\mu)|| \le \Delta_N(\mu)$$

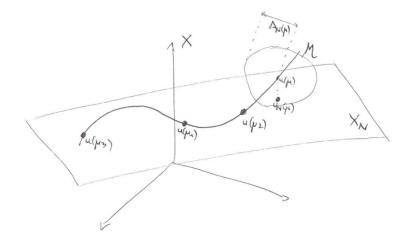


Abbildung 2: Parametrisierte niedrigdimensionale Lösungsmenge (aus dem Online-Skript von Prof. Dr. Haasdonk zu Reduzierte Basen 2015)

#### Illustration

#### Beispiel 1.3

Gesucht ist  $u(\mu) \in C^2([0,1])$  mit

$$(1 + \mu)u'' = 1$$
 auf (0,1)  
  $u(0) = u(1) = 1$ 

Für  $\mu \in [0,1] =: \mathcal{P} \subseteq \mathbb{R}$ . Spezielle Lösungen ("Snapshots")

$$\mu = 0 \Rightarrow u_0(x) = u(x; \mu = 0) = \frac{1}{2}x - \frac{1}{2}x + 1$$
$$\mu = 1 \Rightarrow u_1(x) = u(x; \mu = 1) = \frac{1}{4}x - \frac{1}{4}x + 1$$

RB-Raum:  $X_N := \operatorname{span}(u_0, u_1)$  Reduzierte Lösung gegeben durch

$$u_N(\mu) := \alpha_0(\mu)u_0 + \alpha_1(\mu)u_1$$
  
 $\alpha_0(\mu) = \frac{2}{\mu+1} - 1; \qquad \alpha_1(\mu) = 2 - \frac{2}{\mu+1}$ 

Diese erfüllt

$$||u_N(\mu) - u(\mu)||_{\infty} = \sup_{\mu} ||u(\mu) - u_N(\mu)|| = 0$$

ist somit exakt.  $\mathcal{M}$  ist enthalten in 2-dimensionalem Unterraum  $X_N$ : Genauer  $\alpha_0 + \alpha_1 = 1, 0 \leq \alpha_0, \alpha_1 \leq 1$ , also ist  $\mathcal{M}$  Menge der Konvexkombinationen von  $u_0, u_1$ .

#### Begriffe

- Eine PDE ist ein analytisches Modell, welches die exakte Lösung  $u(\mu) \in X$  in einem typischerweise  $\infty$ -dimensionalen Funktionenraum X charakterisiert.
- Ein detailliertes Modell (auch hochdimensionales Modell) ist ein Berechnungsverfahren oder charakterisiert eine Approximation  $u(\mu) \in X$  in hochdimensionalen Raum mit sehr allgemeinen Approximationseigenschaften. (z. B. FEM/FV/FD, dim  $X = 10^3 10^8$ ). In dieser Vorlesung kann  $u(\mu)$  sowohl eine analytische als auch eine detaillierte Lösung darstellen.
- Ein reduziertes Modell ist ein Berechnungsverfahren bzw. eine Charakterisierung einer reduzierten Lösung  $u_N(u)$  in einem sehr problemangepassten Raum  $X_N$  (dim  $X_N = 1 10^3$ ).
- *Modellreduktion* beschäftigt sich mit Methoden der Erzeugung reduzierter Modelle und Untersuchung ihrer Eigenschaften
- Modellreduktion ist ein modernes Gebiet der angewandten Mathematik und Ingenieurwissenschaften (Schwerpunkt in SimTech PN3, MOR-Seminar)

#### Anwendungen für parametrische reduzierte Modelle

"Kleinere" Modelle stellen geringere Anforderungen an Rechenzeit und Speicher, daher Einsatz in:

- "multi-query"-Kontext, d. h. Vielfachanfragen unter Parametervariation: Parameterstudien, Design, Parameteridentifikation, Inverse Probleme, Optimierung, statistische Analyse
- Multi-skalen-Modelle (reduzierte Mikrolöser)
- "real-time"-Kontext, d. h. Anwendungen mit schneller Simulationsantwort: Interaktive Benutzeroberfläche, Web-Formulare, Echtzeitsteuerung von Prozessen
- "cool-computing"-Kontext, d. h. Simulation auf "einfacher" Hardware: elektronische Regler, Smartphones, Ubiquitious Computing

#### Demonstration

demo\_thermalblock.m aus RBmatlab, Smartphone App JaRMoS

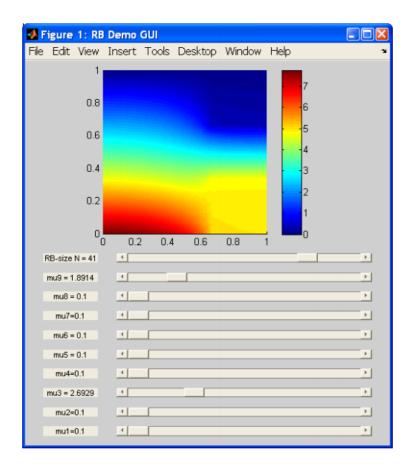


Abbildung 3: Beispiel des Thermischen Blocks aus demo\_thermalblock.m (aus B. Haasdonk, Reduzierte-Basis-Methoden, Skript zur Vorlesung SS 2011, Universität Stuttgart, IANS-Report 4/11, 2011.)

# Offline/Online Zerlegung

Typischerweise wird eine berechnungsintensive Generierung des reduzierten Modells akzeptiert, sog. Offline-Phase. Dies ermöglicht schnelle Anwendbarkeit des reduzierten Modells in der Online-Phase. Offline-Kosten werden gerechtfertigt durch Amortisierung im multi-query-Kontext, d.h. Laufzeitgewinn bei genügend großer Anzahl an Online-Simulationen

multi-query mit detaillieiem Modell:

agran agra

Abbildung 4: Laufzeitvergleich eines detaillierten mit einem reduzierten Modell (aus dem Online-Skript von Prof. Dr. Haasdonk zu Reduzierte Basen 2015)

#### Zentrale Fragen

- Reduzierte Basis: Wie kann ein möglichst kompakter Teilraum konstruiert werden? Können solche Verfahren beweisbar gut sein?
- Reduziertes Modell: Wie kann eine Lösung  $u_N(\mu) \in X_N$  bestimmt werden
- Berechnungs-Effizienz: Wie kann  $u_N(\mu)$  schnell berechnet wreden?
- Stabilität: Wie kann Stabilität des reduzierten Modells garantiert werden bei wachsendem  $N := \dim X_N$ ?
- Fehlerschätzer: Kann der Fehler des reduzierten zum detaillierten oder analytischen modells beschränkt werden? Sind die Fehlerschätzer schnell berechenbar?
- Effektivität der Fehlerschätzer: Kann garantiert werden, dass der Schätzer den Fehler nicht zu pessimistisch überschätzt?
- Für welche Problemklassen kann ein RB-Ansatz funktionieren, für welche nicht?

#### Vorläufige Gliederung

- 1 Einleitung
- 2 Grundlagen
- 3 RB Verfahren für lineare koerzive Probleme
- 4 Allgemeinere lineare Probleme
- 5 Nichtlineare Probleme
- 6 Instationäre Probleme
- 7 Weiterführende Aspekte

# 2 Grundlagen

Im Folgenden sei X (oder  $X_1, X_2$ ) stets reeller Hilbertraum mit Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle_X$ , Norm  $\| \cdot \|_X$  und Dualraum X'. Subskript wird weggelassen falls keine Verwechslungsgefahr besteht.

**Definition 2.1** (Parametrische Formen)

Sei  $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^p$  beschränkte Parametermenge. Dann nennen wir

i)  $l: X \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  parametrische stetige Linearform falls  $\forall \mu \in \mathcal{P}$ :

$$l(\cdot;\mu) \in X'$$

ii)  $a: X_1 \times X_2 \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  eine parametrische stetige (symmetrische) Bilinearform, falls für alle  $\mu \in \mathcal{P}$ 

$$a(\,\cdot\,,\cdot\,;\mu):X_1\times X_2\to\mathbb{R}$$
 ist bilinear und stetig (symmetrisch)

Wir bezeichnen die Stetigkeitskonstante mit

$$\gamma(\mu) := \sup_{u \in X_1} \sup_{v \in X_2} \frac{a(u, v; \mu)}{\|u\|_{X_1} \|v\|_{X_2}}$$

Falls  $X_1 = X_2 =: X$  und  $a(\cdot, \cdot; \mu)$  ist koerziv für alle  $\mu \in \mathcal{P}$ , so ist  $a(\cdot, \cdot; \cdot)$  parametrisch koerziv und wir bezeichnen die Koerzivitätskonstante mit

$$\alpha(\mu) := \inf_{u \in X} \frac{a(u, u; \mu)}{\|u\|^2}$$

**Bemerkung.** Eine parametrische stetige Bi-/Linearform ist nicht unbedingt stetig bzgl.  $\mu$ . Beispiel:  $X = \mathbb{R}, \mathcal{P} = [0,1], l: X \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  definiert durch

$$l(x; \mu) := \begin{cases} x & \text{falls } \mu < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}x & \text{sonst} \end{cases}$$

**Definition 2.2** (Parametrische Beschränktheit / Lipschitz-Stetigkeit / Koerzivität) Wir nennen

i) eine parametrische stetige Linearform l bzw. Bilinearform a gleichmäßig beschränkt bzgl.  $\mu$  falls ex.  $\bar{\gamma}_l, \bar{\gamma} < \infty$  mit

$$\sup_{\mu \in \mathcal{P}} \|l(\,\cdot\,;\mu)\|_{X'} \leq \bar{\gamma}_l \quad \text{bzw.} \quad \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \gamma(\mu) \leq \bar{\gamma}$$

ii) a gleichmäßig koerziv bzgl.  $\mu$  falls ex.  $\bar{\alpha} > 0$  mit

$$\inf_{\mu \in \mathcal{P}} \alpha(\mu) \ge \bar{\alpha}$$

iii) l bzw. a Lipschitz-stetig bzgl.  $\mu$  falls ex.  $L_l$  bzw.  $L_a \in \mathbb{R}^+$ , sodass  $\forall \mu_1, \mu_2 \in \mathcal{P}$  gilt

$$|l(u; \mu_1) - l(u; \mu_2)| \le L_l ||u|| ||\mu_1 - \mu_2|| \quad \forall u \in X$$

bzw.

$$|a(u,v;\mu_1) - a(u,v;\mu_2)| \le L_a ||u|| ||v|| ||\mu_1 - \mu_2|| \quad \forall u \in X_1, v \in X_2$$

#### **Definition 2.3** (Sensitivitätsableitung)

Sei  $\mu_0 \in \mathcal{U} \subset \mathcal{P}$  in Umgebung  $\mathcal{U}$  von  $\mu_0$ . Wir nennen  $f: \mathcal{U} \to X$  (Frechet)-differenzierbar in  $\mu_0$ , falls ex. ein  $\mathrm{D} f(\mu_0) \in L(\mathbb{R}^p, X)$  mit

$$\lim_{h \to 0} \frac{\|f(\mu_0 + h) - f(\mu_0) - Df(\mu_0)h\|}{\|h\|} = 0$$

Falls f in jedem  $\mu \in \mathcal{U}$  diffbar, dann existieren insbesondere partielle Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial \mu_i} f(\,\cdot\,) := \mathrm{D}f(\,\cdot\,) e_i : \mathcal{U} \to X$$

für  $e_i \in \mathbb{R}^p$  Einheitsvektor  $i = 1, \dots, p$ . Falls diese wiederrum diffbar in  $\mathcal{U}$  bezeichnet allgemein

$$\partial_{\sigma} f(\,\cdot\,) := \frac{\partial^{|\sigma|}}{\partial_{\mu_1}^{\sigma_1} \cdots \partial_{\mu_p}^{\sigma_p}} f(\,\cdot\,) : \mathcal{U} \to X$$

die Sensitivitätsableitung der Ordnung  $|\sigma| := \sum_{i=1}^p \sigma_i$  für Multiindex  $\sigma = (\sigma_i)_{i=1}^p \in \mathbb{N}_0^p$ .

**Bemerkung.** Diese Ableitungen werden später insbesondere bei parameterabhängigen Lösungen  $u(x; \mu)$  verwendet:

 $u: \Omega \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  mit  $u(\cdot; \mu) \in X$  kann auch als

 $u: \mathcal{P} \to X$  aufgefasst werden mit Sensitivitätsableitungen

 $\partial_{\sigma}u: \mathcal{P} \to X$ , d.h.  $\partial_{\sigma}u(\cdot; \mu) \in X \ \forall \mu \in \mathcal{P}$  und insbesondere

 $\partial_{\sigma}u:\Omega\times\mathcal{P}\to\mathbb{R}$ , d.h.  $\partial_{\sigma}$  sind wieder Funktionen auf  $\Omega$ 

#### **Definition 2.4** (Separierbare Parameterabhängigkeit)

i) Eine Funktion  $v: \mathcal{P} \to X$  nennen wir separierbar parametrisch, falls existieren Komponenten  $v^q \in X$  und Koeffizientenfunktionen  $\Theta_v^q: \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  für  $q = 1, \dots, Q_v$  mit

$$v(\mu) = \sum_{q=1}^{Q_v} \Theta_v^q(\mu) \, v^q$$

ii) Eine parametrische stetige Linearform  $l: X \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  bzw. Bilinearform  $a: X_1 \times X_2 \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  ist separierbar parametrisch, falls existieren  $l^q \in X'$  und  $\Theta_l^q: \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  für  $q = 1, \ldots, Q_l$  bzw.  $a^q: X_1 \times X_2 \to \mathbb{R}$  stetig, bilinear und  $\Theta_a^q: \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  für  $q = 1, \ldots, Q_a$  mit

$$l(v; \mu) = \sum_{q=1}^{Q_l} \Theta_l^q(\mu) l^q(v) \qquad \forall v \in X, \mu \in \mathcal{P}$$
$$a(u, v; \mu) = \sum_{q=1}^{Q_a} \Theta_a^q(\mu) a^q(u, v) \qquad \forall u \in X_1, v \in X_2, \mu \in \mathcal{P}$$

#### Bemerkung.

- i) In Literatur auch "affine Annahme" oder "affin parametrisch" verwendet. Wir verwenden jedoch "separierbar", da  $\Theta^q_l$  auch nichtlinear sein können.
- ii)  $Q_a, Q_l$  sollten möglichst klein sein, weil diese in die Online-Komplexität eingehen, siehe  $Abschnitt\ 3.$

#### Satz 2.5 (Energienorm)

Sei  $a: X \times X \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  parametrische stetige, koerzive Bilinearform, und  $a_s(u,v;\mu) = \frac{1}{2}(a(u,v;\mu) + a(v,u;\mu))$  der symmetrische Anteil. Dann ist für  $\mu \in \mathcal{P}$ 

$$\langle u, v \rangle_{\mu} := a_s(u, v; \mu)$$
 bzw.  $||u||_{\mu} := \sqrt{\langle u, u \rangle_{\mu}}$ 

das Energie-Skalarprodukt bzw. die Energienorm bzgl.  $\mu$ . Diese ist äquivalent zu  $\|\cdot\|_X$ :

$$\sqrt{\alpha(\mu)}\|u\| \le \|u\|_{\mu} \le \sqrt{\gamma(\mu)}\|u\|$$

Beweis. Skalarprodukt: klar wegen Bilinearität, Stetigkeit und Koerzivität. Normäquivalenz folgt aus Stetigkeit und Koerzivität von  $a_s$ .

$$\alpha(\mu) \|u\|^2 \le \underbrace{a(u,u;\mu)}_{\le \|u\|^2 \gamma(\mu)} = a_s(u,u;\mu) = \|u\|_{\mu}^2$$

Satz 2.6 (Übertragung von Koeffizienten-Eigenschaften)

Seien f bzw. a separierbar parametrische stetige Linear- bzw. Bilinearform.

- i) Falls  $\Theta_f^q(\mu)$  bzw.  $\Theta_a^q(\mu)$  beschränkt sind, dann sind f bzw. a gleichmäßig beschränkt bzgl.  $\mu$ .
- ii) Falls  $\Theta_a^q(\mu)$  strikt positiv, d.h. ex.  $\bar{\Theta}$  mit  $\Theta_a^q(\mu) \geq \bar{\Theta} > 0 \ \forall \mu \in \mathcal{P}$  alle Komponenten positiv semidefinit, d.h.  $a^q(v,v) \geq 0 \ \forall v,q$  und  $a(\cdot,\cdot;\bar{\mu})$  ist koerziv für mindestens ein  $\bar{\mu} \in \mathcal{P}$ , dann ist a gleichmäßig koerziv bzgl.  $\mu$ .

- iii) Falls  $\Theta_f^q$ ,  $\Theta_a^q$  Lipschitz-stetig, so ist f, a Lipschitz-stetig bzgl.  $\mu$ . Beweis.
  - i) Sei  $\bar{\Theta}_f^q \in \mathbb{R}^+$  mit  $|\Theta_f^q(\mu)| \leq \bar{\Theta}_f^q \ \forall \mu$ . Dann gilt

$$||f(\cdot;\mu)|| = ||\sum_{q} \Theta_f^q(\mu) f^q|| \le \sum_{q} |\Theta_f^q(\mu)|||f^q|| \le \sum_{q} \bar{\Theta}_f^q ||f^q|| =: \bar{\gamma}_f < \infty$$

analog für  $a(\cdot,\cdot;\mu)$ .

ii) Für  $u \in X$ ,  $\mu \in \mathcal{P}$  gilt

$$a(u,u;\mu) = \sum_{q} \Theta_a^q(\mu) \, a^q(u,u) = \sum_{q} \underbrace{\underbrace{\Theta_a^q(\mu)}_{\Theta_a^q(\bar{\mu})}}_{>0} \underbrace{\underbrace{\Theta_a^q(\bar{\mu}) \, a^q(u,u)}_{\sum(\cdot) = a(u,u;\bar{\mu})}}_{\geq (\bar{\mu})} \ge \underbrace{\sum_{q} \underbrace{\overline{\Theta}_{\alpha}^q(\bar{\mu}) \, \alpha(\bar{\mu})}_{=:\bar{\alpha}>0} \alpha(\bar{\mu}) \|u\|^2}_{=:\bar{\alpha}>0}$$

iii) Sei  $|\Theta_f^q(\mu_1) - \Theta_f^q(\mu_2)| \le L_f^q |\mu_1 - \mu_2| \ \forall \mu_1, \mu_2 \in \mathcal{P}$  mit geeignetem  $L_f^q \in \mathbb{R}$ . Dann gilt

$$|f(v; \mu_1) - f(v; \mu_2)| = |\sum_{q} \Theta_f^q(\mu_1) f^q(v) - \sum_{q} \Theta_f^q(\mu_2) f^q(v)|$$

$$\leq \sum_{q} |\Theta_f^q(\mu_1) - \Theta_f^q(\mu_2)| ||f^q|| ||v||$$

$$\leq \sum_{q} L_f^q ||f^q|| ||\mu_1 - \mu_2|| ||v||$$

$$= L_f$$

analog für  $a(\cdot,\cdot;\mu)$ .

**Definition 2.7** (Volles Problem  $(P(\mu))$ )

Seien a bzw. f, l parametrische Bilinearform bzw. Linearform und gleichmäßig stetig bzgl.  $\mu$ , sei a gleichmäßig koerziv bzgl.  $\mu$ . Dann ist für  $\mu \in \mathcal{P}$  gesucht  $u(\mu) \in X$  und  $s(\mu) \in \mathbb{R}$  als Lösung von

$$a(u(\mu), v; \mu) = f(v; \mu) \qquad \forall v \in X$$
  
$$s(\mu) := l(u(\mu); \mu)$$

#### Bemerkung.

- Das volle Problem kann also ein analytisches Modell (PDE) oder ein detailliertes Modell (PDE-Diskretisierung) darstellen.
- Symmetrie von a wird nicht vorausgesetzt.

• In Abschnitt 4, Abschnitt 5 werden Verallgemeinerungen von  $(P(\mu))$  betrachtet.

#### Satz 2.8 (Wohlgestelltheit und Stabilität)

Das Problem  $(P(\mu))$  besitzt eine eindeutige Lösung mit

$$||u(\mu)|| \le \frac{||f(\mu)||_{X'}}{\alpha(\mu)} \le \frac{\bar{\gamma}_f}{\bar{\alpha}}, \quad |s(\mu)| \le ||l(\mu)||_{X'} ||u(\mu)|| \le \frac{\bar{\gamma}_l \bar{\gamma}_f}{\bar{\alpha}}$$

Beweis. Existenz, Eindeutigkeit und Schranke für  $u(\mu)$  folgen mit Lax-Milgram (siehe z.B. Satz 2.5 in Braess'03). Gleichmäßige Stetigkeit und Koerzivität ergeben  $\mu$ -unabhängige Schranke für  $u(\mu)$ . Definition von  $s(\mu)$  ergibt Eindeutigkeit und entsprechende Schranken.

## Definition 2.9 (Lösungsmannigfaltigkeit)

Wir definieren

$$\mathcal{M} := \{ u(\mu) \in X : \mu \in \mathcal{P} \text{ und } u(\mu) \text{ löst } (P(\mu)) \}$$

**Bemerkung.** Wir verwenden den Begriff "Mannigfaltigkeit" nicht im strengen differentialgeometrischen Sinn, weil keine Stetigkeit / Diffbarkeit von  $\mathcal{M}$  gefordert wird.

#### Beispiel 2.10 (Thermischer Block)

Sei  $B_1, B_2 \in N$  und wie in Abbildung 5

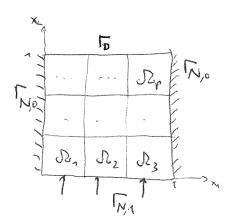


Abbildung 5: Skizze des Thermischen Blocks (aus dem Online-Skript von Prof. Dr. Haasdonk zu Reduzierte Basen 2015)

- $(0,1)^2 =: \Omega$  zerlegt in  $B_1 \cdot B_2 =: p$  kongruente Rechtecke
- $\mathcal{P} := [\mu_{min}, \mu_{max}]^p \subset \mathbb{R}^p$  Parameterbereich mit  $0 < \mu_{min} < \mu_{max}$
- $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_p)^T \in \mathcal{P}$  Vektor aus Wärmeleitungskoeffizienten der Teilgebiete,  $\kappa(x;\mu)$  stückweise konstante Wärmeleitfähigkeit

$$\kappa(x;\mu) := \sum_{q=1}^{p} \mu_q \cdot \chi_{\Omega_q}(x)$$

• elliptische PD mit Dirichlet- & Neumann Randbedingungen:

$$-\nabla \cdot (\kappa(x;\mu)\nabla u(x;\mu)) = 0 \qquad \text{für } x \in \Omega$$
$$u(x;\mu) = 0 \qquad \text{für } x \in \Gamma_D$$
$$\kappa(x;\mu)\nabla u(x;\mu) \cdot n(x) = i \qquad \text{für } x \in \Gamma_{N,i} , i = 0,1$$

Anschauung: "Kühlung" auf u = 0 auf  $\Gamma_D$ , "Isolierung" an  $\Gamma_{N,0}$  und Einheits-Wärmefluss auf  $\Gamma_{N,1}$ , keine Wärmequellen.

schwache Form: gesucht  $u(\mu) \in H^1_{\Gamma_D}(\Omega) := \{u \in H^1(\Omega) | u_{|\Gamma_D} = 0\}$  s. d.

$$\int_{\Omega} \kappa(x; \mu) \nabla u(x; \mu) \cdot \nabla v(x) dx = \int_{\Gamma_{N,1}} v(x) dx \qquad \forall v \in H^{1}_{\Gamma_{D}}(\Omega)$$

• Ausgabe: Mittlere Temperatur auf  $\Gamma_{N,1}$ 

$$s(\mu) := \int_{\Gamma_{N,1}} u(x;\mu) dx$$

- Man kann zeigen, dass dies ein Problem von Typ  $(P(\mu))$  darstellt. Insbesondere ist  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  separierbar parametrische stetige Bilinearform, gleichmäßig beschränkt, glm. koerziv und Lipschitz-stetig bzgl.  $\mu$ . Ebenso ist  $f(\cdot;\mu)$  eine separierbar parametrische stetige Linearform, gleichmäßig beschränkt und Lipschitz-stetig bzgl.  $\mu$ .  $\rightarrow$  Übung
- Modell erlaubt einfache aber interessante Einblicke in Struktur von  $\mathcal{M}$ :
  - 1. einfache Lösungsstruktur: Falls  $B_1 = 1$  (oder  $B_1 > 1$  aber identische  $\mu_i$  pro Zeile) besitzt die Lösung horizontale Symmetrie. Man kann zeigen:  $u(\mu)$  ist stückweise linear und enthalten in einem  $B_2$ -dimensionalen (also insbesondere endlichdimensionalen) Teilraum von  $H^1_{\Gamma_D}(\Omega)$ . (Übung)
  - 2. komplexe Lösungsstruktur: Falls  $B_1 > 1$  und  $\mu \in \mathcal{P}$  beliebig existieren keine Symmetrien, man findet keinen endlichdimensionalen Raum, der alle  $u(\mu)$  enthält
  - 3. Parameterredundanz:  $\mathcal{M}$  ist invariant bzgl. Skalierung von  $\mu$ , d. h. falls  $u(\mu)$  ist Lösung von  $(P(\mu))$ , so ist  $u(c\mu) = \frac{1}{c}u(\mu)$  Lösung von  $(P(c\mu))$ .

demo\_detailed\_gui.m: Beispiele für Parametervariation & Lösungen.

#### Beispiel 2.11 (Matrixgleichung)

• Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  suche  $u(\mu) \in \mathbb{R}^H$  als Lösung von

$$A(\mu)u(\mu) = b(\mu)$$

für  $A(\mu) \in \mathbb{R}^{H \times H}$  und  $b(\mu) \in \mathbb{R}^H$ .

• Dies ist Beispiel für  $(P(\mu))$  via

$$X := \mathbb{R}^H, \quad a(u, v; \mu) := v^{\top} A(\mu) u, \quad f(v; \mu) := v^{\top} b(\mu)$$

und beliebiger linearer Ausgabe  $l(v; \mu) := \underline{l}^{\top} v$  für  $\underline{l} \in \mathbb{R}^{H}$ .

# **Beispiel 2.12** $(Q_a = 1)$

Falls  $a(\cdot,\cdot;\mu)$ ,  $f(\cdot;\mu)$  separierbar parametrisch mit  $Q_a=1$  und  $Q_f$  beliebig, so ist  $\mathcal{M}$  enthalten in einem  $Q_f$ -dimensionalen linearen Teilraum von X:

$$(P(\mu))$$
  $\Rightarrow$   $\Theta_a^1(\mu)a^1(u,v) = \sum_q \Theta_f^q(\mu)f^q(v) \quad \forall v \in X$ 

 $\Theta_a^1(\mu) \neq 0$  wegen a gleichmäßig koerziv

$$a^{1}(u,v) = \sum_{q} \frac{\Theta_{f}^{q}(\mu)}{\Theta_{a}^{1}(\mu)} f^{q}(v) \quad \forall v \in X$$
 (\*)

 $a^{1}(\cdot,\cdot)$  ist koerziv,  $f^{q}$  linear und stetig

Lax-Milgram ex. 
$$u^q, q = 1, \dots, Q_f$$
 mit  $a^1(u^q, v) = f^q(v), \quad v \in X$ 

$$\Rightarrow u := \sum_q \frac{\Theta_f^q(\mu)}{\Theta_a^1(\mu)} u^q \text{ löst (*) wegen Linearität}$$

$$\Rightarrow u \in \text{span}\{u^q\}_{q=1}^{Q_f}$$

## Beispiel 2.13 ( $(P(\mu))$ mit vorgegebener Lösung)

Sei  $u: \mathcal{P} \to X$  beliebig komplizierte Abbildung. Dann existiert ein  $(P(\mu))$  mit  $u(\mu)$  als Lösung via Skalarprodukten:

$$a(v,w;\mu) := \langle w,v \rangle_X, \quad f(v;\mu) := \langle u(\mu),v \rangle_X$$

d.h. Klasse der Probleme  $(P(\mu))$  können beliebig komplizierte, nichtglatte oder sogar unstetige Lösungsmannigfaltigkeit  $\mathcal{M}$  besitzen.

Bemerkung (Parameter-Anzahl und Lösungskomplexität). Es gibt (sogar in der Literatur) ein Missverständnis zwischen Parameteranzahl  $p \in \mathbb{N}$  und Komplexität der Lösungsmannigfaltigkeit  $\mathcal{M}$ , denn es kann Redundanz in Parametern vorliegen (siehe Thermischer Block). Extremfall:  $p \in \mathbb{N}$  beliebig, für geeignetes  $a(\cdot,\cdot;\mu)$ ,  $f(\mu)$  hat  $(P(\mu))$  ein  $\mathcal{M}$ , welches in einem 1D-Raum enthalten ist. (Übung) Beispiel 2.13 zeigt andererseits einen anderen Extremfall: Sogar für p = 1 kann bei geeignetem  $(P(\mu))$  das  $\mathcal{M}$  beliebig kompliziert sein (z.B. "Raumfüllende Kurve"). Unter geeigneter Annahmen an  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  und  $f(\cdot;\mu)$  können einfache Regularitätseigenschaften von  $u(\mu)$  bzw.  $\mathcal{M}$  geschlossen werden.

#### Korollar 2.14 (Beschränktheit von $\mathcal{M}$ )

Weil  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  gleichmäßig koerziv und  $f(\cdot;\mu)$  gleichmäßig beschränkt, so ist  $\mathcal{M}$  beschränkt

$$\mathcal{M} \subseteq B_{\frac{\bar{\gamma}_f}{\bar{\alpha}}}(0)$$

Beweis. Klar weil  $||u(\mu)|| \leq \frac{\bar{\gamma}_f}{\bar{\alpha}}$  nach Satz 2.8.

#### Satz 2.15 (Lipschitz-Stetigkeit)

Falls  $a(\cdot,\cdot;\mu)$ ,  $f(\cdot;\mu)$ ,  $l(\cdot;\mu)$  Lipschitz-stetig bzgl.  $\mu$ , so sind  $u(\mu)$  und  $s(\mu)$  Lipschitz-stetig bzgl.  $\mu$  mit Lipschitz-Konstanten

$$L_u = \frac{L_f}{\bar{\alpha}} + \bar{\gamma}_f \frac{L_a}{\bar{\alpha}^2}$$
 und  $L_s = L_l \frac{\bar{\gamma}_f}{\bar{\alpha}} + \bar{\gamma}_l L_u$ 

Beweis. Übung.

#### Satz 2.16 (Diffbarkeit)

Sei  $a(u, \cdot; \mu) \in X'$  Frechet-diffbar in Umgebung von  $(u_0, \mu_0) \subset X \times \mathcal{P}$  und  $f(\cdot; \mu) \in X'$  Frechet-diffbar in Umgebung von  $\mu_0 \in \mathcal{P}$ . Dann ist Lösung  $u(\mu)$  von  $(P(\mu))$  Frechet-diffbar in Umgebung von  $\mu_0 \in \mathcal{P}$  mit

$$D_{\mu}u(\mu) := -\left(\frac{\partial}{\partial u}F(u,\mu)\right)^{-1}\frac{\partial}{\partial \mu}F(u,\mu)$$

wobei  $F(u,\mu) := a(u,\cdot;\mu) - f(\cdot;\mu) \in X'$ .

Beweis. Aus Frechet-Diffbarkeit von  $a(\cdot,\cdot;\cdot)$  und  $f(\cdot;\cdot)$  folgt Frechet-Diffbarkeit von  $F: X \times \mathcal{P} \to X'$  in Umgebung von  $(u_0,\mu_0)$  mit partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial u}F(u_0,\mu_0) := \frac{\partial}{\partial u}a(u_0,\cdot;\mu_0) - \frac{\partial}{\partial u}f(\cdot;\mu_0) \in L(\mathbb{R}^p,X')$$

und  $\frac{\partial}{\partial u}F(u_0,\mu_0)\in L(X,X')$  durch

$$\frac{\partial}{\partial u}F(u_0,\mu_0)h_u := a(h_u,\cdot;\mu_0) \in X' \quad \forall h_u \in X$$

Dann erfüllt  $u(\mu)$  als Lösung von  $(P(\mu))$  gerade

$$F(u(\mu),\mu) = 0$$

in Umgebung von  $\mu_0$ . Dann ist (z.B. mit Folgerung 2.15 in Ruzicka: Nichtlineare Funktionalanalysis, Springer 2004) auch  $u(\mu)$  Frechet-diffbar in Umgebung von  $\mu_0$  mit Ableitung

$$D_{\mu}u(\mu) := -\left(\frac{\partial}{\partial u}F(u,\mu)\right)^{-1}\frac{\partial}{\partial \mu}F(u,\mu)$$

#### Bemerkung.

• Plausibilität der Ableitungsformel folgt aus formellem Ableiten:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\mu}\left(F(u(\mu),\mu)\right) &= 0 \\ \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial u}F(u(\mu),\mu)\mathbf{D}_{\mu}u(\mu) + \frac{\partial}{\partial \mu}F(u,\mu) &= 0 \\ \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial u}F(u(\mu),\mu)\mathbf{D}_{\mu}u(\mu) &= -\frac{\partial}{\partial \mu}F(u,\mu) \\ \Rightarrow \quad \mathbf{D}_{\mu}u(\mu) &= -\left(\frac{\partial}{\partial u}F(u(\mu),\mu)\right)^{-1}\frac{\partial}{\partial \mu}F(u,\mu) \end{aligned}$$

• Man kann zeigen, dass die Sensitivitäts-Ableitungen  $\partial_{\mu_i} u(\mu) \in X$  für  $i = 1, \dots, p$  erfüllen das sogenannte Sensitivitätsproblem

$$a(\partial_{\mu_i} u(\mu), v; \mu) = \tilde{f}_i(v; u(\mu), \mu)$$

mit rechter Seite  $\tilde{f}_i(\,\cdot\,;u(\mu),\mu)\in X'$  gegeben durch

$$\tilde{f}_i(\cdot; w, \mu) := \partial_{\mu_i} f(\cdot; \mu) - \partial_{\mu_i} a(w, \cdot; \mu)$$

d.h. das Problem  $(P(\mu))$  mit modifizierter rechter Seite, in welcher insbesondere  $u(\mu)$  eingeht. (Übung)

- Hinreichend für die Diffbarkeit von a, f in Satz 2.16 sind z.B. im Fall von separierbarer Parameterabhängigkeit die Diffbarkeit der Koeffizienten  $\Theta_a^q(\mu), \ \Theta_f^q(\mu), \ q=1,\dots$  (Übung)
- Ähnliche Aussagen / Sensitivitätsprobleme gelten für Ableitungen höherer Ordnung. Also überträgt sich Glattheit der Koeffizientenfunktionen auf Glattheit der Lösung / Mannigfaltigkeit.

## 3 RB-Methoden für lineare koerzive Probleme

#### 3.1 Primales RB-Problem

**Definition 3.1** (Reduzierte Basis, RB-Räume)

Sei  $S_N = \{\mu_1, \dots, \mu_N\} \subset \mathcal{P}$  Menge von Parametern mit (o.B.d.A.) linear unabhängigen Lösungen  $\{u(\mu_i)\}_{i=1}^N$  von  $(P(\mu_i))$ . Dann ist  $X_N := \operatorname{span}\{u(\mu_i)\}_{i=1}^N$  ein sog. Lagrange-BB-Raum.

Sei  $\mu^0 \in \mathcal{P}$  und  $u(\mu)$  Lösung von  $(P(\mu^0))$  k-mal diffbar in Umgebung von  $\mu^0$ . Dann ist

$$X_{k,\mu^0} := \operatorname{span} \left\{ \partial_{\sigma} u(\mu^0) : \sigma \in \mathbb{N}_0^p, |\sigma| \le k \right\}$$

ein Taylor-RB-Raum. Eine Basis  $\Phi_N = \{\varphi_1, \cdots, \varphi_N\} \subseteq X$  eines RB-Raums ist eine reduzierte Basis.

#### Bemerkung.

- $\Phi_N$  kann direkt aus Snapshots  $u(\mu^i)$  oder, für numerische Stabilität (siehe ??), auch orthonormiert sein.
- Wahl der Parameter  $\{\mu^i\}$  ist entscheidend für Güte des RB-Modells: Hier: zufällige oder äquidistante Menge ausreichend Später: intelligente Wahl durch a-priori Analysis oder Greedy-Verfahren
- Es ex. auch andere Arten von RB-Räumen (Hermite, POD). Gemeinsam ist diesen die Konstruktion aus Snapshots von u bzw.  $\partial_{\sigma}u$ .
- Andere MOR-Techniken:  $\Phi_N$  kann auch komplett unabhängig von Snapshots auf andere Weise konstruiert werden: Balanced Truncation, Krylov-Räume, etc. (siehe z.B. Antoulas: Approximation of large scale dynamical systems, SIAM 2004)

**Definition 3.2** (Reduziertes Problem  $(P_N(\mu))$ )

Sei eine Instanz von  $(P(\mu))$  gegeben und  $X_N \subseteq X$  ein RB-Raum. Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  ist die RB-Lösung  $u_N(\mu) \in X_N$  und Ausgabe  $s_N(\mu) \in \mathbb{R}$  gesucht mit

$$a(u_N(\mu), v; \mu) = f(v; \mu) \qquad \forall v \in X_N$$
  
$$s_N(\mu) = l(u_N; \mu)$$

## Bemerkung.

- Wir nennen obiges "primal" weil im Fall  $f \neq l$  oder a asymmetrisch, kann mit Hilfe eines geeigneten dualen Problems bessere Schätzung für s erreicht werden.
- Obiges ist "Ritz-Galerkin"-Projektion im Gegensatz zu "Petrov-Galerkin"-Projektion, welches für nicht-koerzive Probleme notwendig ist.  $\rightsquigarrow$  4

Satz 3.3 (Galerkin-Projektion, Galerkin-Orthogonalität)

Sei  $P_{\mu}: X \to X_N$  die orthogonale Projektion bzgl. Energieskalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mu}$ , sei a symmetrisch und  $u(\mu)$ ,  $u_N(\mu)$  Lösung von  $(P(\mu))$  bzw.  $(P_N(\mu))$ . Dann:

- i)  $u_N(\mu) = P_{\mu}u(\mu)$  "Galerkin-Projektion"
- ii)  $\langle e(\mu), v \rangle_{\mu} = 0 \ \forall v \in X_N$ , wobei  $e(\mu) := u(\mu) u_N(\mu)$

Beweis. Nach Aufgabe 1/Blatt 1 ist  $P_{\mu}$  wohldefiniert, denn  $(X, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mu})$  ist Hilbertraum und  $X_N \subseteq X$  abgeschlossen weil endlichdimensional. Orthogonale Projektion des Fehlers ergibt

$$\langle P_{\mu}u(\mu) - u(\mu), \varphi_{i} \rangle_{\mu} = 0 \qquad \forall i = 1, \dots, N$$

$$\Leftrightarrow \qquad a(P_{\mu}u(\mu) - u(\mu), \varphi_{i}; \mu) = 0 \qquad \forall i = 1, \dots, N$$

$$\Leftrightarrow \qquad a(P_{\mu}u(\mu), \varphi_{i}; \mu) = a(u(\mu), \varphi_{i}; \mu) = f(\varphi_{i}; \mu) \qquad \forall i = 1, \dots, N$$

- i) also ist  $P_{\mu}u(\mu)$  Lösung von  $(P_N(\mu))$
- ii)  $e(\mu)$  ist also Projektions-Fehler, orthogonal nach Aufgabe 1/Blatt 1

Bemerkung. Für a nichtsymmetrisch gilt immer noch folgende "Galerkin-Orthogonalität"

$$a(u - u_N, v; \mu) = 0 \quad \forall v \in X_N$$

(auch wenn a kein Skalarprodukt)

**Satz 3.4** (Existenz und Eideutigkeit für  $(P_N(\mu))$ )

Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  ex. eindeutige Lösung  $u_N(\mu) \in X_N$  und RB-Ausgabe  $s_n(\mu) \in \mathbb{R}$  von  $(P_N(\mu))$ . Diese sind beschränkt

$$||u_N(\mu)|| \le \frac{||f(\cdot;\mu)||_{X'}}{\alpha(\mu)} \le \frac{\bar{\gamma}_f}{\bar{\alpha}}$$
$$||s_N(\mu)|| \le ||l(\cdot;\mu)|| ||u_N(\mu)|| \le \frac{\bar{\gamma}_l \bar{\gamma}_f}{\bar{\alpha}}$$

Beweis. Weil  $X_N \subset X$  ist  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  stetig und koerziv auf  $X_N$ .

$$\alpha_N(\mu) := \inf_{v \in X_N} \frac{a(v, v; \mu)}{\|v\|^2} \ge \inf_{v \in X} \frac{a(v, v; \mu)}{\|v\|^2} = \alpha(\mu) > 0$$

$$\gamma_N(\mu) := \sup_{u, v \in X_N} \frac{a(u, v; \mu)}{\|u\| \|v\|} \le \sup_{u, v \in X} \frac{a(u, v; \mu)}{\|u\| \|v\|} = \gamma(\mu) < \infty$$

analog f, l stetig auf  $X_N$ . Existenz, Eindeutigkeit und Schranken folgen also mit Lax-Milgram analog zu 2.8.

Korollar 3.5 (Lipschitz-Stetigkeit)

Seien f, l gleichmäßig beschränkt und a, f, l Lipschitz-stetig bzgl.  $\mu$ , dann sind auch  $u_N(\mu)$ ,  $s_N(\mu)$  Lipschitz-stetig bzgl.  $\mu$  mit  $L_u$ ,  $L_s$  wie in 2.15.

Beweis. Analog zu 2.15 / Übung. □

#### Satz 3.6 (Diskrete RB-Probleme)

Sei  $\Phi_N = \{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$  eine reduzierte Basis für  $X_N$ . Für  $\mu \in \mathcal{P}$ ,

$$A_{N}(\mu) := (a(\varphi_{j}, \varphi_{i}; \mu))_{i,j=1}^{N} \qquad \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

$$\underline{l}_{N}(\mu) := (l(\varphi_{i}; \mu))_{i=1}^{N} \qquad \in \mathbb{R}^{N}$$

$$f_{N}(\mu) := (f(\varphi_{i}; \mu))_{i=1}^{N} \qquad \in \mathbb{R}^{N}$$

und  $\underline{u}_N = (u_{N,i})_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N$  als Lösung von

$$A_N(\mu)\underline{u}_N = f_N(\mu) \tag{3.1}$$

Dann ist  $u_N(\mu) := \sum_{i=1}^N u_{N,i} \varphi_i$  und  $s_N(\mu) := \underline{l}_N^\top(\mu) \underline{u}_N$ .

Beweis. Einsetzen und Linearität zeigt, dass

$$a\left(\sum u_{N,j}\,\varphi_j,\varphi_i;\mu\right) = \left(A_N(\mu)\underline{u}_N\right)_i = \left(\underline{f}_N\right)_i = f(\varphi_i;\mu)$$

## Satz 3.7 (Kondition bei ONB und Symmetrie)

Falls  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  symmetrisch und  $\Phi_N$  ist ONB, so ist Kondition von (3.1) unabhängig von N beschränkt

$$\operatorname{cond}_2(A_N) := \|A_N\|_2 \|A_N^{-1}\|_2 \le \frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)}$$

Beweis. Wegen Symmetrie gilt

$$\operatorname{cond}_{2}(A_{N}) = \frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|} \tag{3.2}$$

mit betragsmäßig größtem/kleinstem Eigenwert  $\lambda_{\max}/\lambda_{\min}$  von  $A_N(\mu)$ . Sei  $\underline{u}_{\max}=(u_i)_{i=1}^N\in\mathbb{R}^N$  Eigenvektor zu  $\lambda_{\max}$  und

$$u_{\max} := \sum_{i=1}^{N} u_i \, \varphi_i \quad \in X_N$$

Dann gilt

$$\begin{split} \lambda_{\max} \| \underline{u}_{\max} \|^2 &= \lambda_{\max} \underline{u}_{\max}^\top \underline{u}_{\max} = \underline{u}_{\max}^\top A_N \underline{u}_{\max} \\ &= \sum_{i,j=1}^N u_i u_j \, a(\varphi_j, \varphi_i; \mu) = a \left( \sum_j u_j \varphi_j, \sum_i u_i \varphi_i; \mu \right) \\ &= a(u_{\max}, u_{\max}; \mu) \leq \gamma(\mu) \|u_{\max}\|^2 \end{split}$$

Wegen

$$||u_{\max}||^2 = \langle \sum u_i \varphi_i, \sum u_j \varphi_j \rangle = \sum u_i u_j \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \sum u_i^2 = ||u_{\max}||^2$$

folgt  $|\lambda_{\max}| \leq \gamma(\mu)$ . Analog zeigt man  $|\lambda_{\min}| \geq \alpha(\mu)$  also folgt mit (3.2) die Behauptung.

**Bemerkung** (Unterschied FEM zu RB). Es bezeichne  $A_h(\mu) \in \mathbb{R}^{H \times H}$  die FEM Matrix (oder FV/FD).

- i) Die RB-Matrix  $A_N(\mu) \in \mathbb{R}^{H \times H}$  ist klein aber typischerweise vollbesetzt im Gegensatz zur großen aber dünnbesetzten Matrix  $A_h$ .
- ii) Die Kondition von  $A_N$  verschlechtert sich nicht mit wachsendem N (falls eine ONB verwendet wird), während die Konditionszahl von  $A_h$  typischerweise polynomiell in H wächst, also schlechter wird.

Satz 3.8 (Reproduktion von Lösungen)

Seien  $u(\mu)$ ,  $u_N(\mu)$  Lösungen von  $(P(\mu))$  bzw.  $(P_N(\mu))$ ,  $\underline{e}_i \in \mathbb{R}^n$  i-ter Einheitsvektor

- i) Falls  $u(\mu) \in X_N \implies u_N(\mu) = u(\mu)$
- ii) Falls  $u(\mu) = \varphi_i \in \Phi_N \quad \Rightarrow \quad \underline{u}_N(\mu) = \underline{e}_i \in \mathbb{R}^N$

Beweis.

i ) Mit  $u(\mu), u_N(\mu) \in X_N \Rightarrow e := u(\mu) - u_N(\mu) \in X_N$ . Wegen Galerkin-Orthogonalität  $(a(e,v;\mu) = 0 \ \forall v \in X_N)$  und Koerzivität folgt:

$$0 = a(e, e; \mu) \ge \underbrace{\alpha(\mu)}_{>0} \underbrace{\|e\|^2}_{\geq 0} \quad \Rightarrow \quad \|e\| = 0 \Rightarrow e = 0 \Rightarrow u = u_N$$

ii)  $u_N(\mu) = \varphi_i$ , nach i). Mit Eindeutigkeit der Basisexpansion folgt die Behauptung.

#### Bemerkung.

- Reproduktion von Lösungen ist grundlegende Konsistenzeigenschaft. Es gilt trivialerweise falls/sobald Fehlerschranken vorliegen, aber für komplexe RB-Probleme ohne Fehlerschranken ist obiges ein guter Test.
- Validierung für Programmcode: Wähle Basis aus Snapshots  $\varphi_i = u(\mu^i), i = 1, \dots, N,$ ohne Orthonormierung, dann muss  $\underline{u}_N(\mu^i) = \underline{e}_i \in \mathbb{R}^N$  ein Einheitsvektor sein.

#### 3.2**Fehleranalyse**

Satz 3.9 (Céa, Beziehung zur Bestapproximation)

Für alle  $\mu \in \mathcal{P}$  gilt

$$||u(\mu) - u_N(\mu)|| \le \frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)} \inf_{v \in X} ||u - v||$$

Beweis.  $\forall v \in X_N$  mit Stetigkeit und Koerzivität

$$\alpha \|u - u_N\|^2 \le a(u - u_N, u - u_N) = a(u - u_N, u - v) + \underbrace{a(u - u_N, v - u_N)}_{=0 \text{ (Galerkin-Orth.)}}$$

$$\leq \gamma(\mu) \|u - u_N\| \|u - v\|$$

Division durch  $\alpha$ ,  $||u - u_N||$  liefert

$$||u - u_N|| \le \frac{\gamma}{\alpha} ||u - v||$$

also Behauptung durch Infimum-Bildung.

#### Bemerkung.

- i) Ähnliche Bestapproximationsaussagen gelten auch für andere Interpolationstechniken, aber die zugehörige Lebesgue-Konstante divergiert meist mit wachsender Dimension N. Obiges ist konzeptioneller Vorteil von Galerkin-Projektion über anderen Interpolationstechniken, da  $\frac{\gamma}{\alpha}$  unabhängig von N beschränkt bleibt. "Quasi-Optimalität" der Galerkin-Projektion/des RB-Ansatzes.
- ii) Falls  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  zusätzlich symmetrisch ist, kann um eine "Wurzel" verbessert werden mittels Normäquivalenz 2.5 und Bestapproximation der orthogonalen Projektion (Aufg. 1/Blatt 1)

$$\begin{split} & \sqrt{\alpha} \|u - u_N\| \overset{2.5}{\leq} \|u - u_N\|_{\mu} = \|u - P_{\mu}u\|_{\mu} = \inf_{v \in X_N} \|u - v\|_{\mu} \overset{2.5}{\leq} \sqrt{\gamma} \inf_{v \in X_N} \|u - v\| \\ & \Rightarrow \|u - u_N\| \leq \sqrt{\frac{\gamma}{\alpha}} \inf_{v \in X_N} \|u - v\| \end{split}$$

iii) Implikation von 3.9: Wähle guten Approximationsraum  $X_N$ , so wird Galerkin-Projektion/RB-Approximation auch garantiert gut sein.

#### Satz 3.10 (Ausgabe und Bestapproximation)

i) Für alle  $\mu \in \mathcal{P}$  gilt

$$|s(\mu) - s_N(\mu)| \le ||l(\cdot; \mu)||_{X'} \frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)} \inf_{v \in X_N} ||u - v||$$

ii) Für den sog. "compliant" Fall (d.h.  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  symmetrisch und l=f) gilt sogar

$$0 \le s(\mu) - s_N(\mu) = \|u - u_N\|_{\mu}^2$$

$$= \inf_{v \in X_N} \|u - v\|_{\mu}^2$$

$$\le \gamma(\mu) \inf_{v \in X_N} \|u - v\|^2$$

Beweis.

i) Klar mit Céa, Bestapproximation und Linearität

$$|s(\mu) - s_N(\mu)| = |l(u) - l(u_N)| = |l(u - u_N)| \le ||l|| ||u - u_N|| \le ||l|| \frac{\gamma}{\alpha} \inf_{v \in X_N} ||u - v||$$

ii) Wegen  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  symmetrisch gilt wie in voriger Bemerkung

$$||u - u_N||_{\mu} = ||u - P_{\mu}u||_{\mu} = \inf_{v \in X_N} ||u - v||$$
(3.3)

Damit

$$s(\mu) - s_{N}(\mu) = l(u) - l(u_{N}) \stackrel{f=l}{=} f(u) - f(u_{N}) = f(u - u_{N})$$

$$= a(u, u - u_{N}) - \underbrace{a(u_{N}, u - u_{N})}_{=0 \text{ (Gal.-Orth./Symm.)}} = \|u - u_{N}\|_{\mu}^{2}$$

$$\stackrel{3.3}{=} \inf_{v \in X_{N}} \|u - v\|_{\mu}^{2}$$

$$\stackrel{2.5}{\leq} \gamma \inf_{v \in X_{N}} \|u - v\|^{2}$$

Also insbesondere  $s - s_N = ||u - u_N||_{\mu}^2 \ge 0$ .

Bemerkung.

- Im "compliant" Fall ist der Ausgabefehler i.A. sehr klein, da das Quadrat des RB-Fehlers eingeht.
- Im "nicht-compliant" Fall geht der RB-Fehler nur linear in die Schranke ein, das wird später durch primal-duale Technik verbessert.
- Aus ii) folgt nicht nur Fehlerschranke, sondern sogar Vorzeichen-Information,  $s_N(\mu)$  ist untere Schranke für s.

Korollar 3.11 (Monotoner Fehlerabfall in Energienorm)

Falls  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  symmetrisch,  $(X_N)_{N=1}^{N_{\max}}$  Folge von RB-Räumen, mit  $X_N\subseteq X_{N'}, \forall N\leq N'$  ("hierarchische Räume") und für  $\mu\in\mathcal{P}$  setze  $e_{u,N}:=u(\mu)-u_N(\mu), e_{s,N}:=s(\mu)-s_N(\mu).$ 

- i) Dann ist  $(\|e_{u,N}\|_{\mu})_{N=1}^{N_{\text{max}}}$  monoton fallend.
- ii) Falls l = f (also "compliant" Fall) ist  $e_{s,N}$  monoton fallend.

Beweis.

i) Mit (3.3) gilt für  $N \leq N'$ 

$$||e_{u,N}||_{\mu} = ||u - u_N||_{\mu} \stackrel{(3.3)}{=} \inf_{v \in X_N} ||u - v||_{\mu} \ge \inf_{v \in X_{N'}} ||u - v||_{\mu} \stackrel{(3.3)}{=} ||e_{u,N'}||_{\mu}$$

ii) Mit Satz 3.10 ii) gilt

 $e_{s,N} = \|e_{u,N}\|_{\mu}^2,$ also Behauptung folgt mit i)

Bemerkung.

• "Worst-case" ist Stagnation des Fehlers (unrealistisch, jeder neue Basisvektor müsste orthogonal zum Fehler  $e_N(\mu)$  sein). In Praxis ist bei geschickter Basiswahl und "glatten" Problemen exponentielle Konvergenz zu erwarten, siehe Basisgenerierung, §3.4.

• Monotonie gilt nicht notwendigerweise bezüglich anderen Normen trotz Normäquivalenz

$$c\|e_{u,N}\|_{\mu} \leq \|e_{u,N}\| \leq C\|e_{u,N}\|_{\mu}$$
, mit  $c, C$  unabhängig von  $N$ 

Fehlernorm  $||e_{u,N}||$  kann gelegentlich anwachsen, bleibt aber in einem "Korridor", welcher monoton fällt.

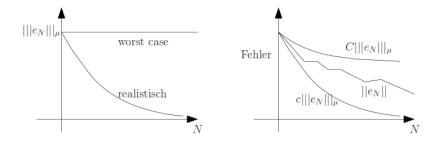


Abbildung 6: Fehlerabfall mit wachsender reduzierter Dimension. (aus B. Haasdonk, Reduzierte-Basis-Methoden, Skript zur Vorlesung SS 2011, Universität Stuttgart, IANS-Report 4/11, 2011.)

Bemerkung (Gleichmäßige Konvergenz von Lagrange RB-Ansatz).

• Sei  $\mathcal{P}$  kompakt und  $S_N := \{\mu^1, \dots, \mu^N\} \subset \mathcal{P}, N \in \mathbb{N}$ , sodass die sog. Füll-Distanz (fill-distance)  $h_N$  gegen 0 geht:

ce) 
$$h_N$$
 gegen 0 geht: 
$$h_N:=\sup_{\mu\in\mathcal{P}}\operatorname{dist}(\mu,S_N),\quad\operatorname{dist}(\mu,S_N):=\min_{\mu'\in S_N}\|\mu-\mu'\|$$
 
$$\lim_{N\to\infty}h_N=0$$

• Falls  $u(\mu)$ ,  $u_N(\mu)$  Lipschitz-stetig mit Lipschitz-Konstante  $L_u$  unabhängig von N, so folgt für alle N,  $\mu$  und "nächstes"  $\mu^* := \arg\min_{\mu' \in S_N} \|\mu - \mu'\|$ :

$$||u(\mu) - u_N(\mu)|| \le ||u(\mu) - u(\mu^*)|| + ||u(\mu^*) - u_N(\mu^*)|| + ||u_N(\mu^*) - u_N(\mu)||$$

$$\le L_u \underbrace{||\mu - \mu^*||}_{< h_N} + 0 + L_u \underbrace{||\mu - \mu^*||}_{< h_N} \le 2L_u h_N$$

• Also folgt uniforme Konvergenz

$$\lim_{N \to \infty} \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \|u(\mu) - u_N(\mu)\| = 0$$

- Jedoch Konvergenzrate linear in  $h_N$  ist nicht praktisch bedeutsam, weil  $h_N$  sehr langsam mit N abfällt, also muss N sehr groß sein, um kleinen Fehler zu garantieren.
- Wir werden sehen, dass bei gleichmäßig koerziven Problemen und geschickter Wahl der  $\mu^i$  sogar exponentielle Konvergenz erreicht wird.

## Lemma 3.12 (Fehler-Residuums-Beziehung)

Für  $\mu \in \mathcal{P}$  definieren wir mittels der RB-Lösung  $u_N$  das Residuum  $r(\cdot; \mu) \in X'$  bzw. seinen Riesz-Repräsentanten  $v_r(\mu) \in X$ 

$$\langle v_r(\mu), v \rangle_X := r(v; \mu) := f(v; \mu) - a(u_N(\mu), v; \mu) \quad \forall v \in X$$

Dann erfüllt der Fehler  $e(\mu) := u(\mu) - u_N(\mu)$ 

$$a(e(\mu), v; \mu) = r(v; \mu) \quad \forall v \in X$$

Beweis. 
$$a(e(\mu), v; \mu) = \underbrace{a(u, v)}_{f(v)} - a(u_N, v) = r(v)$$

#### Bemerkung.

- Fehler erfüllt " $(P(\mu))$  mit Residuum als rechte Seite"
- Insbesondere ist  $r(v; \mu) = 0 \ \forall v \in X_N$  (wegen Galerkin-Orthogonalität)
- $r(\cdot;\mu) = 0 \Rightarrow e = 0$

## Satz 3.13 (A-posteriori Fehlerschätzer, absoluter Fehler)

Sei  $\mu \in \mathcal{P}$ ,  $u(\mu)$  bzw.  $u_N(\mu)$  Lösung von  $(P(\mu))$ ,  $(P_N(\mu))$  und  $e = u - u_N$ . Sei  $\alpha_{LB}(\mu)$  eine untere Schranke für  $\alpha(\mu)$  und  $v_r \in X$  Riesz-Repräsentant von  $r(\cdot; \mu)$  aus Lemma 3.12. Dann gelten folgende Schranken

i) Fehler in Energienorm

$$||e(\mu)||_{\mu} \le \Delta_N^{en}(\mu) := \frac{||v_r||}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}}$$

ii) Fehler in X-Norm  $\|\cdot\|$ 

$$||e(\mu)|| \le \Delta_N(\mu) := \frac{||v_r||}{\alpha_{LB}(\mu)}$$

iii) Ausgabefehler

$$|s(\mu) - s_N(\mu)| \le \Delta_{N,s}(\mu) := ||l(\cdot; \mu)||\Delta_N(\mu)$$

Beweis.

i) Normäquivalenz 2.5 impliziert

$$||e|| \le \frac{||e||_{\mu}}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}}$$

Damit folgt

$$\|e\|_{\mu}^{2} = a_{s}(e,e) = a(e,e) = r(e) = \langle v_{r}, e \rangle \leq \|v_{r}\| \|e\| \leq \frac{\|v_{r}\|}{\sqrt{\alpha_{LR}(\mu)}} \|e\|_{\mu}$$

Division durch  $||e||_{\mu}$  liefert Behauptung i).

ii) Koerzivität liefert

$$\alpha_{LB}(\mu) \|e\|^2 \le a(e,e) = r(e) = \langle v_r, e \rangle \le \|v_r\| \|e\|$$

Division durch  $\alpha_{LB}$  und ||e|| liefert ii).

iii ) Stetigkeit von l liefert

$$|s(\mu) - s_N(\mu)| = |l(u - u_N; \mu)| \le ||l|||u - u_N|| \stackrel{ii)}{\le} ||l||\Delta_N$$

Bemerkung.

- $\alpha_{LB}(\mu)$  soll eine schnell berechenbare untere Schranke an  $\alpha(\mu)$  sein, z.B.  $\alpha_{LB}(\mu) := \bar{\alpha}$  falls  $\bar{\alpha}$  bekannt, andere Möglichkeiten folgen später ("min  $\Theta$ ", "SCM").
- $\Delta_N$  ist also immer um Faktor  $\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}$  schlechter.
- Beschränkung des Fehlers durch Residuums-Norm ist bekannte Technik aus FEM, um FEM-Lösung u<sub>h</sub> gegen Sobolev-Raum Lösung u abzuschätzen. In diesem Fall ist X ∞-dimensional und Residuums-Norm algorithmisch nicht berechenbar. In RB-Methoden wird ||v<sub>r</sub>|| eine berechenbare Größe sobald X endlich-dimensional, z.B. FEM-Raum, ist. Für Residuum ist u<sub>N</sub>(μ) erforderlich, daher sind Schranken "a posteriori".
- Allgemeines Vorgehen (und alternative Begründung für ii)) zur Herleitung von Fehlerschranken: Zeige, dass Fehler e erfüllt  $(P(\mu))$  mit rechter Seite, genannt r (Residuum), wende a-priori Stabilitätsaussage an:

$$||e|| \le \frac{||r||}{\alpha(\mu)}$$
 z.B. Lax-Milgram

und erhalte berechenbare Größe durch Wahl  $X = X_{FEM}$  und untere Schranke  $\alpha_{LB}(\mu) \leq \alpha(\mu)$ .

- Weil die Schranken beweisbare obere Schranken an Fehler darstellen, nennt man sie "rigorose" Fehlerschranken (vgl. "zuverlässige" Schätzer in FEM, bei denen jedoch die Konstante unbekannt ist).
- Fehlerschranken liefern eine Absicherung für RB-Methoden, "certified" RB-Methode, im Gegensatz zu vielen anderen Reduktionsmethoden (z.B. Krylov-Raum-Methoden).
- Ausgabefehler ist grob, indem  $\Delta_N$  nur linear eingeht. Verbesserungen können für den "compliant" Fall oder mit primal-dual Techniken erreicht werden. ( $\rightsquigarrow$  §3.5)

Korollar 3.14 (Verschwindende Fehlerschranke)

Falls 
$$u(\mu) = u_N(\mu)$$
 dann ist  $\Delta_N(\mu) = \Delta_N^{en}(\mu) = \Delta_{N,s}(\mu) = 0$ 

Beweis.

$$0 = a(0,v;\mu) = a(e,v;\mu) = r(v;\mu)$$
  
$$\Rightarrow r \equiv 0 \Rightarrow ||v_r|| = 0 \Rightarrow \Delta_N = \Delta_N^{en} = \Delta_{N,s} = 0$$

Bemerkung.

- Dies ist initialer Wunsch an eine Fehlerschranke: diese soll verschwinden falls exakte Approximation vorliegt. Dies ist Grundlage dafür, dass der Faktor der Überschätzung endlich ist.
- Aussage ist trivial für *effektive* Fehlerschätzer (sehen wir bald), aber in komplexen Problemen kann 3.14 schon das maximal erreichbare sein.
- 3.14 ist wieder sinnvoll um Programmcode zu validieren.

Satz 3.15 (A-posteriori Fehlerschranken, relative Fehler)

Mit Bezeichnungen/Voraussetzungen aus 3.13 und unter Annahme, dass alle Brüche im Folgenden wohldefiniert sind, gilt:

i) Für den relativen Fehler gilt in Energienorm:

$$\frac{\|e(\mu)\|_{\mu}}{\|u(\mu)\|_{\mu}} \leq \Delta_{N}^{en,rel}(\mu) := 2 \frac{\|v_{r}\|}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}} \cdot \frac{1}{\|u_{N}(\mu)\|_{\mu}} \quad \text{falls} \quad \Delta_{N}^{en,rel} \leq 1$$

ii) Für den relativen Fehler gilt in X-Norm:

$$\frac{\|e(\mu)\|}{\|u(\mu)\|} \le \Delta_N^{rel}(\mu) := 2 \frac{\|v_r\|}{\alpha_{LB}(\mu)} \cdot \frac{1}{\|u_N(\mu)\|} \quad \text{falls} \quad \Delta_N^{rel} \le 1$$

Beweis.

i) Falls  $\Delta_N^{en,rel}(\mu) \leq 1$ , so ist

$$\left| \frac{\|u\|_{\mu} - \|u_{N}\|_{\mu}}{\|u_{N}\|_{\mu}} \right| \stackrel{\Delta\text{-Ungl.}}{\leq} \frac{\|u - u_{N}\|_{\mu}}{\|u_{N}\|_{\mu}} = \frac{\|e\|_{\mu}}{\|u_{N}\|_{\mu}} \stackrel{3.13 \text{ i}}{\leq} \frac{\|v_{r}\|}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)} \|u_{N}\|_{\mu}}$$

$$= \frac{1}{2} \Delta_{N}^{en,rel}(\mu) \leq \frac{1}{2}$$

Falls  $||u_N||_{\mu} > ||u||_{\mu}$  gilt  $||u_N||_{\mu} - ||u||_{\mu} \le \frac{1}{2} ||u_N||_{\mu}$  also

$$\frac{1}{2}||u_N||_{\mu} \le ||u||_{\mu} \tag{*}$$

Falls  $||u||_{\mu} \ge ||u_N||_{\mu}$ , so ist (\*) klar. Damit folgt

$$\frac{\|e\|_{\mu}}{\|u\|_{\mu}} \stackrel{3.13 \text{ i})}{\leq} \frac{\|v_r\|}{\sqrt{\alpha_{LB}}} \cdot \frac{1}{\|u\|_{\mu}} \stackrel{(*)}{\leq} \frac{\|v_r\|}{\sqrt{\alpha_{LB}}} \cdot \frac{1}{\|u_N\|_{\mu}} \cdot 2 = \Delta_N^{en,rel}(\mu)$$

ii) analog zu i).

#### Bemerkung.

• Analog folgt auch relativer Ausgabefehlerschätzer

$$\frac{|s(\mu) - s_N(\mu)|}{|s(\mu)|} \le \Delta_{N,s}^{rel}(\mu) := \frac{\|l(\cdot;\mu)\| \cdot \Delta_N}{|s_N(\mu)|} \cdot 2 \quad \text{falls} \quad \Delta_{N,s}^{rel}(\mu) \le 1$$

• Relative Fehlerschranken sind nur mit Zusatzbedingung ( $\Delta^{rel}_* \leq 1$ ) gültig. Diese Bedingung ist jedoch konkret überprüfbar. Falls  $\Delta^{rel}_N(\mu) > 1$ , sollte der RB-Raum verbessert werden.

#### Satz 3.16 (Effektivität der Fehlerschranken)

Mit Bezeichnungen aus 3.13 sei  $u(\mu) \neq u_N(\mu)$  und  $\gamma_{UB}(\mu) < \infty$  eine obere Schranke an  $\gamma(\mu)$ . Dann sind die *Effektivitäten*  $\eta_N^{en}(\mu)$  und  $\eta_N(\mu)$  definiert und beschränkt durch

i) 
$$\eta_N^{en}(\mu):=\frac{\Delta_N^{en}(\mu)}{\|e\|_\mu}\leq \frac{\gamma_{UB}(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}$$

Falls  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  symmetrisch, gilt sogar  $\eta_N^{en}(\mu) \leq \sqrt{\frac{\gamma_{UB}(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}}$ 

ii ) 
$$\eta_N(\mu) := \frac{\Delta_N(\mu)}{\|e\|_\mu} \le \frac{\gamma_{UB}(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}$$

Beweis.

ii) 
$$||v_r||^2 = \langle v_r, v_r \rangle = r(v_r) = a(e, v_r) \le \gamma_{UB}(\mu) ||e|| ||v_r||$$
  
 $||v_r|| \le \gamma_{UB}(\mu) ||e||$  (3.4)

Damit

$$\frac{\Delta_N(\mu)}{\|e\|} = \frac{\|v_r\|}{\alpha_{LB}} \cdot \frac{1}{\|e\|} \stackrel{(3.4)}{\leq} \frac{\gamma_{UB}}{\alpha_{LB}} \cdot \frac{\|e\|}{\|e\|}$$

i) 
$$\frac{\Delta_N^{en}(\mu)}{\|e\|_{\mu}} = \frac{\|v_r\|}{\sqrt{\alpha_{LB}}} \cdot \frac{1}{\|e\|_{\mu}} \leq \frac{\|v_r\|}{\alpha_{LB}} \cdot \frac{1}{\|e\|} \stackrel{\text{ii}}{\leq} \frac{\gamma_{UB}}{\alpha_{LB}}$$

Falls  $a(\,\cdot\,,\cdot\,)$  symmetrisch, gilt wegen Normäquivalenz

$$||v_r||_{\mu} \le \sqrt{\gamma_{UB}} ||v_r||$$

und

$$||v_r||^2 = a(e, v_r) \stackrel{\text{CS}}{\leq} ||e||_{\mu} ||v_r||_{\mu} \quad \Rightarrow \quad ||v_r|| \leq ||e||_{\mu} \cdot \sqrt{\gamma_{UB}}$$

Damit

$$\frac{\Delta_N^{en}(\mu)}{\|e\|_{\mu}} = \frac{\|v_r\|}{\sqrt{\alpha_{LB}}} \cdot \frac{1}{\|e\|_{\mu}} \le \frac{\|e\|_{\mu} \cdot \sqrt{\gamma_{UB}}}{\sqrt{\alpha_{LB}} \cdot \|e\|_{\mu}}$$

Bemerkung.

- Wir nennen  $\Delta_N$ ,  $\Delta_N^{en}$  daher "effektive" Fehlerschranken weil Faktor der Überschätzung höchstens  $\frac{\gamma_{UB}}{\alpha_{LB}}$  beträgt.
- "Rigorosität" also äquivalent mit  $\eta_N(\mu) \geq 1$ .
- Für den Ausgabefehler  $\Delta_{N,s}(\mu)$  ohne weitere Annahmen keine Effektivität beweisbar. Tatsächlich kann  $\frac{\Delta_{N,s}}{|s-s_N|}$  beliebig groß oder nicht definiert sein, falls  $\Delta_{N,s} \neq 0$ , aber  $s(\mu) = s_N(\mu)$ :

Wähle  $X_N$  und  $\mu$  so dass  $u(\mu) \neq u_N(\mu)$ , wird erreicht durch  $u(\mu) \notin X_N$ 

$$\Rightarrow e(\mu) \neq 0 \Rightarrow \Delta_N \neq 0, \Delta_{N,s} \neq 0$$
 falls  $l \neq 0$ 

Wähle  $l(\cdot; \mu) \neq 0$ , so dass  $l(u - u_N; \mu) = 0$ 

$$\Rightarrow s(\mu) - s_N(\mu) = l(u - u_N; \mu) = 0$$

• Wir nennen die Fehlerschranken auch Fehlerschätzer weil sie äquivalent zum Fehler sind.

$$||e|| \le \Delta_N \le \eta_N ||e||$$

Satz 3.17 (Effektivität, relative Fehlerschätzer)

Für  $\Delta_N^{rel}(\mu)$  aus 3.15 ist Effektivität definiert und beschränkt durch

$$\eta_N^{rel}(\mu) := \frac{\Delta_N^{rel}(\mu)}{\frac{\|e\|}{\|u\|}} \le 3 \frac{\gamma_{UB}(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)} \quad \text{falls} \quad \Delta_N^{rel}(\mu) \le 1$$

Beweis. Wie in Beweis zu 3.15 impliziert  $\Delta_N^{rel} \leq 1$ :

$$\left| \frac{\|u\| - \|u_N\|}{\|u\|} \right| \le \frac{1}{2}$$

Falls  $||u_N|| \le ||u||$  so gilt  $||u|| - ||u_N|| \le \frac{1}{2} ||u_N||$  also

$$||u|| \le \frac{3}{2}||u_N||$$

Falls  $||u_N|| > ||u||$ , so ist (\*) klar. Dann gilt

$$\eta_N^{rel}(\mu) = \underbrace{\frac{2\|v_r\|}{\alpha_{LB}(\mu)\|u_N\|}}_{\Delta_N^{rel}} \cdot \frac{1}{\frac{\|e\|}{\|u\|}} \stackrel{(3.4)}{\leq} 2\frac{\gamma_{UB}\|e\|}{\alpha_{LB}\|e\|} \cdot \frac{\|u\|}{\|u_N\|} \stackrel{(*)}{\leq} 3\frac{\gamma_{UB}}{\alpha_{LB}}$$

Bemerkung.

- Ähnlich für  $\Delta_N^{en,rel}$
- Verbesserung von Schranken und Effektivität durch Normwechsel.

Wähle  $\bar{\mu} \in \mathcal{P}$  und  $\|u\| := \|u\|_{\bar{\mu}}$  als neue Norm auf X. Dann gilt für symmetrisches  $a: \alpha(\bar{\mu}) = 1 = \gamma(\bar{\mu})$  also Effektivitäten  $\eta_N, \eta_N^{en} = 1$ , Schätzer sind genau der echte Fehler. Dies lässt  $u_N$  unberührt, liefert aber bessere Fehlerschätzung. Im Fall von Stetigkeit bzgl.  $\mu$  kann auch in Umgebung von  $\bar{\mu}$  gute Effektivität erwartet werden.

Satz 3.18 (Ausgabefehlerschranke und Effektivität, compliant Fall)

Sei  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  symmetrisch, l=f. Dann erhalte verbesserte Ausgabeschranke

$$0 \le s(\mu) - s_N(\mu) \le \bar{\Delta}_{N,s}(\mu) := \frac{\|v_r\|^2}{\alpha_{LB}}$$

und Effektivität

$$\bar{\eta}_{N,s}(\mu) := \frac{\bar{\Delta}_{N,s}(\mu)}{s(\mu) - s_N(\mu)} \le \frac{\gamma_{UB}(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}$$

Beweis. Nach Satz 3.10 ii) und 3.13 gilt

$$0 \stackrel{3.10}{\leq} s(\mu) - s_N(\mu) = \|u - u_N\|_{\mu}^2 = \|e\|_{\mu}^2 \stackrel{3.13}{\leq} \Delta_N^{en}(\mu)^2 = \bar{\Delta}_{N,s}(\mu)$$

Für Effektivität gilt entsprechend mit 3.16 i)

$$\bar{\eta}_{N,s}(\mu) = \frac{\bar{\Delta}_{N,s}}{s(\mu) - s_N(\mu)} \stackrel{3.10}{=} \frac{\Delta_N^{en}(\mu)^2}{\|u - u_N\|_{\mu}^2} = \eta_N^{en}(\mu)^2 \stackrel{3.16}{=} \sqrt{\frac{\gamma_{UB}}{\alpha_{LB}}}^2 = \frac{\gamma_{UB}}{\alpha_{LB}}$$

Bemerkung. Analog kann man im compliant Fall eine relative Ausgabefehlerschranke und Effektivität beweisen.

$$\frac{s(\mu) - s_N(\mu)}{s(\mu)} \le \bar{\Delta}_{N,s}^{rel}(\mu) := \frac{\|v_r\|^2}{\alpha_{LB} s_N(\mu)}$$

und

$$\bar{\eta}_{N,s}^{rel}(\mu) := \frac{\bar{\Delta}_{N,s}^{rel}}{\frac{s(\mu) - s_N(\mu)}{s(\mu)}} \le 2 \frac{\gamma_{UB}(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}$$

falls  $\bar{\Delta}_{N,s}^{rel}(\mu) \leq 1$ .

Bemerkung (Zusammenfassende Relevanz der Fehlerschätzer).

- Rigorose obere Schranke für tatsächlichen Fehler nicht nur "Indikatoren" wie bei FEM.
- Effektivität Faktor der Überschätzung des Fehlers ist klein und bleibt beschränkt. Insbesondere:

$$e(\mu) = 0 \Rightarrow \Delta_N(\mu) = 0$$

also "a-posteriori" exakte Approximation verifizierbar.

- Theoretische Untermauerung der i.A. empirischen Basiswahl.
- Unabhängig von Basiswahl sind Fehlerschätzer anwendbar, auch für nicht-Snapshot-Basen (z.B. Krylov-Unterräume, etc.).
- Effiziente Berechnung: Durch Offline-Online-Zerlegung ( $\rightsquigarrow$  §3.3) ist neben reduzierter Simulation auch Fehlerschranken & Effektivitätsschranken schnell berechenbar.
- Weitere Einsatzmöglichkeiten: Offline zur Basisgenerierung ( $\leadsto$  §3.4) und Online zur adaptiven Dimensionswahl.

#### Numerische Beispiele

**demos\_chapter3(1)** Thermischer Block aus Beispiel 2.10,  $B_1 = B_2 = 2$ ; N = 5,  $\langle \cdot, \cdot \rangle_X := \langle \cdot, \cdot \rangle_{H_0^1}$ ,

$$S_N = \{0.1, 0.5, 0.9, 1.4, 1.7\} \times \{0.1\}^3 \subseteq \mathbb{R}^4$$

Erkenntnisse:

- Fehlerschätzer kann günstig für sehr feines Parametergitter berechnet werden, Fehler ist teuer zu berechnen, daher nur in wenigen Punkten.
- Fehler und Schätzer sind 0 für Basisparameter (bestätigt 3.8, 3.14).
- Fehlerschätzer ist obere Schranke für Fehler gemäß 3.13.
- Für kleine Werte von  $\mu_1$  größere Fehler  $\Rightarrow$  gute Wahl von  $S_N$  wird vermutlich (und später bewiesen) hier mehr Samples benötigen.

**demos\_chapter3(2)** Effektivitäten  $\eta_N(\mu)$  und obere Schranke  $\frac{\gamma}{\alpha} \leq \frac{\mu_{max}}{\mu_{min}}$ . Erkenntnisse:

- Effektivitäten sind gut, nur etwa Faktor 10 über Fehler.
- Obere Schranke für Effektivität gemäß 3.16.
- Effektivitäten sind undefiniert für Parametersamples  $\mu \in S_N$  (Division durch Null).

 $demos\_chapter3(3)$  Fehlerkonvergenz bezüglich N.

$$B_1 = B_2 = 3, \quad \mu_1 \in [0.5, 2], \quad \mu = (\mu_1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^9$$

Lagrange-Basis mit Gram-Schmidt-Orthonormierung,  $\{\mu_i\}_{i=1}^N$  äquidistant. Erkenntnisse für Testfehler: (Maximierung über 100 zufällige Parameter)

$$S_{test} \subset \mathcal{P}, \quad |S_{test}| = 100$$

- Exponentielle Konvergenz für Fehler und Schätzer.
- Obere Schranke sehr gut.
- Numerische Ungenauigkeiten für Schätzer.

## 3.3 Offline/Online-Zerlegung

Bisher:

- $(P_N(\mu))$  niedrigdimensional, aber noch keine schnelle Berechnungsvorschrift.
- Um "berechenbares" Verfahren zu erhalten: Forderung dim  $X < \infty$  in diesem Kapitel.
- Für effiziente Berechnung ist separierbare Parameterabhängigkeit von  $(P(\mu))$  essenziell.

Offline-Phase:

• Typischerweise berechnungsintensiv, Komplexität polynomiell in  $H := \dim X$ 

- Einmal durchgeführt.
- Berechnung hochdimensionaler Daten: Snapshots, reduzierte Basis, Riesz-Repräsentanten. ("detailed\_data" in RBmatlab)
- Projektion der hochdimensionalen Daten in parameterunabhängigen niedrigdimensionalen Daten. ("reduced\_data")

#### Online-Phase:

- Schnelle Berechnung, Komplexität polynomiell in  $N, Q_a, Q_f, Q_l, unabhängig von H$
- Typischerweise häufig ausgeführt für variierendes  $\mu$ .
- Assemblierung des reduzierten parametrischen Systems für  $(P_N(\mu))$ .
- Lösen von  $(P_N(\mu))$ .
- Berechnung von Fehlerschranken und Effektivität.

#### Komplexitätsbetrachtung der bisherigen Formulierung

- Mit dim X = H und dünnbesetzter Matrix für  $(P(\mu))$  ist Lösung z.B. in  $\mathcal{O}(H^2)$  erreichbar (z.B. H Schritte eines iterativen Lösers mit  $\mathcal{O}(H)$  Komplexität für Matrix-Vektor-Multiplikation dank Dünnbesetztheit).
- $N \times N$  System für  $(P_N(\mu))$  ist vollbesetzt, also in  $\mathcal{O}(N^3)$  lösbar, also  $N \ll H$  erforderlich, um Gewinn zu bewirken.
- Genaue Betrachtung der Berechnung von  $u_N(\mu)$ :
  - 1. N Snapshots berechnen mittels  $(P(\mu))$ :  $\mathcal{O}(N \cdot H^2)$
  - 2.  $N^2$  Auswertungen von  $a(\varphi_i, \varphi_j; \mu)$ :  $\mathcal{O}(N^2 \cdot H)$
  - 3. N Auswertungen von  $f(\varphi_i; \mu) : \mathcal{O}(N \cdot H)$
  - 4. Lösen des  $N \times N$  Systems für  $(P_N(\mu))$ :  $\mathcal{O}(N^3)$
- Wir haben noch keine Offline/Online-Zerlegung: 1. gehört zur Offline-Phase, 4. gehört zur Online-Phase, aber 2. und 3. können nicht in Offline-Phase berechnet werden (wegen Parameterabhängigkeit) und nicht in Online-Phase (wegen *H*-Abhängigkeit).
  - $\rightarrow$  Zerlegung von 2. und 3. mittels separierbarer Parameterabhängigkeit

**Definition 3.19** (Notation für Zerlegung von  $(P(\mu))$ )

Unter Annahme  $H = \dim X < \infty, X = \operatorname{span} \{\psi_i\}_{i=1}^H$ , definiere Matrix

 $K := (\langle \psi_i, \psi_j \rangle)_{i,j=1}^H \in \mathbb{R}^{H \times H}$  "Gram'sche Matrix" / "Skalarprodukt-Matrix"

Mit separierbare Parameterabhängigkeit definiere Matrizen und Vektoren

$$A^{q} := (a^{q}(\psi_{j}, \psi_{i}))_{i,j=1}^{H} \in \mathbb{R}^{H \times H}, \qquad q = 1, \dots, Q_{a}$$

$$\underline{f}^{q} := (f^{q}(\psi_{i}))_{i=1}^{H} \in \mathbb{R}^{H}, \qquad q = 1, \dots, Q_{f}$$

$$\underline{l}^{q} := (l^{q}(\psi_{i}))_{i=1}^{H} \in \mathbb{R}^{H}, \qquad q = 1, \dots, Q_{l}$$

Korollar 3.20 (Lösung von  $(P(\mu))$ )

Lösung von  $(P(\mu))$  wird erhalten durch Assemblieren des vollen Systems

$$A(\mu) = \sum_{q=1}^{Q_a} \Theta_a^q(\mu) \cdot A^q, \quad \underline{f}(\mu) = \sum_{q=1}^{Q_f} \Theta_f^q(\mu) \underline{f}^q, \quad \underline{l}(\mu) = \sum_{q=1}^{Q_l} \Theta_l^q(\mu) \underline{l}^q$$

und Lösen von  $A(\mu)\underline{u}(\mu)=\underline{f}(\mu)$ nach  $\underline{u}(\mu)=(u_i)_{i=1}^H\in\mathbb{R}^H$  und

$$u(\mu) = \sum_{i=1}^{H} u_i \varphi_i \in X, \quad s(\mu) = \underline{l}^T(\mu) \cdot \underline{u}(\mu)$$

Beweis. Klar mit Definitionen.

#### Bemerkung.

Das Vorliegen der A<sup>q</sup>, <u>f</u><sup>q</sup>, <u>l</u><sup>q</sup> ist nicht trivial im Fall von "fremden" Diskretisierungspaketen und stellt wesentliche Schwierigkeit in breiter praktischer Anwendung dar. Motivation für Eigenentwicklung von Diskretisierungscode.

 $\bullet$  Sinn von Matrix K ist Berechnung von Skalarprodukten und Normen, z.B. für

$$u = \sum u_i \psi_i, \quad v = \sum v_i \psi_i \in X \quad \text{für} \quad \underline{u} = (u_i), \underline{v} = (v_i)_{i=1}^H \in \mathbb{R}^H$$
$$\Rightarrow \langle u, v \rangle_X = \sum_{i,j} u_i v_j \langle \psi_i, \psi_j \rangle = \underline{u}^T K \underline{v}$$

**Korollar 3.21** (Offline-/Online- Zerlegung für  $(P_N(\mu))$ )

(Offline:) Nach Konstruktion einer Basis  $\Phi_N = \{\varphi_1,...,\varphi_N\}$  berechne parameter-unabhängige Komponenten-Matrizen & Vektoren

$$\begin{split} A_N^q := (a^q(\varphi_j, \varphi_i))_{i,j=1}^N \in \mathbb{R}^{N \times N} \,, \qquad q = 1, ..., Q_n \\ \underline{\mathbf{f}}_N^q := (f^q(\varphi_i))_{i=1}^N \,, \qquad \underline{\mathbf{l}}_N^q := (l^q(\varphi_i))_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N \,, \qquad q = 1, ..., Q_f/Q_l \end{split}$$

(Online:) Zu $\mu\in\mathcal{P}$ berechne Koeffizienten  $\Theta^q_a(\mu),\Theta^q_f(\mu),\Theta^q_l(\mu)$ und

$$\begin{split} A_N(\mu) := \sum_q \Theta^q_a(\mu) A_N^q \\ \underline{\mathbf{f}}_N(\mu) := \sum_q \Theta^q_f(\mu) \underline{\mathbf{f}}_N^q \,, \qquad \underline{\mathbf{l}}_N(\mu) := \sum_q \Theta^q_l(\mu) \underline{\mathbf{l}}_N^q \end{split}$$

Dies liefert genau das diskrete System  $A_N(\mu)\underline{\mathbf{u}}_N=f_N(\mu)$  aus 3.6 welches nach  $\underline{\mathbf{u}}_N$  gelöst wird und  $u_N(\mu), s_N(\mu)$  ergibt

Bemerkung (Einfache Berechnung von  $A_N^q, \underline{\mathbf{f}}_N^q, \underline{\mathbf{f}}_N^q$ ). Die reduzierten Komponenten benötigen keinerlei Integration über  $\Omega$  oder Gitterdurchlauf, falls hochdim.  $A^q$  vorliegen. Sei Basis  $\Phi_N$  gegeben durch Koeffizientenmatrix

$$\Phi_N := (\varphi_{ji})_{i=1, j=1}^H \sum_{j=1}^N \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad \text{mit } \varphi_j = \sum_{i=1}^H \varphi_{ji} \psi_i$$

Dann erhalte reduzierten Komponenten durch Matrix-Multi

$$A_N^q := \underline{\Phi}_N^T A^q ; \underline{\mathbf{f}}_N^q := \underline{\Phi}_N^T \underline{\mathbf{f}}^q ; \underline{\mathbf{l}}_N^q := \underline{\Phi}_N^T l^q$$

#### Bemerkung.

- Offline-Phase benötigt  $\mathcal{O}(NH^2 + NH(Q_f + Q_l) + N^2HQ_a)$  für die Berechnung von  $\Phi_N, f_N^q, l_N^q, A_N^q$  dominiert von der Basisgenerierung.
- Online-Phase skaliert mit  $\mathcal{O}(N^2Qa + N(Q_f + Q_l) + N^3)$  für Berechnung von  $A_N(\mu), f_N(\mu), l_N(\mu)$  und  $\underline{\mathbf{u}}_N(\mu)$  dominiert durch LGS lösen falls  $Q_a, Q_f, Q_l$  klein sind. Insbesondere komplett unabhängig von H, wie gewünscht.
- Laufzeitdiagramm Seien  $t_{detail}, t_{offline}, t_{online}$ , die Laufzeiten für einzelne Lösungen von  $(P(\mu))$ , Offline-Phase bzw. Online-Phase von  $(P_N(\mu))$ . Unter Annahme, dass diese konstant unter Parametervariation, erhalte affin-lineare Beziehung der Gesamtlaufzeit für k parameterische Lösungen

$$t(k) := k \cdot t_{detail}$$
,  $t_N(k) = t_{offline} + k \cdot t_{online}$ 

Das reduzierte Modell zahlt sich aus, sobald mehr als  $k* := \frac{t_{offline}}{t_{detail} - t_{online}}$  Lösungen berechnet werden sollen.

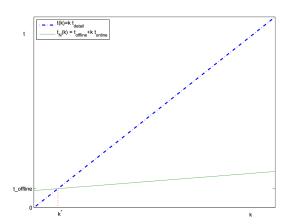


Abbildung 7: Laufzeiten mit wachsender Anzahl an Simulationen. (aus B. Haasdonk, Reduzierte-Basis-Methoden, Skript zur Vorlesung SS 2011, Universität Stuttgart, IANS-Report 4/11, 2011.)

**Bemerkung** (Keine Unterscheidung zwischen u und  $u_h$ ). Erinnerung: Wir unterscheiden (meistens) nicht in Notation zwischen  $u_h$  (FEM-Lösung) und u (Sobolev-Raum Lösung). Dies kann nun begründet werden:

- i) Die Online-Phase ist unabhängig von  $H = \dim(X)$ , daher kann H beliebig groß und damit  $u_h$  beliebig präzise gemacht werden durch geeignete Diskretisierung mit genügend feinem Gitter, so dass u und  $u_h$  praktisch ununterscheidbar sind  $(||u-u_h||$  beliebig klein aber  $(P_N(\mu))$  schnell lösbar).
- ii) In der Praxis wird Reduktionsfehler den Gesamtfehler dominieren, der (FEM-)Diskretisierungsfehler spielt untergeordnete Rolle.

$$\begin{split} \epsilon := ||u - u_h|| \ll ||u_h - u_N|| \\ \Rightarrow ||u_h - u_N|| - \epsilon \le \underbrace{||u - u_N||}_{\text{theoretisch das Ideal}} \le \underbrace{||u_h - u_N||}_{\text{theoretisch das Ideal}} + \epsilon \end{split}$$

also kontrollieren wir durch Fehlerschranken für  $||u_h - u_N||$  bis auf  $\epsilon$  auch den eigentlich interessanten Fehler  $||u - u_N||$ .

#### Offline-/Online- Zerlegung für Fehlerschranken/Effektivitätsschranken

Für schnelle Berechnung der Fehlerschranken & Effektivitätsschranken benötigen wir Zerlegung für

- Duale Norm des Residuums  $||r(\cdot;\mu)||_{X'} = ||v_r||$  für alle Fehlerschranken
- Duale Norm des Ausgabefunktionals  $||l(\cdot;\mu)||_{X'}$  für  $\Delta_{N,s}(\mu)$
- Norm  $||u_N(\mu)||_X$  der RB-Lösung für relativen Energienormfehlerschätzer  $\Delta_N^{en,rel}$ .
- Untere/obere Schranke  $\alpha_{LB}(\mu)$  bzw.  $\gamma_{UB}(\mu)$  für Koerzivitäts- bzw. Stetigkeitskonstante für Fehlerschätzer bzw. Effektivitätsschranken.

Separierbarkeit von  $(P(\mu))$  überträgt sich auf Residuum

Satz 3.22 (Separierbare Parameter-Abhängigkeit für  $r(\cdot;\mu)$ ) Seien a,f sep. parametrisch. Nach Riesz existieren  $v_f^q \in X$  mit  $\langle v_f^q,v\rangle = f^q(v) \ \forall v \in X,\ q=1,...,Q_f$  und  $v_a^{q,n} \in X$  mit  $\langle v_a^{q,n},v\rangle = a^q(\varphi_n,v),\ v \in X,\ q=1,...,Q_a,\ n=1,...,N$ Setze  $Q_r:=NQ_a+Q_f$  und Aufzählung von  $\{v_a^{q,n},v_f\}$  durch

$$(v_r^1,...,v_r^{Q_r}):=(v_f^1,...,v_f^{Q_f},v_a^{1,1},...,v_a^{Q_a,1},v_a^{1,2},...,v_a^{Q_a,2},...,v_a^{Q_a,N})$$

Für  $\mu \in \mathcal{P}$  sei  $u_N = \sum_{n=1}^N u_{Nn} \varphi_n$  Lösung von  $(P_N(\mu))$  und hiermit definiere

$$(\Theta_r^1(\mu), \dots, \Theta_r^{Q_r}(\mu)) := (\Theta_f^1(\mu), \dots, \Theta_f^{Q_f}(\mu), -\Theta_a^1(\mu), \dots, -\Theta_a^{Q_a}(\mu)u_{N1}, -\Theta_a^1(\mu)u_{N2}, \dots \\ \dots, -\Theta_a^{Q_a}(\mu)u_{N2}, \dots, -\Theta_a^{Q_a}(\mu)u_{NN})$$

Mit  $r^q(\cdot) := \langle v_r^q, \cdot \rangle \in X'$ ,  $q = 1,...,Q_r$  sind  $r(\cdot; \mu)$  und  $v_r(\mu)$  separierbar parametrisch via

$$r(\,\cdot\,;\mu) = \sum_{q=1}^{Q_r} \Theta^q_r(\mu) \cdot r^q(\,\cdot\,), \qquad v_r(\mu) = \sum_{q=1}^{Q_r} \Theta^q_r(\mu) \cdot v^q_r \qquad \forall \mu \in \mathcal{P}$$

Beweis. Definition und Linearität ergibt:

$$\begin{split} \langle v_r(\mu), v \rangle &= r(v; \mu) = f(v; \mu) - a(u_N(\mu), v; \mu) \\ &= \sum_q \Theta_f^q(\mu) f^q(v) - \sum_q \sum_n \Theta_a^q(\mu) u_{Nn} a^q(\varphi_n, v) \\ &= \langle \sum_q \Theta_f^q(\mu) v_f^q - \sum_q \sum_n \Theta_a^q(\mu) u_{Nn} v_a^q, v \rangle \\ &\underbrace{\sum_q \Theta_r^q(\mu) v_r^q} \\ &= \sum_{q=1}^{Q_r} \Theta_r^q(\mu) r^q(v) \qquad \forall v \in X \end{split}$$

Offensichtlich Berechnung von Riesz-Repräsentant notwendig, dies geschieht durch Ausnutzen der Endlichdim. von  $X = \text{span}\{\psi_i\}_{i=1}$  und  $K := (\langle \psi_i, \psi_j \rangle)_{i,j=1}^H$ 

Satz 3.23 (Berechnung von Riesz-Repr.)

Für  $g \in X'$  erhält man Koeffizientenvektor  $\underline{\mathbf{v}} = (v_i)_{i=1}^H \in \mathbb{R}^H$  seines Riesz-Repräsentanten  $v_g = \sum_{i=1}^H v_i \, \psi_i \in X$  durch lösen von

$$K\underline{\mathbf{v}} = \underline{g} \tag{3.5}$$

mit Vektor  $g := (g(\psi_i))_{i=1}^H \in \mathbb{R}^H$ 

Beweis. Für jedes  $u = \sum_{i=1}^H u_i \, \psi_i \in X$  mit Koeffizientenvektor  $\underline{\mathbf{u}} = (u_i)_{i=1}^H$  erhalten wir

$$g(u) = g(\sum u_i \psi_i) = \sum u_i g(\psi_i) = \underline{\mathbf{u}}^T \underline{g} \stackrel{3.5}{=} \underline{\mathbf{u}}^T K \underline{\mathbf{v}} = \langle u, v_g \rangle$$

**Bemerkung.** 3.5 ist typischerweise dünn besetzt, also mit iterativen LGS-Lösern berechenbar.

Korollar 3.24 (Offline-/Online- für Residuen-Norm)

(Offline:) Nach Offline von  $(P_N(\mu))$  gemäß 3.21 def.  $G_r := (r^q(v_r^{q'}))_{q,q'=1}^{Q_r} \in \mathbb{R}^{Q_r \times Q_r}$  mittels Residuen-Komponenten  $r^q$  und Riesz-Repr.  $v_r^q$  aus 3.22 (Online:) Für  $\mu \in \mathcal{P}$  und RB-Lösung  $\underline{\mathbf{u}}_N \in \mathbb{R}^N$  berechne Residuen-Koeff-Vektor  $\underline{\Theta}_r(\mu) = (\Theta_r^1(\mu), ..., \Theta_r^{Q_r}(\mu))^T \in \mathbb{R}^{Q_r}$ . Dann gilt:

$$||v_r(\mu)||_X = ||r(\cdot;\mu)||_X = \sqrt{\underline{\Theta}_r(\mu)^T \cdot G_r \underline{\Theta}_r(\mu)}$$
(3.6)

Beweis. Zunächst sehen wir  $G_r = (\langle v_r^q, v_r^{q'} \rangle)_{q,q'=1}^{Q_r}$ . Isometrie der Riesz-Abbildung & Separierbarkeit ergeben

$$||r(\mu)||_{X}^{2} = ||v_{r}(\mu)||_{X}^{2} = \langle \sum_{q=1}^{Q_{r}} \Theta_{r}^{q}(\mu) \, v_{r}^{q}, \sum_{q'=1}^{Q_{r}} \Theta_{r}^{q'}(\mu) \, v_{r}^{q'} \rangle = \underline{\Theta}_{r}^{T} \cdot G_{r} \cdot \underline{\Theta}_{r}(\mu)$$

Bemerkung (Stabilisierung durch Orthonormierung von  $\{v_r^q\}$ ). Wie in demos\_chapter3(3) gesehen, existiert eine Genauigkeitsgrenze für Fehlerschätzer, diese liegt in numerischen Auslöschungseffekten in 3.6 begründet, denn  $G_r$  ist potentiell schlecht konditioniert. Gemäß einer Idee von Behr & Rave 2014 lässt sich die Genauigkeit steigern, indem die  $\{v_r^q\}$  orthonormiert werden und 3.6 mit entsprechender Transformationsmatrix modifiziert werden.

Korollar 3.25 (Offline-/Online- Zerlegung für  $||l(\cdot;\mu)||_{X'}$ ) (Offline:) Berechne Riesz-Repr.  $v_l^q \in X$  der Ausgabekommponenten, d. h.

$$\langle v_l^q, v \rangle = l^q(v) \qquad \forall v \in X, \ q = 1, ..., Q_l$$

und def.  $G_l := (l^q(v_l^{q'})_{q,q'=1}^{Q_l} \text{ (Online:) Zu } \mu \in \mathcal{P} \text{ berechne } \underline{\Theta}_l(\mu) := (\Theta_l^1(\mu),...,\Theta_l^{Q_l}(\mu))$ und  $||l(\cdot;\mu)||_{X'} = \sqrt{\underline{\Theta}_l^T G_l \underline{\Theta}_l}$ 

Beweis. analog zu 3.24

Korollar 3.26 (Offline-/Online für  $||u_N(\mu)||_X$ ,  $||u_N(\mu)||_\mu$ ) (Offline:) Nach der Offline-Phase von  $(P_N(\mu))$  def.

$$K_N := (\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle)_{i,j=1}^N \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

(Online:) Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  berechne  $A_N(\mu)$  und  $\underline{\mathbf{u}}_N(\mu)$  durch Online-Phase von  $(P_N(\mu))$ 

$$||u_N(\mu)||_X = \sqrt{\underline{\mathbf{u}}_N^T K_N \underline{\mathbf{u}}_N}$$

$$||u_N(\mu)||_{\mu} = \sqrt{\underline{\mathbf{u}}_N^T \left(\frac{1}{2} (A_N(\mu) + A_N(\mu)^T)\right) \underline{\mathbf{u}}_N}$$

Beweis.

$$||u_N||^2 = \langle \sum_n u_{Nn} \varphi_n , \sum u_{Nn'} \varphi_{n'} \rangle = \sum_{n,n'} u_{Nn} u_{Nn'} \langle \varphi_n, \varphi_{n'} \rangle = \underline{\mathbf{u}}_N^T \cdot K_N \cdot \underline{\mathbf{u}}_N$$

analog für Energienorm mit  $A_{N,s} := \frac{1}{2}(A_N(\mu) + A_N(\mu)^T)$ 

**Bemerkung.**  $K_N$  wieder einfach aus K berechenbar (Übung).

Für Fehlerschranken fehlen noch untere Schranke  $\alpha_{LB}(\mu) \leq \alpha(\mu)$ , welche schnell berechenbar sein sollen. Falls  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  glm. koerziv bzgl.  $\mu$  und  $\bar{\alpha} < 0$  bekannt, so ist  $\alpha_{LB}(\mu) := \bar{\alpha}$  gültige Wahlmöglichkeit. In gewissen Fällen kann eine größere und damit bessere Schranke angegeben werden.

Satz 3.27 ("Min- $\Theta$ -Verfahren" zur Berechnung von  $\alpha_{LB}(\mu)$ )

Seien  $a^q(u,u) \geq 0 \ \forall q,u \text{ und } \Theta_a^q(\mu) > 0 \ \forall \mu$ 

(Offline:) Sei  $\alpha(\bar{\mu})$  für ein  $\bar{\mu} \in \mathcal{P}$  verfügbar

(Online:) Setze für  $\mu \in \mathcal{P}$ 

$$\alpha_{LB}(\mu) := \alpha(\bar{\mu}) \cdot \min_{q} \frac{\Theta_a^q(\mu)}{\Theta_a^q(\bar{\mu})}$$

Dann gilt  $0 < \alpha_{LB}(\mu) \le \alpha(\mu)$ 

Beweis. Wegen  $0 < \alpha(\bar{\mu})$  und  $0 < c(\mu) := \min_{q} \frac{\Theta_a^q(\mu)}{\Theta_a^q(\bar{\mu})}$  gilt  $0 < \alpha(\bar{\mu}) \cdot c(\mu) := \alpha_{LB}(\mu)$  Folgende Argumentation ähnlich zu 2.6 ii) Für alle  $u \in X$  gilt

$$a(u,u;\mu) = \sum_{q} \Theta_{a}^{q}(\mu) a^{q}(u,u) = \sum_{q} \frac{\Theta_{a}^{q}(\mu)}{\Theta_{a}^{q}(\bar{\mu})} \cdot \Theta_{a}^{q}(\bar{\mu}) a^{q}(u,u)$$

$$\geq \sum_{q} \underbrace{\left(\min_{q'} \frac{\Theta_{a}^{q'}(\mu)}{\Theta_{a}^{q'}(\bar{\mu})}\right)}_{c(\mu)} \cdot \Theta_{a}^{q}(\bar{\mu}) a^{q}(u,u)$$

$$= c(\mu) \cdot \sum_{q} \Theta_{a}^{q}(\bar{\mu}) a^{q}(u,u) = c(\mu) a(u,u;\bar{\mu})$$

$$= a(u,u;\bar{\mu})$$

$$glm. koerziv bzgl \mu$$

$$\geq c(\mu) \cdot \alpha(\bar{\mu}) \cdot ||u||^{2}$$

$$= \alpha_{LB}(\mu) \cdot ||u||^{2}$$

Also insbesondere

$$\alpha(\mu) = \inf_{u} \frac{a(u, u; \mu)}{||u||^2} \ge \alpha_{LB}(\mu)$$

Bemerkung.

- "Min- $\Theta$ " kann für Thermischen Block angewandt werden
- obiges gilt auch für nichtsymm.  $a(\cdot, \cdot)$
- $\alpha(\bar{\mu})$  kann mittels eines hochdimensionalen Eigenwertproblems bestimmt werden:

Satz 3.28 (Berechnung von  $\alpha(\mu)$  für  $(P(\mu))$ ) Seien  $A(\mu)$ ,  $K \in \mathbb{R}^{H \times H}$  wie in 3.19/3.20. Setze  $A_s(\mu) := \frac{1}{2}(A(\mu) + A(\mu)^T)$ . Dann gilt

$$\alpha(\mu) = \lambda_{\min}(K^{-1}A_s(\mu))$$

wobei  $\lambda_{\min}$  den kleinsten Eigenwert bezeichnet.

Beweis. Sie  $K = LL^T$  (z. B. Cholesky oder Matrix-Wurzel) und verwende  $\underline{\mathbf{v}} = L^T\underline{\mathbf{u}}$ :

$$\begin{split} \alpha(\mu) &= \inf_{u \in X} \frac{a(u,u;\mu)}{||u||^2} = \inf_{\underline{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^H} \frac{\underline{\mathbf{u}}^T A(\mu) \underline{\mathbf{u}}}{\underline{\mathbf{u}}^T K \underline{\mathbf{u}}} \\ &= \inf_{\underline{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^H} \frac{\underline{\mathbf{u}}^T A_s(\mu) \underline{\mathbf{u}}}{\underline{\mathbf{u}}^T K \underline{\mathbf{u}}} \\ &= \inf_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^H} \frac{\underline{\mathbf{v}}^T L^{-1} A_s}{\underline{\mathbf{v}}^T L^{-1} L L^T L^{-T} \underline{\mathbf{v}}} = \inf_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^H} \frac{\underline{\mathbf{v}}^T L^{-1} A_s L^{-T} \underline{\mathbf{v}}}{\underline{\mathbf{v}}^T \underline{\mathbf{v}}} \end{split}$$

Also ist  $\alpha(\mu)$  Minimum eines Rayleigh-Quotionenten, also kleinster Eigenwert der symmetrischen & positiv definiten Matrix  $\bar{A}_s := L^{-1}A_sL^{-T}$ Die Matrizen  $\bar{A}_s$  und  $K^{-1}A_s$  sind ähnlich, da

$$L^{T}(K^{-1}A_{s})L^{-T} = L^{T}L^{-T}L^{-1}A_{s}L^{-T} = L^{-1}A_{s}L^{-T} = \bar{A}_{s}$$

Also haben sie identische Eigenwerte.

### Bemerkung.

• Inversion von K muss verhindert werden. Daher verwende EW-Löser, welcher nur Matrix-Vektor-Multiplikation verwendet. Sobald ein Produkt  $y = K^{-1}A_sx$  erforderlich ist, löst man das System  $Ky = A_sx$ . Alternativ kann auch kleinster EW eines verallgemeinerten EWP  $A_s\underline{\mathbf{u}} = \lambda K\underline{\mathbf{u}}$  berechnet werden.

- Für variationelle Form des verallg. EWP für  $\infty$ -dim  $(P(\mu))$  siehe Patera & Rozza
- Für Probleme, bei denen die Voraussetzungen von Min- $\Theta$  nicht erfüllt sind, kann "Successive Constraint Method" (SCM) eine Alternative darstellen.  $\rightsquigarrow$  §4

**Satz 3.29** ("Max- $\Theta$ "-Verfahren für  $\gamma_{UB}(\mu)$ , symmetrisches  $a(\cdot,\cdot)$ )

Sei a symmetrisch, koerziv, separierbar parametrisch mit  $a^q$  positiv semidefinit und  $\Theta_a^q > 0 \ \forall q, u$ 

(Offline:) Sei  $\bar{\mu} \in \mathcal{P}$  und  $\gamma(\bar{\mu})$  berechnet

(Online:) Setze für  $\mu \in \mathcal{P} : \gamma_{UB}(\mu) := \gamma(\bar{\mu}) \max_{q} \frac{\Theta_q^q(\mu)}{\Theta_q^q(\bar{\mu})}$ . Dann gilt

$$\gamma(\mu) \le \gamma_{UB}(\mu) < \infty$$

Beweis. Übung.  $\Box$ 

Bemerkung (Komplexitäten). Durch die angegebenen Berechnungsverfahren ist vollständige Offline-/Online-Zerlegung der RB-Lösung, Fehlerschranken und Effektivitätsschranken erreicht (Offline unabh. von  $\mu$ , Online unabh. von H). Komplexitäten für  $\Delta_N(\mu), \Delta_{N,s}(\mu)$ :

- Offline:  $\mathcal{O}(H^3 + H^2(Q_f + Q_l + NQ_a) + HQ_l^2 + H(Q_f + NQ_a)^2)$  für EWP für  $\alpha(\bar{\mu})$ , Riesz-Repräsentanten für  $f^q$ ,  $l^q$ ,  $a^q(\varphi_n, \cdot)$  und Matrix  $G_l$  und  $G_r$
- Online:  $\mathcal{O}((Q_f + NQ_a)^2 + Q_l^2 + Q_a)$  für Berechnung von  $||v_r(\cdot; \mu)||$ ,  $||l(\cdot; \mu)||_{X'}$  und  $\alpha_{LB}(\mu)$  durch Min- $\Theta$ . Problematisch ist quadratische Abhängigkeit von  $Q_f$ ,  $Q_l$ ,  $NQ_a$ , welches diese Größen in der Praxis stark einschränkt.

demos\_chapter3(4) Beispiel-Lauf von Reduktionsschritten in RBmatlab.

- Vorteilhafte Eigenschaften einer Basis  $\Phi_N$ : orthogonal für numerische Stabilität, Hierarchie, so dass Basisvektoren nach Relevanz geordnet sind, d.h.  $(X_{N'})_{N'=1}^N$ ,  $X_{N'} = \operatorname{span}\{\varphi_1, \ldots, \varphi_{N'}\}$  soll Sequenz von "optimalen" Räumen sein, damit durch Variation von N' eine Fehlerkontrolle erlaubt.
- Probleme (3.7), (3.8) stellen schwierige nichtlineare Optimierungsprobleme dar. Um zu praktischer Basisgenerierung zu kommen, werden verschiedene Vereinfachungen gemacht:
  - "Snapshotbasierte" Räume: Statt  $Y \subset X$  beliebig, wird  $Y = \text{span}\{u(\mu^i)\}_{i=1}^N$  mit unbekanntem  $\{\mu^i\}_{i=1}^N$  gesucht.
  - "Diskretisierung des Parameterraumes". Statt  $\mu \in \mathcal{P}$  wird Maximum bzw. Mittelung nur über  $\mu \in \mathcal{S}_{train}$  durchgeführt, wobei  $\mathcal{S}_{train} = \{\mu^i\}_{i=1}^n \subset \mathcal{P}$  endliche Menge von Trainingsparametern  $\mu$  (z. B. Punkte eines äquidistanten Gitters oder zufällig gewählte Parameter oder mittels adaptiven Verfahren gewählt.
  - Statt eines Fehlermaßes, welches echte Lösung  $u(\mu)$  erfordert, wird häufig ein Fehlerschätzer gewählt, welcher sehr viel schneller auswertbar ist.
  - Das resultierende vereinfachte Optimierungsproblem kann approximativ minimiert werden, indem statt simultan über  $\{\mu^i\}_{i=1}^N$  zu optimieren, einzelne Basisvektoren der Reihe nach durch Optimierung bestimmt werden ("Greedy-Verfahren")

#### **Definition 3.30** (Kolmogorov *n*-Weite)

Sei  $\mathcal{M} \subseteq X$  kompakte Teilmenge. Zu einem abgeschlossenen Unterraum  $Y \subseteq X$  nennen wir

$$d(Y,\mathcal{M}) := \sup_{v \in \mathcal{M}} \inf_{w \in Y} ||v - w|| = \sup_{v \in \mathcal{M}} ||v - P_Y v||$$

den Abstand von Y zu  $\mathcal{M}$ . Für  $n \in N$  nennen wir

$$d_n(\mathcal{M}) := \inf_{Y \subset X, \dim(Y) = n} d(Y, \mathcal{M})$$

die Kolmogorov n-Weite der Menge  $\mathcal{M}$ . Als Abschwächung definieren wir

$$\bar{d}_n(\mathcal{M}) := \inf_{Y \subset \operatorname{span}(\mathcal{M}), \dim(Y) = n} d(Y, \mathcal{M}).$$

## Bemerkung.

- $d_n$ ,  $\bar{d}_n$  fallen monoton.
- $d_n$ ,  $d_n$  sind rein approximationstheoretische Maße, deren Abfall die Approximierbarkeit von  $\mathcal{M}$  mit linearen Unterräumen charakterisiert, unabhängig von der RB-Approximation
- Wenn wir für ein  $(\mathcal{P}(\mu))$  Konvergenz oder sogar Konvergenzrate von  $d_n(\mathcal{M})$  zeigen können, so erhalten wir ebenso Konvergenz mit mind derselben Rate via Céa 3.9 für die RB-Approximation

$$||u(\mu) - u_N(\mu)|| \le \frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)} \underbrace{\inf_{v \in X_N} ||u(\mu) - v||}_{d(X_N, \mathcal{M})} \le \frac{\bar{\gamma}}{\bar{\alpha}} d_n(\mathcal{M})$$

• Beziehung  $d_n$  zu  $\bar{d}_n$ . Es gilt trivialerweise

$$d_0(\mathcal{M}) = \bar{d}_0(\mathcal{M}) = d(0,\mathcal{M}) = \sup_{v \in \mathcal{M}} ||v||,$$

$$d_n(\mathcal{M}) \le \bar{d}_n(\mathcal{M}) \qquad \forall n \in \mathbb{N},$$

falls  $n_0 := \dim(\operatorname{span}(\mathcal{M})) < \infty$ ,  $d_n(\mathcal{M}) = \bar{d}_n(\mathcal{M}) = 0 \ \forall n \geq n_0$ 

- Präzise Werte für  $d_n$  sind selten bekannt. Für endliche Menge oder Einheitskugeln können aber exakte Werte der Schranken für  $d_n$  angegeben werden.
- Beispiel:  $\mathcal{M} := \{v \in X | ||v|| \le 1\}$  erfüllt  $d_n(\mathcal{M}) = \bar{d}_n(\mathcal{M}) = 1$  für alle  $n < \dim(X)$  und  $d_n(\mathcal{M}) = \bar{d}_n(\mathcal{M}) = 0$  für  $n \ge \dim(X)$ .
- Beispiel:  $\mathcal{M} := [1,1]^m \subset X := R^m$  erfüllt  $d_n(\mathcal{M}) = \bar{d}_n(\mathcal{M}) = \sqrt{mn}$  für alle  $n \leq m$  und  $d_n(\mathcal{M}) = \bar{d}_n(\mathcal{M}) = 0$  für  $n \geq m$ .
- Beispiel: "Müsli-Schachtel":  $\mathcal{M} := \prod_{i \in \mathbb{N}} [-2^i, 2^i] \subseteq l_2 \Rightarrow d_n(\mathcal{M}) \leq C \cdot 2^{-n}$ , exponentielle Konvergenz

### **Definition 3.31** (Gram-Matrix)

Zu  $\{u_i\}_{i=1}^n \subset X$  definieren wir die Gram-Matrix als  $K := (\langle u_i, u_j \rangle_X)_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 

**Lemma 3.32** (Eigenschaften von K)

Für K Gram-Matrix von  $\{u_i\}_{i=1}^n$  gilt

- i) K ist symmetrisch und positiv semidefinit.
- ii) Rang $(K) = \dim(\operatorname{span}\{u_i\}_{i=1}^n)$
- iii)  $\{u_i\}_{i=1}^n$ linear unabhängig $\Leftrightarrow K$ positiv definit

Beweis. Übung

**Bemerkung** (Geometrische Information in K). K enthält sehr viel Information der  $\{u_i\}_{i=1}^n$ , insbesondere kann man mittels K eine isometrische Einbettung in  $\mathbb{R}^n$  erzeugt werden, d. h. es existiert  $\{x_i\}_{i=1}^n \in \mathbb{R}^n$  mit

$$\langle x_i, x_j \rangle_{\mathbb{R}^n} = \langle u_i, u_j \rangle_X$$

und

$$||x_i - x_j||_{\mathbb{R}^n} = ||u_i - u_j||_X$$

Sie  $K = UDU^T$  Eigenwertzerlegung mit  $D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ . Setze  $(x_1, \dots, x_n) := D^{\frac{1}{2}}U^T$ . Dann:

$$\langle x_i, x_j \rangle_{\mathbb{R}^n} = [(D^{\frac{1}{2}}U^T)_{i,j}]^T [(D^{\frac{1}{2}}U^T)_{i,j}]$$

$$= (UD^{\frac{1}{2}})_{i,j} (D^{\frac{1}{2}}U^T)_{i,j}$$

$$= (U)_{i,j} D^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}(U^T)_{i,j} = (UDU^T)_{ij} = (K)_{ij} = \langle u_i, u_j \rangle_X$$

und

$$||x_i - x_j||_{\mathbb{R}^n}^2 = \langle x_i, x_i \rangle_{\mathbb{R}^n} - 2\langle x_i, x_j \rangle_{\mathbb{R}^n} + \langle x_j, x_j \rangle_{\mathbb{R}^n}$$
$$= \langle u_i, u_i \rangle_X - 2\langle u_i, u_j \rangle_X + \langle u_j, u_j \rangle_X = ||u_i - u_j||_X$$

Damit können viele lineare Operationen auf  $\{u_i\}_{i=1}^n$  durch geeignete Operation mit K ausgedrückt werden. Z. B. Normberechnung in  $\text{span}\{u_i\}_{i=1}^n$ : (siehe auch Offline/Online für Normen)

$$v = \sum_{i=1}^{n} v_i u_i$$
,  $\underline{\mathbf{v}} = (v_i)_{i=1}^n \in \mathbb{R}^n$   $\Rightarrow$   $||v||_X^2 = \underline{\mathbf{v}}^T K \cdot \underline{\mathbf{v}}$ 

## 3.4 Basisgenerierung

## Approximation durch lineare Unterräume

Motivation für Snapshot-basierte Verfahren:

• Bestimmung eines möglichst guten  $X_N$ , welches  $\mathcal{M}$  global approximiert.

• Formulierung durch Optimierungsproblem, z.B. minimiere maximalen Fehler in Energienorm

$$\min_{\substack{Y \subset X \\ \dim Y = N}} \max_{\mu \in \mathcal{P}} \|u(\mu) - u_N(\mu)\|_{\mu} \tag{3.7}$$

oder Minimum des mittleren quadratischen Projektionsfehlers

$$\min_{\substack{Y \subset X \\ \dim Y = N}} \int_{\mathcal{P}} \|u(\mu) - P_Y u(\mu)\|^2 d\mu \tag{3.8}$$

oder beliebiges anderes Distanzmaß.

Wir haben bereits gesehen, dass in bestimmten Fällen fehlerfreie Approximation durch geeignete RB-Räume möglich ist

**Satz 3.33** (Optimales  $X_N$  für Thermischer Block,  $B_1 = 1$ ) Sie  $p \in \mathbb{N}$ ,  $B_1 = 1$ ,  $B_2 = p$ ,  $\mu^i := (\mu_{min}, \dots, \mu_{min})^T + e_i \cdot (\mu_{max} - \mu_{min})$ ,  $i = 1, \dots, p$ . Dann ist  $X_N := \operatorname{span}(u(\mu^i))_{i=1}^p$  optimal in dem Sinne, dass

$$\inf_{v \in X_N} ||u(\mu) - v|| = \inf_{v \in X_N} ||u(\mu) - v||_{\mu} = 0 \qquad \forall \mu \in \mathcal{P}$$

Beweis. Übung.

**Satz 3.34** (Optimales  $X_N$  für  $Q_a = 1$ )

Sei  $Q_a=1$  und o.B.d.A.  $a(u,v;\mu)=\Theta^1_a(\mu)a^1(u,v)$  und  $\Theta^1_a(\mu)>0$ . Seien  $\{\mu^i\}_{i=1}^{Q_f}$  derart, dass  $\{f(\cdot;\mu^i)\}_{i=1}^{Q_f}$  linear unabhängig. Dann erfüllt der Lagrange RB-Raum  $X_N=$  span  $(u(\mu^i))_{i=1}^{Q_f}$ , dim  $X_N=Q_f$  und

$$\inf_{v \in X_N} \|u(\mu) - v\| = \inf_{v \in X_N} \|u(\mu) - v\|_{\mu} = 0 \quad \forall \mu \in \mathcal{P}$$

Beweis.

i) ✓

ii ) span 
$$\{f^q\}_{q=1}^{Q_f} = \text{span}\, \{f(\,\cdot\,;\mu^i)\}_{i=1}^q$$
  
" $\supseteq$ " ist klar weil  $f(\,\cdot\,;\mu^i) = \sum_{q=1}^{Q_f} \Theta_f^q f^q(\,\cdot\,)$   
" $=$ " aus Dimensionsbetrachtung

$$\dim \left(\operatorname{span}\left\{f(\,\cdot\,;\mu^i)\right\}_{i=1}^{Q_f}\right) = Q_f$$
$$\dim \left(\operatorname{span}\left\{f^q\right\}_{q=1}^{Q_f}\right) \leq Q_f$$

 $\Rightarrow$  folgt dim (span  $\{f^q\}_{q=1}^{Q_f}$ ) =  $Q_f$  Gleichheit beider Räume

iii) Zeige nun exakte Approximation in  $X_N$ . Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  existiert wegen ii)  $c(\mu) = (c_i(\mu))_{i=1}^{Q_f}$  mit

$$f(\cdot;\mu) = \sum_{i=1}^{Q_f} c_i(\mu) f(\cdot;\mu^i)$$
 (\*)

Damit ist dann  $u(\mu) := \sum c_i(\mu) \frac{\Theta_a^q(\mu^i)}{\Theta_a^q(\mu)} u(\mu^i)$  Lösung von  $(P(\mu))$ :

$$a(u(\mu), v; \mu) = \Theta_a^1(\mu) a^1(\sum_{i} c_i(\mu) \frac{\Theta_a^1(\mu^i)}{\Theta_a^1(\mu)} u(\mu^i), v)$$

$$= \sum_{i} c_i(\mu) \underbrace{\Theta_a^1(\mu^i) a^1(u(\mu^i), v)}_{=a(u(\mu^i), v; \mu^i)}$$

$$= \sum_{i} c_i(\mu) f(v; \mu^i) \stackrel{(*)}{=} f(v; \mu)$$

Für die folgende Aussage referenzieren wir Fink & Rheinboldt: On the Error Behavior of the Reduced Basis Technique for Nonlinear Finite Element Approximations, ZAMM, 63:21-28, 1983.

Satz 3.35 (Lokale exponentielle Konvergenz)

Sei  $\mu^0 \in U \subset \mathcal{P} \subset \mathbb{R}$  und  $u(\mu)$  analytisch in Umgebung U. Sei  $X_{k,\mu^0}$  der Taylor-RB-Raum für  $k \in \mathbb{N}$ . Dann existiert ein  $B_{\delta}(\mu^0) \subset U$  und C > 0, so dass

$$\inf_{v \in X_{k,\mu^0}} \|u(\mu) - v\| \le C|\mu - \mu^0|^{k+1} \quad \forall \mu \in B_{\delta}(\mu^0)$$

Beweis. Taylor-Entwicklung

$$\begin{split} u(\mu) &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^{i}}{\partial \mu^{i}} u(\mu^{0}) \frac{1}{i!} (\mu - \mu^{0})^{i} \\ &= \underbrace{\sum_{i=0}^{k} \frac{\partial^{i}}{\partial \mu^{i}} u(\mu^{0}) \frac{1}{i!} (\mu - \mu^{0})^{i}}_{v_{k}(\mu)} + \underbrace{\sum_{i=k+1}^{\infty} \frac{\partial^{i}}{\partial \mu^{i}} u(\mu^{0}) \frac{1}{i!} (\mu - \mu^{0})^{i-(k+1)} (\mu - \mu^{0})^{k+1}}_{w_{k}(\mu)} \end{split}$$

Sei  $\delta < 1$  so dass  $B_{\delta}(\mu^0) \subset U$  und  $C' := \sup_i \|\frac{\partial^i}{\partial \mu^i} u(\mu^0) \frac{1}{i!} \| < \infty$ . Dann gilt für  $\mu \in B_{\delta}(\mu)$ 

$$\begin{split} \|w_k(\mu)\| & \leq \sum_{i=k+1}^{\infty} \|\frac{\partial^i}{\partial \mu^i} u(\mu^0) \frac{1}{i!} \| \cdot |\mu - \mu^0|^{i-k+1} \leq C' \sum_{i=k+1}^{\infty} |\mu - \mu^0|^{i-(k+1)} \\ & \leq C' \frac{1}{1 - |\mu - \mu^0|} \leq C' \frac{1}{1 - \delta} =: C \\ & \inf_{v \in X_{k,\mu^0}} \|u(\mu) - v\| \leq \|u(\mu) - v_k(\mu)\| = \|w_k(\mu) \cdot (\mu - \mu^0)^{k+1}\| \leq C |\mu - \mu^0|^{k+1} \end{split}$$

Die folgende Aussage basiert auf Maday & Patera & Turinici: Global a priori convergence theory for reduced-basis approximations of single-parameter symmetric coercive elliptic partial differential equations. C.R. Acad. Sci., Paris, Ser. 1, 335, 289-294, 2002.

**Satz 3.36** (Globale exponentielle Konvergenz, p = 1)

Sei  $\mathcal{P} = [\mu_{min}, \mu_{max}] \subset \mathbb{R}^+$  mit  $\mu_{max} > 1$  genügend groß und  $\mu_{min} = \frac{1}{\mu_{max}}$ 

$$a(u,v;\mu) = \mu a^{1}(u,v) + a^{2}(u,v)$$

mit  $a^1$ ,  $a^2$  symmetrisch positiv semidefinit und  $f \in X'$  sei nicht parametrisch. Zu  $N \in \mathbb{N}$ ,  $N \ge 2$  seien

$$\mu_{min} = \mu^1 < \dots < \mu^N = \mu_{max}$$

logarithmisch äquidistant, d.h.

$$\ln(\mu^{i+1}) - \ln(\mu^{i}) = \frac{\ln(\mu_{max}) - \ln(\mu_{min})}{N - 1} = \delta_{N}$$

und  $X_N = \text{span}\left\{u(\mu^i)\right\}_{i=1}^N$  zugehöriger Lagrange RB-Raum. Dann existiert  $N_0$  so dass für alle  $N \geq N_0$  gilt

$$\frac{\|u(\mu) - u_N(\mu)\|_{\mu}}{\|u(\mu)\|_{\mu}} \le \mu_{max}^2 e^{\frac{-N-1}{N_0 - 1}} \quad \forall \mu \in \mathcal{P}$$
(3.9)

## Bemerkung.

- Voraussetzungen sind z.B. für einen thermischen Block mit  $B_1 = 2$ ,  $B_2 = 1$  erfüllt, wenn  $\mu_2 = 1$  konstant gehalten wird und nur  $\mu_1 = \mu$  variiert.
- Verallgemeinerung für p > 1 existiert.
- Satz 3.36 liefert sogar die exponentielle Konvergenz des Approximationsfehlers und damit der Weiten  $d_N$ ,  $\bar{d}_N$ .

Korollar 3.37 (Exponentielle Konvergenz von  $d_N$ ,  $\bar{d}_N$ )

Unter den Voraussetzungen von 3.36 gilt insbesondere mit C > 0 unabhängig von N

$$\inf_{v \in X_N} \|u(\mu) - v\| \le C \cdot e^{\frac{-N-1}{N_0 - 1}} \quad \forall \mu \in \mathcal{P}, N \ge N_0$$

also für Kulmogorov N-Weite

$$d_N(\mathcal{M}) \le C \cdot e^{\frac{-N-1}{N_0-1}} \quad \forall N \ge N_0$$

und wegen  $X_N \subset \operatorname{span}(\mathcal{M})$ 

$$\bar{d}_N(\mathcal{M}) \le C \cdot e^{\frac{-N-1}{N_0-1}}$$

Beweis. Wegen Normäquivalenz und Beschränktheit von u gilt

$$||u(\mu)||_{\mu} \leq \sqrt{\gamma(\mu)}||u(\mu)|| \leq \frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)}||f(\mu)|| \leq C', \quad \text{mit} \quad C' := \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \frac{\sqrt{\gamma(\mu)}}{\alpha(\mu)}||f(\mu)||$$

Also folgt

$$\inf_{v \in X_N} \|u(\mu) - v\| \le \|u(\mu) - u_N(\mu)\| \le \frac{1}{\sqrt{\alpha(\mu)}} \|u(\mu) - u_N(\mu)\|_{\mu} \cdot \frac{\|u(\mu)\|_{\mu}}{\|u(\mu)\|_{\mu}}$$

$$\stackrel{3.36}{\le} \frac{\|u(\mu)\|_{\mu}}{\sqrt{\alpha(\mu)}} \cdot e^{\frac{-N-1}{N_0-1}} \le \underbrace{\frac{C'}{\bar{\alpha}}}_{=:C} \cdot e^{\frac{-N-1}{N_0-1}}$$

Ziel ist Beweis von 3.36, hierzu benötigen wir jedoch einige Notationen und Hilfsaussagen.

- Es sei dim X=H endlich aber beliebig groß. Man kann zeigen, dass die Konstante  $N_0$  und Forderung an  $\mu_{max}$  unabhängig von H ist.
- Logarithmische Abbildung des Parametergebiets. Es sei

$$\tau(z) = \ln(z)$$

und damit  $\hat{\mu} := \tau(\mu)$ ,  $\hat{\mu}_{min} = \tau(\mu_{min})$ ,  $\hat{\mu}_{max} = \tau(\mu_{max}) = -\hat{\mu}_{min}$ ,  $\hat{\mathcal{P}} := \tau(\mathcal{P})$ ,  $\hat{u}(\hat{\mu}) := u(\tau^{-1}(\hat{\mu}))$ , also  $\hat{u}(\hat{\mu})$  Lösung von

$$e^{\hat{\mu}}a^{1}(\hat{u}(\hat{\mu}), v) + a^{2}(\hat{u}(\hat{\mu}), v) = f(v) \quad \forall v \in X$$
 (3.10)

und dann  $u(\mu) = \hat{u}(\tau(\mu))$ .

- Es sei  $\langle u, v \rangle_X := a(u, v; \mu = 1) = a^1(u, v) + a^2(u, v)$ , dann ist (3.10) äquivalent zu  $\langle \hat{u}(\hat{\mu}), v \rangle_X + (e^{\hat{\mu}} 1)a^1(\hat{u}(\hat{\mu}), v) = f(v) \quad \forall v \in X$  (3.11)
- Seien  $(\Upsilon_i, \lambda_i)_{i=1}^H \in (X, \mathbb{R}^+)$  Eigenfunktionen/-werte von verallgemeinertem EWP

$$a^{1}(\Upsilon_{i}, v) = \lambda_{i} \langle \Upsilon_{i}, v \rangle_{X} \quad \forall v \in X$$
(3.12)

mit  $0 \le \lambda_1 \le \cdots \le \lambda_H$ ,  $\|\Upsilon_i\| = 1$  ist dann  $\{\Upsilon_i\}_{i=1}^H$  ONB von X. Aus (3.12) mit  $v = \Upsilon_i$  und positiver Semidefinitheit von  $a^2$  folgt

$$1 = \langle \Upsilon_i, \Upsilon_i \rangle_X = a^1(\Upsilon_i, \Upsilon_i) + a^2(\Upsilon_i, \Upsilon_i) = \lambda_i + a^2(\Upsilon_i, \Upsilon_i)$$
  

$$\Rightarrow \lambda_i \in [0, 1] =: \Lambda \text{ weil } \lambda_i = 1 - a^2(\Upsilon_i, \Upsilon_i) \le 1$$

• Aus Orthogonalität und (3.12) folgt

$$a(\Upsilon_j, \Upsilon_i; \mu) = \underbrace{\langle \Upsilon_j, \Upsilon_i \rangle}_{\delta_{ij}} + (e^{\hat{\mu}} - 1) \underbrace{a^1(\Upsilon_j, \Upsilon_i)}_{\lambda_i \delta_{ij}} = (1 - \lambda_j + \lambda_j e^{\hat{\mu}}) \delta_{ij}$$
(3.13)

Lemma 3.38 (Lösungsdarstellung)

Die Lösung von (3.10), (3.11) ist explizit gegeben durch

$$\hat{u}(\hat{\mu}) = \sum_{j=1}^{H} f_j \Upsilon_j g(\hat{\mu}, \lambda_j)$$
(3.14)

mit  $f_j = f(\Upsilon_j)$  und  $g: \hat{\mathcal{P}} \times \Lambda \to \mathbb{R}^+$  definiert durch

$$g(z,\sigma) = \frac{1}{1 - \sigma + \sigma e^z} \tag{3.15}$$

Beweis. Einsetzen von (3.14) in (3.11) liefert für Testfunktionen  $v := \Upsilon_i$ 

$$\begin{split} &\langle \sum_{j} f_{j} \Upsilon_{j} g(\hat{\mu}, \lambda_{j}), \Upsilon_{i} \rangle_{X} + (e^{\hat{\mu}} - 1) a^{1} \left( \sum_{j} f_{j} \Upsilon_{j} g(\hat{\mu}, \lambda_{j}), \Upsilon_{i} \right) \\ &= \sum_{j} f_{j} g(\hat{\mu}, \lambda_{j}) \left( \langle \Upsilon_{j}, \Upsilon_{i} \rangle_{X} + (e^{\hat{\mu}} - 1) a^{1} (\Upsilon_{j}, \Upsilon_{i}) \right) \\ &\stackrel{(3.13)}{=} \sum_{j} f_{j} g(\hat{\mu}, \lambda_{j}) (1 - \lambda_{j} + \lambda_{j} e^{\hat{\mu}}) \delta_{ij} \\ &= f_{i} g(\hat{\mu}, \lambda_{i}) \underbrace{(1 - \lambda_{i} + \lambda_{i} e^{\hat{\mu}})}_{=\frac{1}{g(\hat{\mu}, \lambda_{i})}} = f_{i} = f(\Upsilon_{i}) \end{split}$$

also ist  $\hat{u}(\hat{\mu})$  Lösung von (3.10) / (3.11).

**Bemerkung.** Im obigen Beweis wird also ausgenutzt, dass die Systemmatrix bezüglich  $\{\Upsilon_i\}_{i=1}^H$  diagonal ist.

**Lemma 3.39** (Energienorm-Darstellung in ONB) Mit  $\mu = \tau^{-1}(\hat{\mu})$  gilt für eine Funktion  $w = \sum_{i=1}^{H} w_i \Upsilon_i$ 

$$||w||_{\mu}^{2} = \sum_{i=1}^{H} \frac{w_{i}^{2}}{g(\hat{\mu}, \lambda_{i})}$$

Beweis.

$$||w||_{\mu} = a(w, w; \mu) = \sum_{i,j} w_i w_j \underbrace{a(\Upsilon_i, \Upsilon_j; \mu)}_{\stackrel{(3.13)}{=} (1 - \lambda_j + \lambda_j e^{\hat{\mu}}) \delta_{ij}} = \sum_i \frac{w_i^2}{g(\hat{\mu}, \lambda_i)}$$

Wir benötigen (grobe) Schranken für g und seinen Ableitungen bezüglich z.

**Lemma 3.40** (Schranken für g,  $\frac{\partial^i}{\partial z^i}g$ ) Für alle  $z \in \hat{\mathcal{P}}$ ,  $\sigma \in \Lambda = [0,1]$  gilt i) 
$$g(z,\sigma) \in \left[\frac{1}{\mu_{max}}, \mu_{max}\right]$$

ii ) 
$$\frac{1}{g(z,\sigma)} \in \left[\frac{1}{\mu_{max}}, \mu_{max}\right]$$

iii) 
$$\left|\frac{\partial^i}{\partial z^i}g(z,\sigma)\right| \leq \bar{C}\cdot C\cdot j! \quad \text{mit} \quad \bar{C}=\mu_{max}, C=2\mu_{max}^2$$

Beweis. i) & ii)

$$\frac{1}{g(z,\sigma)} = 1 + \sigma(e^z - 1) \overset{j=1}{\leq} e^{\hat{\mu}_{max}} = \mu_{max} \quad \Rightarrow \quad g(z,\sigma) \geq \frac{1}{\mu_{max}}$$

Für festes z minimiere  $\frac{1}{g(z,\sigma)=1+\sigma(e^z-1)}$  bezüglich  $\sigma$ 

$$\min_{\sigma \in [0,1]} \frac{1}{g(z,\sigma)} = \begin{cases} 1 & z = 0 & (\sigma \text{ beliebig}) \\ 1 & z > 0 & (\sigma = 0) \\ e^z & z < 0 & (\sigma = 1) \end{cases}$$

$$\frac{1}{g(z,\sigma)} \ge \min_{\sigma,z} \frac{1}{g(z,\sigma)} = e^{\hat{\mu}_{min}} = \mu_{min} = \frac{1}{\mu_{max}} \quad \Rightarrow \quad g(z,\sigma) \le \mu_{max}$$

iii) Wir zeigen per Induktion, dass  $\frac{\partial^i}{\partial z^i}g(z,\!\sigma)$  sich darstellen lässt als

$$\frac{\partial^i}{\partial z^i}g(z,\sigma) = \sum_{k=2}^{j+1} \beta_k^j \sigma^{(k-1)} e^{(k-1)z} g^k(z,\sigma), \quad j \ge 1$$
(3.16)

mit

$$\beta_{2}^{1} := -1 
\beta_{2}^{j+1} = \beta_{2}^{j} = -1 
\beta_{k}^{j+1} = \beta_{k}^{j}(k-1) - \beta_{k-1}^{j}(k-1), \quad k = 3, \dots, j+1 
\beta_{j+2}^{j+1} := -(j+1)\beta_{j+1}^{j}$$
(3.17)

Denn für j = 1 erhält man

$$\frac{\partial}{\partial z}g(z,\sigma) = \frac{-\sigma e^z}{(1-\sigma-\sigma e^z)^2} = -e^z\sigma g^2(z,\sigma)$$

also mit (3.16)  $\beta_2^1 = -1$ .

#### Induktionsschritt

$$\begin{split} \frac{\partial^{i}}{\partial z^{i}}g(z,\sigma) &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \sum_{k=2}^{j+1} \beta_{k}^{j} \sigma^{(k-1)} e^{(k-1)z} g^{k}(z,\sigma) \right) \\ &= \sum_{k=2}^{j+1} \beta_{k}^{j} \sigma^{(k-1)} \left( e^{(k-1)z} \frac{\partial}{\partial z} \underbrace{g^{k}(z,\sigma) + (k-1) e^{(k-1)z} g^{k}(z,\sigma)} \right) \\ &= kg^{k-1}(z,\sigma) \cdot \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} g(z,\sigma)}_{=-\sigma e^{z} g^{2}(z,\sigma)} \\ &= \sum_{k=2}^{j+1} \beta_{k}^{j} \sigma^{(k-1)} \left[ -\sigma e^{kz} k \cdot g^{k+1}(z,\sigma) + (k-1) e^{(k-1)z} g^{k}(z,\sigma) \right] \\ &= \sum_{k=2}^{j+1} \beta_{k}^{j} (k-1) \sigma^{(k-1)} e^{(k-1)z} g^{k}(z,\sigma) + \sum_{k=3}^{j+2} \beta_{k-1}^{j} \sigma^{(k-1)} \cdot \left( -\sigma e^{(k-1)z} (k-1) g^{k}(z,\sigma) \right) \\ &= \underbrace{\beta_{j}^{j} \sigma e^{z} g^{2}(z,\sigma)}_{k=2} + \sum_{k=3}^{j+1} \left( \beta_{k}^{j} (k-1) - \beta_{k-1}^{j} (k-1) \right) \sigma^{(k-1)} e^{(k-1)z} g^{k}(z,\sigma) \\ &= \underbrace{\beta_{j+1}^{j} \sigma e^{z} g^{2}(z,\sigma)}_{k=2} + \sum_{k=3}^{j+1} \left( \beta_{k}^{j} (k-1) - \beta_{k-1}^{j} (k-1) \right) \sigma^{(k-1)} e^{(k-1)z} g^{k}(z,\sigma) \\ &= \underbrace{\beta_{j+1}^{j} \sigma e^{z} g^{2}(z,\sigma)}_{k=2} + \sum_{k=3}^{j+1} \left( \beta_{k}^{j} (k-1) - \beta_{k-1}^{j} (k-1) \right) \sigma^{(k-1)} e^{(k-1)z} g^{k}(z,\sigma) \\ &= \underbrace{\beta_{j+1}^{j} \sigma e^{z} g^{2}(z,\sigma)}_{k=2} + \underbrace{\beta_{j+1}^{j+1} \left( \beta_{k}^{j} (k-1) - \beta_{k-1}^{j} (k-1) \right) \sigma^{(k-1)} e^{(k-1)z} g^{k}(z,\sigma)}_{k=2} \right)$$

Für  $j \ge 1$  setze  $S_j := \sum_{k=2}^{j+1} |\beta_k^j|$  und zeige per Induktion, dass

$$S_j \le 2^j \cdot j! \qquad j \ge 1$$

Für j = 1 ist  $S_j = 1 \le 2^1 \cdot 1! = 2$  also Induktionsanfang. Gelte Behauptung für  $j \ge 1$ . Dann gilt:

$$|\beta_2^{j+1}| = 1$$

$$|\beta_k^{j+1}| < (j+1)(|\beta_k^j| + |\beta_{k-1}^j|) \qquad k = 3, \dots, j+1$$

$$|\beta_{j+2}^{j+1}| = (j+1)|\beta_{j+1}^j|$$

$$\Rightarrow S_{j+1} = \sum_{k=2}^{j+2} |\beta_k^{j+1}| \le 2(j+1)S_j \stackrel{i.A.}{\le} 2(j+1)2^j \cdot j! = 2^{j+1}(j+1)!$$

Damit folgt (iii):

$$\begin{split} |\frac{\partial^{i}}{\partial z^{i}}g(z,\!\sigma)| &= |\sum_{k=2}^{j+1}\beta_{k}^{j}\sigma^{(k-1)}e^{(k-1)z}g^{k}(z,\!\sigma)| \\ &\leq (\sum_{k=2}^{j+1}|\beta_{k}^{j}|)\sup_{k}|\sigma^{(k-1)}e^{(k-1)z}g^{k}(z,\!\sigma)| \\ &\underbrace{\leq (\sum_{k=2}^{j+1}|\beta_{k}^{j}|)\sup_{k}|\sigma^{(k-1)}e^{(k-1)z}g^{k}(z,\!\sigma)|}_{\leq 1\cdot e^{j\frac{1}{\mu_{max}}\cdot\mu_{max}^{j+1}=\mu_{max}(\mu_{max}^{2})^{j}}} \\ &\leq (2\mu_{max}^{2})^{j}\cdot j!\cdot\mu_{max} \end{split}$$

**Bemerkung.**  $g(\hat{\mu}, \lambda_i)$  sind gemäß 3.38 Koeffizienten für  $\hat{u}(\hat{\mu})$  in ONB Entwicklung. Entsprechend sind  $\frac{\partial^j}{\partial z^j}g(z,\sigma)$  für  $z=\hat{\mu}, \, \sigma=\lambda_i$  die Koeffizienten der Sensitivitätsableitung  $\frac{\partial^j}{\partial \hat{\mu}^j}\hat{u}(\hat{\mu})$  in der ONB Entwicklung, also impliziert Lemma 3.40 eine Beschränktheit der Sensitivitätsableitungen.

**Lemma 3.41** (Darstellung von Fkt. aus  $X_N$ ) Für Koeffizientenfunktionen  $\tilde{C}_n : \hat{\mathcal{P}} \to \mathbb{R}, n = 1, \dots, N$ 

$$\hat{w}_N(\hat{\mu}) := \sum_{n=1}^N \tilde{C}_n(\hat{\mu}) \hat{u}(\hat{\mu}^n)$$

mit  $\hat{\mu}^n := \ln \mu^n$  ist also  $\hat{w}_N(\hat{\mu}) \in X_N$ . Dann lässt sich  $\hat{w}_N$  darstellen als

$$\hat{w}_N(\hat{\mu}) = \sum_{i=1}^H f_i \Upsilon_i \tilde{g}_N(\hat{\mu}, \lambda_i)$$

wobei 
$$\tilde{g}_N(\hat{\mu}, \sigma) := \sum_{n=1}^N \tilde{C}_n(\hat{\mu}) g(\hat{\mu}^n, \sigma)$$

Beweis. Aus Lösungsdarstellung 3.38 folgt

$$u(\mu^n) = \hat{u}(\hat{\mu}^n) = \sum_{i=1}^H f_i \Upsilon_i g(\hat{\mu}^n, \lambda_i) \qquad , n = 1, \dots, N$$

Also ist

$$\hat{w}_N(\hat{\mu}) = \sum_n \tilde{C}_n(\hat{\mu}) \sum_{i=1}^H f_i \Upsilon_i g(\hat{\mu}^n, \lambda_i) = \sum_{i=1}^H f_i \Upsilon_i \underbrace{\sum_{n=1}^N \tilde{C}_n(\hat{\mu}) g(\hat{\mu}^n, \sigma)}_{=\tilde{g}_N(\hat{\mu}, \sigma)}$$

Wir benötigen noch Lagrange-Interpolation in M aufeinanderfolgenden Punkten  $\{\hat{\mu}^i,\dots,\hat{\mu}^{i+M-1}\}$ : Sie  $h\in C^M(\hat{\mathcal{P}})$  zu interpolierende Funktion. Es bezeichne  $I_M^i:C^0(\hat{\mathcal{P}})\to P_{M-1}(\hat{\mathcal{P}})$  Polynominterpolation zu  $\{\mu^{i+\hat{m}-1}_{m=1}^M\}$  für  $M\geq 2$  und  $i\in\{1,\dots,N\}$  s. d.  $i+M\leq N+1$ . Sei  $L_M^{i,m}\in P_{M-1}(\hat{\mathcal{P}})$  Lagrange-Polynom zu den Stützstellen, d. h.

$$L_M^{i;m}(\hat{\mu}^{i+m'-1}) = \delta_{mm'} \quad \text{für } 1 \le m, m' \le M$$

Dann ist der Interpolant darstellbar als

$$(I_M^i h)(\hat{\mu}) = \sum_{m=1}^M L_M^{i;m}(\hat{\mu}) h(\hat{\mu}^{i+m-1})$$

Für den Interpolationsfehler gilt in  $\hat{\mu} \in [\hat{\mu}^i, \mu^{i+M-1}]$ 

$$|h(\hat{\mu} - (I_{M}^{i}h)(\hat{\mu})| \leq \underbrace{\prod_{\substack{m=1\\M!}}^{M} |\hat{\mu} - \hat{\mu}^{i+m-1}|}_{M!} \sup_{\hat{\mu}'} |h^{(M)}(\hat{\mu}')| \leq \frac{[(M-1)\delta_{N}]^{M}}{M!} \sup_{\hat{\mu}'} |h^{(M)}(\hat{\mu}')|$$

$$\leq \underbrace{(\hat{\mu}^{i+M-1} - \hat{\mu}^{i})^{M}}_{M!} = \underbrace{[(M-1)\delta_{N}]^{M}}_{M!}$$

$$(3.18)$$

(endlich:)

Beweis. Satz 3.36

Idee: zeige Existenz eines  $\hat{w}_N(\hat{\mu}) \in X_N$  s. d. (mit  $\mu := \tau^{-1}(\hat{\mu})$ )

$$\frac{||\hat{u}(\hat{\mu}) - \hat{w}_N(\hat{\mu})||_{\mu}}{||\hat{u}(\hat{\mu})||_{\mu}} \le \mu_{max}^2 \cdot e^{\frac{-(N-1)}{N_0 - 1}} \qquad \forall N \ge N_0$$
(3.19)

Denn dann folgt Behauptung via  $||\hat{u}(\hat{\mu})||_{\mu} = ||u(\mu)||_{\mu}$  und

$$||u(\mu) - u_N(\mu)||_{\mu} = \inf_{v \in X_N} ||u(\mu) - v||_{\mu} \le ||u(\mu) - \hat{w}_N(\hat{\mu})||_{\mu} = ||\hat{u}(\hat{\mu}) - \hat{w}_N(\hat{\mu})||_{\mu}$$

Für Konstruktion eines  $\hat{w}_N(\hat{\mu})$  reicht es, die Koeffizienten  $\tilde{C}_n(\hat{\mu})$  zu definieren (siehe 3.41): Sei  $\hat{\mu} \in \mathcal{P}$  gegeben und  $M \in \{2, \dots, N\}$  wähle i s. d.  $\hat{\mu} \in [\hat{\mu}^2, \hat{\mu}^{i+M-1}] =: J_M^i$ , also  $|J_M^i| = (M-1)d_N$ 

Definiere nun  $\tilde{C}_n$  durch Lagrange-Polynome zu  $\{\hat{\mu}^{i+m-1}\}_{m=1}^M$ :

$$\tilde{C}_n(\hat{\mu}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } n < i \text{ oder } n \ge i + M \\ L_M^{i;n-i+1}(\hat{\mu}) & \text{falls } i \le n \le i + M - 1 \end{cases}$$

Dann ist zugehöriges  $\tilde{g}_N(\hat{\mu}, \sigma)$  aus 3.41 Interpolierende im Sinne von

$$\tilde{g}_N(\hat{\mu}, \sigma) = (I_M^i g(\cdot, \sigma))(\hat{\mu})$$

denn

$$\tilde{g}_{N}(\hat{\mu},\sigma) \stackrel{3.41}{=} \sum_{n=1}^{N} \tilde{C}_{n}(\hat{\mu})g(\hat{\mu}^{n},\sigma) = \sum_{n=i}^{i+n-1} L_{M}^{i;n-i+1}(\hat{\mu})g(\hat{\mu}^{n},\sigma) = (I_{M}^{i}g(\cdot,\sigma))(\hat{\mu})$$

also insbesondere  $\tilde{g}_N(\hat{\mu}^n, \sigma) = g(\hat{\mu}^n, \sigma)$ .

Betrachtet man die linke Seite von (3.19) für  $\hat{w}_N(\hat{\mu})$ : Mit 3.41 & 3.38 & 3.39 folgt

$$\frac{\|\hat{u}(\hat{\mu}) - \hat{w}_{N}(\hat{\mu})\|_{\mu}^{2}}{\|\hat{u}(\hat{\mu})\|_{\mu}^{2}} \stackrel{3.39}{=} \frac{\sum_{i=1}^{H} \frac{f_{i}^{2}(g(\hat{\mu},\lambda_{i}) - \tilde{g}_{N}(\hat{\mu},\lambda_{i}))^{2}}{g(\hat{\mu},\lambda_{i})}}{\sum_{i=1}^{H} \frac{f_{i}^{2}g(\hat{\mu},\lambda_{i})^{2}}{g(\hat{\mu},\lambda_{i})}} \\
= \frac{\sum_{i=1}^{H} f_{i}^{2}g(\hat{\mu},\lambda_{i})^{2} \frac{(g(\hat{\mu},\lambda_{i}) - \tilde{g}_{N}(\hat{\mu},\lambda_{i}))^{2}}{g(\hat{\mu},\lambda_{i})^{2}} \frac{1}{g(\hat{\mu},\lambda_{i})}}{\sum_{i=1}^{H} \frac{f_{i}^{2}g(\hat{\mu},\lambda_{i})^{2}}{g(\hat{\mu},\lambda_{i})^{2}}} \\
\leq \sup_{z,\sigma} \frac{(g(z,\sigma - \tilde{g}_{N}(z,\sigma))^{2}}{g(z,\sigma)^{2}} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{H} f_{i}^{2} \frac{g(\hat{\mu},\lambda_{i})^{2}}{g(\hat{\mu},\lambda_{i})^{2}}}{\sum_{i=1}^{H} f_{i}^{2} \frac{g(\hat{\mu},\lambda_{i})^{2}}{g(\hat{\mu},\lambda_{i})}} \\
\leq \left(\sup_{z,\sigma} \frac{1}{g(z,\sigma)^{2}}\right) \left(\sup_{z,\sigma} (g(z,\sigma - \tilde{g}_{N}(z,\sigma))^{2}\right) \\
\leq \mu_{max}^{2} \left(\sup_{z,\sigma} |g(z,\sigma - \tilde{g}_{N}(z,\sigma)|\right)^{2} \tag{3.20}$$

Für Fehler rechts erhalte mittels Interpolationsfehlerabschätzung:

$$|g(z,\sigma - \tilde{g}_{N}(z,\sigma))| = |g(z,\sigma) - (I_{M}^{i}g(\cdot,\sigma))(z)|$$

$$\stackrel{(3.18)}{\leq} \frac{((M-1)\delta_{N})^{M}}{M!} \sup_{\hat{\mu}'} \underbrace{|\frac{\partial^{M}}{\partial \hat{\mu}^{M}}g(\hat{\mu}',\sigma)|}_{\leq \bar{C}C^{M}M! \text{ wegen } 3.40 \text{ ii})}$$

$$= \frac{((M-1)\delta_{N})^{M}}{M!} \cdot \bar{C}C^{M}M!$$

$$= (C(M-1)\delta_{N})^{M} \cdot \bar{C}$$

$$(3.21)$$

Bisher: M beliebig. Finde nun  $M_{opt} \in \{2, ..., N\}$ , welches den Fehler "klein" macht. Suche zunächst ein reelles  $\bar{M}_{opt} \in [2, N] \subset \mathbb{R}$ . Hierzu setze

$$\bar{M}_{opt} := 1 + \frac{1}{Ce\delta_N}$$

Wir sehen mit Abbkürzung  $\lambda := \ln \mu_{max} - \ln \mu_{min} = 2 \ln \mu_{max}$ 

$$\frac{1}{Ce\delta_N} \ge 1 \iff 1 \ge Ce \frac{\ln \mu_{max} - \ln \mu_{min}}{N-1} \iff N-1 \ge C \cdot e \cdot \lambda$$
$$\iff N > Ce\lambda + 1$$

Also ist mit Forderung  $N_0 \geq C \cdot e \cdot \lambda + 1$  ist  $\bar{M}_{opt} \geq 2$ . Weiter:

$$1 + \frac{1}{Ce\delta_N} \iff \frac{1}{Ce\delta_N} \iff 1 \le (N-1)(Ce\delta_N)$$

$$\iff 1 \le (N-1)C \cdot e\frac{\lambda}{N-1} \iff 1 \le Ce\lambda$$

$$\stackrel{3.40}{\iff} 1 \le 2\mu_{max}^2 \cdot e \cdot 2 \ln \mu_{max}$$

Also ist für  $\mu_{max}$  genügend groß  $\bar{M}_{opt} \leq N$ .

Insgesamt nun also  $\bar{M}_{opt} \in [2,N]$ .

Wegen  $C(\bar{M}_{opt} - 1)\delta_N = C\frac{1}{Ce\delta_N} \cdot \delta_N = \frac{1}{e}$  folgt

$$\left(C(\bar{M}_{opt} - 1)\delta_{N}\right)^{\bar{M}_{opt} - 1} = \left(\frac{1}{e}\right)^{\frac{1}{Ce\delta_{N}}} = e^{-\frac{1}{Ce\delta_{N}}} = e^{-\frac{N-1}{Ce\lambda}} \le e^{-\frac{N-1}{N_{0} - 1}}$$

falls  $Ce\lambda \leq N_0 - 1$ , d. h.  $N_0 \geq Ce\lambda + 1$  (identische Forderung an  $N_0$  wie zuvor). Setze nun  $M_{opt} := \lfloor \bar{M}_{opt} \rfloor$  größte ganze Zahl kleiner/gleich  $\bar{M}_{opt}$ 

$$\Rightarrow M_{opt} \in \{2, \dots, N\}$$

wg.
$$M_{opt} \le \bar{M}_{opt} \Rightarrow C(M_{opt} - 1)\delta_N \le C(\bar{M}_{opt} - 1)\delta_N \left( = \frac{1}{e} < 1 \right)$$
  
und $M_{opt} > \bar{M}_{opt} - 1$ 

folgt

$$(C(M_{opt} - 1)\delta_N)^{M_{opt}} \le (C(\bar{M}_{opt} - 1)\delta_N)^{\bar{M}_{opt}} \le e^{-\frac{N-1}{N_0 - 1}}$$
 (3.22)

Damit insgesamt

$$\frac{||\hat{u}(\hat{\mu}) - \hat{w}_{N}(\hat{\mu})||_{\mu}}{||\hat{u}(\hat{\mu})||_{\mu}} \overset{(3.20)}{\leq} \mu_{max} \sup_{z,\sigma} |g(z,\sigma - \tilde{g}_{N}(z,\sigma)|$$

$$\overset{(3.21)}{\leq} \mu_{max} \underbrace{\bar{C}}_{=\mu_{max}} \cdot \left(C(M_{opt} - 1)\delta_{N}\right)^{M_{opt}} \overset{(3.22)}{\leq} \mu_{max}^{2} e^{-\frac{N-1}{N_{0}-1}}$$

also (3.19) und damit Satz 3.36 gezeigt.

## **Definition 3.42** (Gram-Schmidt)

Seien  $\{u_i\}_{i=1}^n \in X$  lin. unabh. Dann ist Gram-Schmidt Basis  $\Phi_{GR} := \{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$  definiert durch

$$\bar{\varphi}_m := u_m - \sum_{i=1}^{m-1} \langle u_n, \varphi_i \rangle \varphi_i \quad , \quad \varphi_m := \frac{\bar{\varphi}_m}{||\bar{\varphi}_m||} \quad , \quad m = 1, \dots, n$$

und  $X_{GR}$  der zugehörige Gram-Schmidt RB-Raum

## **Lemma 3.43** (Eigenschaften von $\Phi_{GR}$ )

- i)  $\Phi_{GR}$  ist ONB
- ii) span $\{u_i\}_{i=1}^n = X_{GR}$

Beweis. i) Normiertheit klar nach Definition

Orthogonalität per Induktion:

Sei 
$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0 \ \forall \ j < i$$

Dann gilt für j < i + 1:

$$\begin{split} \langle \bar{\varphi}_{i+1}, \varphi_j \rangle &= \langle u_{i+1}, \varphi_j \rangle - \sum_{k=1}^{(i+1)-1} \langle u_{i+1}, \varphi_k \rangle \underbrace{\langle \varphi_k, \varphi_j \rangle}_{\delta_{kj} \text{ sowohl für} j < i \text{ als auch} j = i} \\ &= \langle u_{i+1}, \varphi_j \rangle - \langle u_{i+1}, \varphi_j \rangle = 0 \end{split}$$

also auch 
$$\langle \varphi_{i+1}, \varphi_j \rangle = \langle \frac{\bar{\varphi}_{i+1}}{||\varphi_{i+1}||}, \varphi_j \rangle = 0$$

ii) "⊇" klar nach Konstruktion

"=" folgt durch Dimensionsbetrachtung:

$$\dim \operatorname{span} \{\varphi_i\}_{i=1}^n = n = \dim \operatorname{span} \{u_i\}_{i=1}^n$$

### Bemerkung.

- Algorithmus liefert also ONB, garantiert Stabilität des RB-Verfahren für symmetrisches  $a(\cdot,\cdot)$  gemäß 3.7
- Es existiert nur triviale Approximationsaussage, z. B. wegen ii):

$$\max_{j=1,...,m} \inf_{v \in X_{GR}} ||u_j - v|| = 0$$

Für Teilbasis  $\Phi_{GR,m} := \{\varphi_1, \dots, \varphi_m\}, m < n \text{ werden } \{u_i\}_{i=1}^m \text{ exakt approximient } \text{ über } \{u_i\}_{i=m+1}^n \text{ weiß man nichts.}$ 

• Basis hängt von Reihenfolge der  $\{u_i\}_{i=1}^n$  ab, macht also nur Sinn, wenn diese eine natürliche Reihenfolge haben.

• Gram Schmidt Orthonormierung folgt häufig als "Postprocessing" für anderweitig erzeugte Basis, z. B. Lagrange-, Greedy-Basis, etc.

# **Satz 3.44** (Berechnung von $\Phi_{GR}$ über Gram-Matrix)

Seien  $\{u_i\}_{i=1}^m \subset X$  lin. unabh.,  $K = (\langle u_i, u_j \rangle)_{i,j=1}^n$  mit Cholesky-Zerlegung  $K = LL^T$ , d. h. L untere  $\Delta$ -Matrix mit positiver Diagonalen. Definiere  $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n := (L^T)^{-1}$ . Dann ist die Gram-Schmidt ONB  $\Phi_{GR}$  äquivalent berechenbar durch

$$\varphi_j = \sum_{i=1}^j a_{ij} u_i$$
 für  $1 \le j \le n$ 

Beweis. Übung.

## Proper Orthogonal Decomposition (POD)

## **Definition 3.45** (Korrelationsoperator)

Sei  $\{u_i\}_{i=1}^n \subset X$ . Dann definieren wir den empirischen Korrelationsoperator  $R \in L(X,X)$  durch

$$Ru := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \langle u_i, u \rangle u_i \quad \forall u \in X$$

### Bemerkung.

ullet Linearität von R ist klar, Beschränktheit folgt wegen

$$||Ru|| \le \frac{1}{n} \sum ||u_i||^2 ||u|| \Rightarrow ||R|| = \sup_{u \ne 0} \frac{||Ru||}{||u||} \le \frac{1}{n} \sum ||u_i||^2 < \infty$$

also  $R \in L(X,X)$ 

- Wir nennen ein  $A \in L(X,X)$  kompakt falls abgeschlossenes Bild der offenen Einheitskugel, d. h.  $\overline{A(B_1(0))}$ , kompakt ist
- Wir nennen  $A \in L(X,X)$  selbstadjungiert (genauer Hilbertraum-selbstadjungiert), falls  $\langle Au, v \rangle = \langle u, Av \rangle \ \forall \ u, v \in X$

#### Satz 3.46 (Spektralsatz)

Sie  $A \in L(X,X)$  kompakt & selbstadjungiert, dann existiert endliche oder abzählbar unendliche orthonormmiertes System von Eigenvektoren  $\{\varphi_i\}_{i\in I}$ ,  $I\subseteq\mathbb{N}$  zu Eigenwerten  $\{\lambda_i\}_{i\in I}\subset\mathbb{R}\setminus\{0\}$  mit

$$Au = \sum_{i \in I} \lambda_i \langle u, \varphi_i \rangle \varphi_i \qquad \forall \ u \in X$$

Falls I unendlich, so  $\lim_{i\to\infty} \lambda_i = 0$ .

Beweis. z.B. Alt: "lineare Funktionalanalysis" Satz 12.12

## Satz 3.47 (POD-Basis)

Zu  $\{u_i\}_{i=1}^n$  mit R aus 3.45 existiert orthonormierte Menge  $\{\varphi_i\}_{i=1}^{n'}$  von  $n' \leq n$  Eigenvektoren zu reellen Eigenwerten  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_{n'} > 0$  mit

$$Ru = \sum_{i=1}^{n'} \lambda_i \langle \varphi_i, u \rangle \varphi_i$$
 (3.23)

Für  $m=1,\ldots,n'$  definieren  $\Phi_{POD}:=\Phi_{POD,m}:=\{\varphi_i\}_{i=1}^m$  als POD-Basis und  $X_{POD}:=X_{POD,m}:=\operatorname{span}\Phi_{POD,m}$  als POD-Raum.

Beweis. R hat endlich dimensionales Bild, also  $\overline{R(B_1(0))}$  abgeschlossen, beschränkt im endlich dimensionalen Raum, also kompakt. R ist selbstadjungiert, denn  $\langle Ru, v \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \langle u_u, u \rangle \langle u, v \rangle = \langle u, Rv \rangle$ . Also existiert nach Spektralsatz 3.46 entsprechend endliches ONS, das (3.23) erfüllt. Dies kann insbesondere nicht unendlich sein, wegen endlichem Bild.

## Bemerkung.

- Die Projektion  $X \to X_{POD}$  wird in der statistischen Datenanalyse auch Hotelling-Transformation, Principal Component Analysis (PCA) oder Karhunen-Loève-Transformation genannt.
- Bezeichnung POD, als "proper", ist Anlehnung an das französische "valeur propre" für Eigenwert.
- Wir nennen Basisvektoren von  $\Phi_{POD}$  auch POD-Moden.

#### Illustration

- $\{\varphi_i\}_{i=1}^{n'}$  ist ONB für span $\{u_i\}_{i=1}^n$  aber nicht eindeutig (VZ oder vertauschen bei mehrfachen Eigenwerten)
- $\varphi_1$  ist Richtung höchster Varianz von  $\{u_i\}_{i=1}^n$   $\varphi_2$  ist Richtung höchster Varianz von  $\{P_{x_{POD,1}}^\perp u_i\}_{i=1}^n$
- Koordinaten der Daten in der POD-Basis sind unkorreliert  $\rightarrow$  Übung.
- $\{\varphi_i\}, \{\sqrt{\lambda_i}\}\$  sind die Hauptachsen bzw. Achsenabschnitte des Ellipsoids  $\{\langle u, R^{-1}u\rangle = 1\}$
- Falls  $X = \mathbb{R}^H$  und  $\{u_i\}_{i=1}^n$  Realisierungen von n unabhängigen, identisch normalverteilten Zufallsvariablen mit Verteilung  $\mathcal{N}(\mu, \Sigma) := C \cdot \exp\left(-(x-\mu)^T \Sigma (x-\mu)\right)$  mit Mittelwert  $\mu = 0$ , so ist  $R \in \mathbb{R}^{H \times H}$  guter Schätzer für  $\Sigma$ , insbesondere  $R \to \Sigma$  konvergiert für  $n \to \infty$  in geeignetem Sinne.

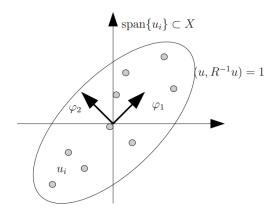


Abbildung 8: Ellipsoide aus Kovarianzoperator (aus B. Haasdonk, Reduzierte-Basis-Methoden, Skript zur Vorlesung SS 2011, Universität Stuttgart, IANS-Report 4/11, 2011.)

Satz 3.48 (Berechnung von  $\Phi_{POD}$  über Gram-Matrix) Sei  $\{u_i\}_{i=1}^n \subset X$  und  $K = \left(\langle u_i, u_j \rangle\right)_{i,j=1}^n$ . Dann sind äquivalent:

i )  $\varphi \in X$ ist Eigenvektor von Rzu Eigenwert  $\lambda > 0$ mit Norm 1 und einer Darstellung

$$\varphi = \sum a_i u_i$$
 mit o. B. d. A.  $a \in \ker(K)^{\perp}$ 

ii)  $a=(a_i)_{i=1}^n\in\mathbb{R}^n$ ist Eigenvektor von  $\frac{1}{n}K$  zu $\lambda>0$ mit Norm $\frac{1}{\sqrt{n\lambda}}$ 

Beweis.  $ii) \Rightarrow i$ 

Sei a Eigenvektor von  $\frac{1}{n}K$  zu Eigenwert  $\lambda$  mit  $||a|| = \frac{1}{\sqrt{n\lambda}}$  also

$$\lambda a = \frac{1}{n} K a$$

Multiplikation der i-ten Kompoenten mit  $u_i$  und Summieren ergibt

$$\sum_{i=1}^{n} u_i \lambda a_i = \sum_{i=1}^{n} u_i \frac{1}{n} \underbrace{\left(\sum_{j=1}^{n} \langle u_i, u_j \rangle a_j\right)}_{(Ka)_i}$$

Mit  $\varphi := \sum u_i a_i$  gilt also

$$\lambda \varphi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} u_i \langle u_i, \varphi \rangle = R \varphi$$

Also  $\varphi$  Eigenvektor von R zu Eigenwert  $\lambda$ . Für Norm folgt

$$||\varphi||^2 = \langle \sum a_i u_i, \sum a_j u_j \rangle = a^T \underbrace{Ka}_{n\lambda a} = n\lambda \cdot ||a||^2 = 1$$

K ist symmetrisch, also existiert vollständiges ONS von Eigenvektoren.  $\ker(K)$  wird aufgespannt von EV zu EW 0, also  $a \perp \ker(K)$ , a EV zu  $\lambda > 0$ . i)  $\Rightarrow$  ii):

Sie  $\varphi$  EV von R zu EW  $\lambda > 0$  und  $||\varphi|| = 1$ . Sei  $\bar{a} \in \mathbb{R}^n$  mit  $\varphi = \sum \bar{a}_i u_i$  (existiert weil  $\varphi \in \text{Bild}(R) = \text{span}\{u_i\}_{i=1}^n$ ). Verschiebungen von  $\bar{a}$  um  $a^0 \in \text{ker}(K)$  erhalten  $\varphi$ :

$$\varphi' := \sum_{i=1}^{n} (\bar{a}_i + a_i^0) u_i \Rightarrow \langle \varphi', u_k \rangle = \langle \sum_{i=1}^{n} \bar{a}_i u_i, u_k \rangle + \langle \sum_{i=1}^{n} a_i^0 u_i, u_k \rangle$$
$$= \langle \varphi, u_k \rangle + \sum_{i=1}^{n} a_i^0 \langle u_i, u_k \rangle \quad , \quad k = 1, \dots, n$$

Also  $\varphi' = \varphi$ .

Wähle speziell  $a := \bar{a} - P\bar{a}$ , P orthogonale Projektion auf  $\ker(K)$ .

$$\Rightarrow a \in \ker(K)^{\perp}$$
,  $P\bar{a} \in \ker(K) \Rightarrow \varphi = \sum \bar{a}_i u_i = \sum a_i u_i$ 

i)  $\Rightarrow$  ii) o.B.d.A.  $a \in \ker(K^{\perp}$ Da  $\varphi \in V$  zu  $\lambda > 0$  gilt:

$$\underbrace{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \langle u_i, \sum_{j=1}^{n} a_i u_j \rangle}_{R\varphi} u_i = \lambda \varphi = \lambda \sum_{j} a_j u_j$$

Testen mit  $u_k$  liefert

$$\frac{1}{n} \underbrace{\sum_{j} \langle u_i, u_j \rangle \langle u_i, u_k \rangle a_j}_{(K^2 a)_k} = \lambda \underbrace{\sum_{j} a_j \langle u_j, u_k \rangle}_{(K a)_k}$$

Also  $\frac{1}{n}K^2a=\lambda Ka$ also Ka EV von  $\frac{1}{n}K$  zu EW  $\lambda.$  Dann ist schon a EV, denn  $a\in \ker(K)^\perp:$ 

$$(*) Ka(\frac{1}{n}K - \lambda)a = 0$$

 $a\in \ker(K^\perp),\ Ka\in \ker(K^\perp)$ wegen Symmetrie  $\langle Ka,v\rangle=\langle a,Kv\rangle=0 \ \forall v\in \ker(K)$   $\Rightarrow (\frac{1}{n}K-\lambda)a\in \ker(K)^\perp$ aber auch wg. (\*)  $(\frac{1}{n}K-\lambda)a\in \ker(K)$   $\Rightarrow (\frac{1}{n}K-\lambda)a=0$ also a EV von  $\frac{1}{n}K$  zu  $\lambda.$  Wie im ersten Teil gilt

$$1 = ||\varphi||^2 = \sum a_i a_j \langle u_i, u_j \rangle = a^T K a = a^T \cdot n \lambda a = n \lambda a ||a||^2$$
$$\Rightarrow ||a|| = \frac{1}{\sqrt{n \cdot \lambda}}$$

**Bemerkung.** Falls X endlichdimensional  $\dim(X) = H$ , kann daher POD entweder als teures EWP f ür R in X (Komplexität  $\mathcal{O}(H^3)$ ) oder, meist günstiger, als EWP für K (Komplexität  $\mathcal{O}(n^3)$ ) ermittelt werden.

Bezeichnung für letzteres ist auch "method of snapshots" (Sirovich, 1987) oder Kernel-PCA (Schollkopf & Smola, 2002). POD kann auch über Singulärwertzerlegung der Koeffizientenmatrix berechnet werden:

Satz 3.49 (Berechnung für  $X = \mathbb{R}^H$  via SVD)

Sei  $X = \mathbb{R}^H$  mit  $\langle \cdot, \cdot \rangle = \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^H}$ .  $U = [u_1, \dots, u_n] \in \mathbb{R}^{H \times n}$  Snapshot-Matrix mit Rang U = n' und

$$U = \Phi S V^T$$

eine verkürzte SVD, d. h.  $\Phi \in \mathbb{R}^{H \times n'}$ ,  $V \in \mathbb{R}^{n \times n'}$  orthonormale Spalten und  $S = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_{n'}) \in \mathbb{R}^{n' \times n'}$  ( $\sigma_i$ : Singulärwerte) mit  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{n'} \geq 0$ . Dann ist  $\Phi_{POD,n'} = \Phi$ .

Beweis. Sei  $\Phi = (\bar{\varphi}_1, \dots, \bar{\varphi}_n)$ . Nach Definition gilt  $Ru = \frac{1}{n}UU^TU \ \forall u \in \mathbb{R}^H$ . Damit ist  $\bar{\varphi}_i$  EV von R zu i-ten Eigenwert  $\frac{1}{n}\sigma_i^2$ :

$$R\bar{\varphi}_i = \frac{1}{n}UU^T\bar{\varphi}_i = \frac{1}{n}\Phi S \underbrace{V^TV}_I S \underbrace{\Phi^T\bar{\varphi}_i}_{e_i \in \mathbb{R}^{n'}}$$
$$= \frac{1}{n}\Phi \underbrace{S^2e_i}_{\sigma_i^2e_i} = \frac{1}{n}\sigma_i^2\bar{\varphi}_i$$

Die EW  $\frac{1}{n}\sigma_i^2$  sind monoton fallend, also identisch sortiert wie EW von R, das heißt  $\lambda_i = \frac{1}{n}\sigma_i^2$  und  $\varphi_i = \bar{\varphi}_i$ .

## Bemerkung.

- obiges ist sehr eingänglich ("1-Zeilenbeweis"), aber algorithmisch nicht unbedingt besser, weil SVD auch durch EWP definiert (Numerik I)
- Verallgemeinerung für allg. HR  $X \to \text{Übung (Blatt 5)}$

**Satz 3.50** (Approximationsfehler für  $X_{POD,m}$ )

Sei  $\{u_i\}_{i=1}^n \subset X$  und für  $Y \subset X$  Unterraum ist mittlerer quadratischer Fehler  $J(Y) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n ||u_i - P_y u_i||^2$ . Dann gilt für den POD-Raum

$$J(X_{POD,m}) = \sum_{i=m+1}^{n'} \lambda_i \qquad \text{für } m = 1, \dots, n'$$

mit  $\lambda_i$  EW von R.

Beweis. Sei  $\Psi = \{\Psi_1, \dots, \Psi_m\}$  ONB für Y. Dann folgt

$$J(Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} ||u_i - P_y u_i||^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} ||u_i - \sum_{j=1}^{m} \langle \Psi_j, u_i \rangle \Psi_j||^2$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} ||u_i||^2 - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \langle u_i, \Psi_j \rangle^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j,k} \langle \Psi_j, u_i \rangle \langle u_i, \Psi_k \rangle \underbrace{\langle \Psi_j, \Psi_k \rangle}_{=\sigma_j k}$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} ||u_i||^2 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \langle u_i, \Psi_j \rangle^2$$

Wegen  $u_i \in Bild(R) = X_{POD,n'}$  ist  $u_i = \sum_{j=1}^{n'} \langle \varphi_j, u_i \rangle \varphi_j$ 

$$||u_i||^2 = \sum_{j,k=1}^{n'} \langle \varphi_j, u_i \rangle \langle \varphi_k, u_i \rangle \underbrace{\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle}_{=\sigma_{ik}} = \sum_{j=1}^{n'} \langle \varphi_j, u_i \rangle^2$$

also mittlerer quadratischer Projektionsfehler:

$$J(X_{POD,m}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n'} \langle \varphi_j, u_i \rangle^2 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \langle u_i, \varphi_j \rangle^2$$

$$= \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=m+1}^{n'} \langle \varphi_j, u_i \rangle^2\right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=m+1}^{n'} \langle \varphi_j, u_i \rangle \langle \varphi_j, u_i \rangle$$

$$= \sum_{j=m+1}^{n'} \langle \varphi_j, \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \langle \varphi_j, u_i \rangle u_i \rangle$$

$$= \sum_{j=m+1}^{n'} \langle \varphi_j, \underbrace{R\varphi_j}_{=\lambda_j \varphi_j} \rangle = \sum_{j=m+1}^{n'} \lambda_j$$

**Satz 3.51** (Bestapproximation durch  $X_{POD,m}$ )

Unter allen Räumen der Dimension m ist  $X_{POD,m}$  bzgl. J optimal

$$j(X_{POD,m}) = \inf_{\substack{Y \subset X \\ \dim Y = m}} J(Y)$$

Beweis. Übung. □

Bemerkung (Zusammenfassung).

• POD liefert also orthonormale Basis, garantiert Stabilität des RB-Verfahrens (bei symmetrischem  $a(\,\cdot\,,\,\cdot\,)$ 

- Es existieren Approximationsaussagen bzgl. des mittleren quadratischen Projektionsfehlers, sogar Optimalität nachweisbar. Die POD Teilbasen ermöglichen Approximation <u>aller</u> Snapshots mit Fehlerkontrolle der abgeschnittenen Eigenwerte.
- Die POD-Basis hängt nicht von Reihenfolge der Snapshots ab.
- Die POD-Basen sind hierarchisch:

$$\Phi_{POD,m} \subseteq \Phi_{POD,m'} \qquad \text{für } m \le m'$$

- Die POD kann auch zur Erweiterung einer bestehenden ONB Φ verwendet werden, indem {ũ<sub>i</sub>}<sup>n</sup><sub>i=1</sub>, ũ<sub>i</sub> = u<sub>i</sub> − P<sub>span(Φ)</sub>u<sub>i</sub> und eine POD Basis Φ̃<sub>POD</sub> hierfür berechnet wird. Dann ist Φ ∪ Φ̃<sub>POD</sub> eine erweiterte/neue ONB.
- Man kann POD auch als inkrementelles Verfahren mit 1D-Minimierung von J(Y) verstehen.

Sei  $\{u_i\}_{i=1}^n \subset X$ . Dann definiere

$$\bar{\varphi}_1 := POD_1(\{u_i\}_{i=1}^n) := \operatorname{arginf}_{\substack{\varphi \in X \\ ||\varphi||=1}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n ||u_i - \langle u_i, \varphi_i \rangle \varphi_i||^2$$

$$\bar{X}_1 := \operatorname{span}(\bar{\varphi}_1)$$
und für  $i = 2, \dots, n'$ 

$$\bar{\varphi}_i := POD_1(\{u_i - P_{\bar{X}_{i-1}} u_i\}),$$

$$\bar{X}_i := \operatorname{span}(\bar{\varphi}_1, \dots, \bar{\varphi}_i)$$

Dann ist  $(\bar{\varphi}_1, \dots, \bar{\varphi}_m)$  POD-Basis (aus m Moden/Basisvektoren) (bis auf Rotation, Vorzeichen).

#### Greedy-Verfahren

### **Definition 3.52** (Greedy-Verfahren)

Sei  $S_{train} \subset \mathcal{P}$  "Trainingsmenge" von Parametern,  $\Delta(Y,\mu) \in \mathbb{R}^+$  für Teilräume  $Y \subset X$  und Parameter  $\mu \in \mathcal{P}$  ein "Fehlerindikator" und  $\epsilon_{tol} > 0$  eine Fehlertoleranz. Die Greedy-Basen  $\Phi_{GRE,m}$ , Greedy-Raum  $X_{GRE,m}$  und Sample-Menge  $S_m$  für  $m=0,\ldots,N$  sind iterativ definiert durch

$$S_0 = \emptyset$$
,  $X_{GRE,0} = \{0\}$ ,  $\Phi_{GRE,0} = \emptyset$ ,  $m := 0$ 

Solange 
$$\epsilon_m := \max_{\mu \in S_{train}} \Delta(X_{GRE,m}, \mu) > \epsilon_{tol}$$

$$\mu^{(m+1)} := \max_{\mu \in S_{train}} \Delta(X_{GRE,m}, \mu)$$

$$S_{m+1} := S_m \cup \{\mu^{(m+1)}\}$$

$$\varphi_{m+1} := u(\mu^{(m+1)} \text{ L\"osung von } (P(\mu^{(m+1)}))$$

$$\Phi_{GRE,m+1} := \Phi_{GRE,m} \cup \{\varphi_{m+1}\}$$

$$X_{GRE,m+1} := X_{GRE,m} + \operatorname{span}(\varphi_{m+1})$$

$$m \leftarrow m+1$$

setze schließlich N := m

## Bemerkung.

- Erste Verwendung von Greedy-Verfahren für RB: Veroy, Prud'homme, Rovas, Patera 2003, seitdem "Standard"
- $\Phi_{GRE,m}$  ist Lagrange-RB zur Sample-Menge  $S_m$ , i. a. nicht orthonormal. Kann für numerische Stabilität mit Gram-Schmidt orthonormalisiert werden.
- Basen sind hierarchisch:  $\Phi_{GRE,m} \subset \Phi_{GRE,m'}, m \leq m'$
- In Literatur wird Suche nach  $\mu^{(1)}$  häufig umgangen, indem dieses beliebig aus  $S_{train}$  gewählt wird.
- $S_{train}$  wird häufig als strukturierte oder zufällige Menge aus  $\mathcal{P}$  mit endlich vielen Samples gewählt.
- Falls  $S_{train}$  zu klein, kann das RB-Modell overfitting aufweisen, d. h.

$$\sup_{\mu \in \mathcal{P}} ||u(\mu) - u_N(\mu)|| >> \sup_{\mu \in S_{train}} ||u(\mu) - u_N(\mu)||$$

• Greedy-Verfahren ist also akkummulatives Verfahren, welches iterativ den "schlechtest"-aufgelösten Parameter  $\mu^{(m+1)}$  wählt,  $u(\mu^{(m+1)})$  berechnet, und als neuen Basisvektor hinzufügt. Insofern kann dies als approximative Lösung des Optimierungsproblems

$$\min_{\substack{Y \subset X \\ \dim Y = N}} \max_{\mu \in \mathcal{P}} \Delta(Y, \mu)$$

interpretiert werden: Statt maximieren über  $\mathcal{P} \leadsto$  maximieren über  $S_{train}$ , statt minimieren über  $X \subset X \leadsto$  iterative Sequenz von Räumen  $Y = X_{GRE,m}$ .

Lemma 3.53 (Fehlerindikatoren, Terminieren des Verfahrens)

i) Falls  $|S_{train}| = n < \infty$  und für alle  $\mu \in \mathcal{P}$  und  $Y \subset X$  gilt

$$u(\mu) \in Y \implies \Delta(Y,\mu) = 0$$

so terminiert das Greedy-Verfahren mit  $N \leq n$  und

$$\max_{\mu \in S_{train}} \Delta(X_{GRE,n}, \mu) \le \epsilon_{tol}$$

ii) Dies erfüllen z.B.

$$\Delta(Y,\mu) := ||u(\mu) - u_N(\mu)||$$
  
$$\Delta(Y,\mu) := ||u(\mu) - P_y u(\mu)||$$
  
$$\Delta(Y,\mu) := \Delta_N^{en}(\mu)$$

oder andere Fehlerschätzer, wobei  $X_N = Y$  gesetzt wird.

Beweis. Übung.  $\Box$ 

Korollar 3.54 (Fehleraussage)

Für  $\Delta(Y,\mu) := ||u(\mu) - u_N(\mu)||$  oder  $\Delta(Y,\mu) := \Delta_{N'}$  gilt für  $N' = 1, \dots, N$ 

$$\max_{\mu \in S_{train}} ||u(\mu) - u_{N'}(\mu)|| \le \epsilon_{N'}$$

Beweis. Klar nach Konstruktion.

## Bemerkung (Wahl der Fehlerindikatoren).

- Greedy-Verfahren hervorragendes Einsatzfeld für Fehlerschätzer, denn  $\Delta_N(\mu)$  kann sehr schnell für alle  $\mu \in S_{train}$  ausgerechnet werden, ohne dass alle  $u(\mu)$ ,  $\mu \in S_{train}$  berechnet werden müssen (im Gegensatz zu POD). Dadurch können sehr große Mengen  $S_{train}$  behandelt werden. Dies erhöht die Erwartung, dass  $\Phi_{GRE,N}$  auch für neue Parameter  $\mu \in \mathcal{P} \setminus S_{train}$  eine gute Approximation liefert.
- Wahl:  $\Delta(Y,\mu) := ||u(\mu) P_y u(\mu)||$ , orthogonaler Projektionsfehler

Motivation: Falls dies klein, so ist mit Céa auch RB-Fehler klein

Nachteile: Teuer auszuwerten, hochdimensionale Operation erfordert alle Snapshots  $u(\mu)$ ,  $\mu \in S_{train}$  müssen vorliegen, Größe von  $S_{train}$  hiermit eingeschränkt.

Vorteil: Terminieren ist garantiert. Approximationsraum ist entkoppelt von RB-Approximation, d. h. Verfahren kann angewandt werden ohne Vorliegen des RB-Verfahren und ohne Fehlerschätzer.

• Wahl:  $\Delta(Y,\mu) := ||u(\mu) - u_N(\mu)||$ , RB-Fehler

Motivation: Dies ist die ultimative Größe, welche kontrolliert werden muss, z. B. (3.7).

Nachteile: Wie bei Projektionsfehler: teuer, alle Snapshots  $\mu \in S_{train}$  vorberechnen,  $S_{train}$  Größe eingeschränkt.

Vorteile: Terminieren ist garantiert, Verfahren kann mit RB-Verfahren angewandtwerden, für welche keine FS vorliegen.

- Wahl:  $\Delta(Y,\mu) = \Delta_N(\mu)$  [oder Energie-/rel. Fehlerschätzer]
  - Nachteil: Falls Fehlerschätzer den Fehler stark überschätzt, kann der RB-Raum evtl. größer als nötig sein.
  - Vorteile: schnell auswertbar, unabhängig von H denn Offline-Online. Es müssen nur N Snapshots berechnet werden,  $|S_{train}|$  kann sehr groß gewählt werden, Terminieren kann garantiert werden.
- Ziel-orientierte Indikatoren: Falls  $\Delta(Y,\mu)$  als Ausgabefehler  $|s(\mu) s_N(\mu)|$  oder Schranke  $\Delta_N$ , s gewählt wird, nennt man das Verfahren "goal-oriented". Die Basis wird potentiell sehr klein und kann Ausgabe gut approximieren. Die Feldvariable u wird jedoch nicht notwendigerweise gut approximiert.
- Falls  $\Delta(Y,\mu)$  als Feldvariablen-Fehler  $||u(\mu) u_N(\mu)||$ , PRojektionsfehler oder schätzer gewählt wird, ist Verfahren nicht goal-oriented, die Basis wird größer sein, aber sowohl u als auch v, als auch beliebig andere Funktionale  $\tilde{s}$  gut approximiert.

## Bemerkung (Reihenfolge).

• Greedy-Basis hängt meistens nicht von Reihenfolge der Parameter  $S_{train}$  ab. Nur falls zufällig das Maximum von  $\Delta(Y,\mu)$  mehrdeutig ist  $\leadsto$  Praktische Lösung: Wähle ersten Parameter, der maximales  $\Delta(Y,\mu)$  erzeugt.

Bemerkung (Bestimmung der Approximationsgüte/Overfitting). In Terminologie der Statistik/Maschinellen Lernens ist  $S_{train}$  eine Trainingsmenge und  $\epsilon_N$  aus Greedy-Verfahren der sogenannten Trainingsfehler.  $S_{train}$  muss  $\mathcal{P}$  gut repräsentieren, sollte möglichst groß gewählt werden. Falls  $S_{train}$  zu klein, oder unrepräsentativ für  $\mathcal{P}$  kann Overfitting auftreten.

Somit ist kleiner Trainingsfehler nicht hinreichend für gutes Modell. Modelle sollen daher nicht alleine anhand von Trainings-, sondern anhand unabhängiger Testmengen:

$$\epsilon_{test} = \max_{\mu \in S_{train}} \Delta(X_N, \mu)$$
, meistens zufällige Parametermenge

## Bemerkung (Monotonie).

- Im Allgemeinen gilt nicht  $\Delta(X_N,\mu) \geq \Delta(X_{n+1},\mu)$
- Es kann daher vorkommen, dass  $(\epsilon_n)_{n=1}^N$  nichtmonoton ist.
- Falls Beziehung zu Bestapproximation gilt, d. h. für ein C>0 unabhängig von n gilt:

$$\Delta(X_n,\mu) \le C \cdot \inf_{v \in X_n} ||u(\mu) - v||$$

kann zumindest eine Beschränkung oder asymptotischer Abfall erwartet werden.

• In bestimmten Fällen kann Monotonie bewiesen werden:

## **Satz 3.55** (Monotonie von $(\epsilon_n)$ )

Das Greedy-Verfahren erzeugt monoton fallende Sequenzen  $(\epsilon_n)_{n\geq 1}$  falls:

- i)  $\Delta(Y,\mu) := ||u(\mu) P_{X_n}u(\mu)|| \text{ oder}$
- ii) (P) ist compliant, d. h. l=f und a symmetrisch und  $\Delta(Y,\mu)=||u(\mu)-u_N(\mu)||_{\mu}$

Beweis. i) klar

ii) folgt aus 3.11

Bemerkung (Konvergenz des Greedy-Verfahrens).

- Einige Jahre lang war Greedy-Verfahren ein in der Praxis gut funktionierendes Verfahren, jedoch ohne theoretische Erklärung wann/warum es funktioniert.
- Notwendiges Kriterium für Erfolg des Greedy-Verfahren: Kolmogorov n-Weite von  $\mathcal{M}$  muss (schnell) abfallen. Sei  $\Delta(Y,\mu)$  so gewählt, dass  $\Delta(Y,\mu) \geq ||u(\mu P_y u(\mu))||$

$$\Rightarrow \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \Delta(Y, \mu) \ge \inf_{\substack{Y \subset X \\ \dim Y = n}} \sup_{\mu \in \mathcal{P}} ||u(\mu) - P_y u(\mu)|| = d_n(\mathcal{M})$$

- $\Rightarrow$  Falls  $\Phi_{GRE,n}$  gut, muss  $d_n(\mathcal{M})$  klein sein. Falls  $d_n(\mathcal{M})$  nicht klein, kann  $\Phi_{GRE,n}$  keine gute Approximation liefern.
- Spannend ist umgekehrte Frage, ob abfallendes  $d_n$  auch hinreichend für Gelingen des Greedy-Verfahrens.
- Antwort auf diese Fragen wurden in letzten Jahren gegeben:

(BMPPT 2012): Buffa, Maday, Patera, Prud'homme, Turinici: A-priori convergence of the greedy algorithm for the parameterized reduced basis method

M2AN, 46:595-..., 2012

(BCDDPW): Binev, Cohen, Dahmen, DeVore, Petrova, Wojtaszczyk: Convergence Rates for Greedy Algorithms in Reduced Basis Methods

SIAM J. Math. Anal., 43(3), 1455..., 2011.

• Die Hoffnung, ein Ergebnis der Form  $\epsilon_n \leq cd_1(\mathcal{M})$  zu erhalten kann (ohne weitere Annahme) leider nicht erreicht werden. Dies sieht man durch Vergleich von

$$\bar{d}_n(\mathcal{M}) = \inf_{\substack{Y \subset \operatorname{span}(\mathcal{M}) \\ \dim Y = n}} d(Y, \mathcal{M}) \quad \text{und} \quad d_n(\mathcal{M})$$

Theorem 4.1 in (BCDDPW2011) besagt:

i) Für jedes  $\mathcal{M}$  und  $n \geq 0$  gilt  $\bar{d}_n(\mathcal{M}) \leq (n+1)d_n(\mathcal{M})$ 

ii) Für jedes n > 0 und  $\epsilon > 0$  existiert  $\mathcal{M}$ , s. d.

$$\bar{d}_n(\mathcal{M}) \ge (n-1-\epsilon)d_n(\mathcal{M})$$

Wegen  $\epsilon_n \geq \bar{d}_n(\mathcal{M})$  und ii) ist "direkter Vergleich" von  $\epsilon_n$  und  $d_n(\mathcal{M})$  mit C unabhängig von n nicht möglich.

• Lösung ist zusätzliche Annahmen von Raten des Abfalls von  $d_n$ , damit können ähnliche Abfallraten für  $\epsilon_n$  gezeigt werden, z.B. zeigen (BMPPT2012):

Für 
$$S_{train} = \mathcal{P}$$
 und  $\Delta(Y,\mu) = ||u(\mu) - P_y u(\mu)||$ :

$$\epsilon_n \le 2^{n+1}(n+1)d_n(\mathcal{M})$$

Falls  $d_n$  schnell genug abfällt (z. B. exponentiell  $d_n(\mathcal{M}) \leq C \cdot e^{-\alpha n}$ ) so folgt dann auch exponentieller Abfall von  $\epsilon_n$  (mit anderem  $\alpha$ )

• Ein verbessertes Ergebnis (ohne Faktor (n+1)) und ein Ergebnis für Fall algebraischer (polynomiell in  $N^{-1}$ ) Konvergenz liefert (BCDPW), welches wir in unserer Notation formulieren (ohne Beweis).

Satz 3.56 (Greedy Konvergenzraten)

Sei  $S_{train} = \mathcal{P}$  kompakt und  $\Delta(Y,\mu)$  so gewählt, dass ex. ein  $\gamma \in (0,1]$  mit

$$||u(\mu^{(n+1)}) - P_{X_n} u(\mu^{(n+1)})|| \ge \gamma \sup_{u \in \mathcal{M}} ||u - P_{X_n} u||$$
(3.24)

i) (algebraische Konvergenz) Falls  $d_n(\mathcal{M}) \leq M \cdot n^{-\alpha}$  für geeignetes  $\alpha, M > 0$  und alle  $n \in \mathbb{N}$  und  $d_0(\mathcal{M}) \leq M$  dann gilt

$$\epsilon_n \le C \cdot M n^{-\alpha}, \quad n > 0$$

mit explizit berechenbarer Konstante C.

ii) (exponentielle Konvergenz) Falls  $d_n(\mathcal{M}) \leq M \cdot e^{-an^{\alpha}}$  für  $n \geq 0, M, a, \alpha > 0$  dann gilt

$$\epsilon_n < C\dot{M}e^{-cn\beta}, \quad n > 0$$

mit  $\beta := \frac{\alpha}{\alpha+1}$  und geeignete Konstanten C, c > 0.

**Bemerkung.** "Quasi-Optimalität des Greedy-Verfahrens: bis auf Konstante so gut wie optimale Approximation.

Bemerkung ("strong" vs "weak" greedy).

• Für  $\gamma = 1$  nennt man das Verfahren "strong greedy". Wird nur durch die Wahl

$$\Delta(Y,\mu) := \|u(\mu) - P_Y u(\mu)\|$$

realisiert.

- Für  $\gamma < 1$  nennt man das Verfahren "weak greedy" d.h. statt schlechtest-approximiertes Element wird ein einigermaßen schlecht approximiertes Element gewählt zur Basisgenerierung.
- Achtung  $\gamma \neq \gamma(\mu)$  Stetigkeitskonstante

Interessant ist Frage, ob Verwendung von Fehlerschätzern Bedingung (3.24) erfüllt für geeignetes  $\gamma$ . Für  $\Delta(Y,\mu) := \Delta_N(\mu)$  kann dies positiv beantwortet werden.

## Satz 3.57 ( $\Delta_N$ liefert weak Greedy)

Das Greedy-Verfahren mit Fehlerindikator  $\Delta(Y,\mu) := \Delta_N(\mu)$  stellt weak greedy Verfahren dar mit Konstante

$$\gamma := \frac{\bar{\alpha}^2}{\bar{\gamma}^2}$$

mit  $\bar{\alpha}$ ,  $\bar{\gamma}$  uniforme untere/obere Schranke für Koerzivitäts-/Stetigkeitskonstante.

Beweis. Lemma von Cea 3.9, Fehlerschranke 3.13 und Effektivitätsschranke 3.16 gelten für alle Räume  $X_n$ ,  $n \ge 1$  also

$$||u(\mu^{(n+1)}) - P_{X_n} u(\mu^{(n+1)})|| = \inf_{v \in X_n} ||u(\mu^{(n+1)}) - v||$$

$$\geq \frac{\alpha(\mu)}{\gamma(\mu)} ||u(\mu^{(n+1)}) - u_N(\mu^{(n+1)})||$$

$$\stackrel{3.16}{\geq} \frac{\alpha(\mu)}{\gamma(\mu)\eta_N(\mu)} \cdot \Delta_N(\mu^{(n+1)})$$

Behauptung folgt mit

$$\frac{\alpha(\mu)}{\gamma(\mu)\eta_N(\mu)} \stackrel{3.16}{\geq} \frac{\alpha(\mu)}{\gamma(\mu)} \frac{\bar{\alpha}}{\bar{\gamma}} \geq \frac{\bar{\alpha}^2}{\bar{\gamma}^2} =: \gamma$$

und

$$\Delta_N(\mu^{(n+1)}) = \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \Delta_N(\mu) \stackrel{3.13}{\geq} \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \|u(\mu) - u_N(\mu)\| \geq \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \|u(\mu) - P_{X_n}u(\mu)\|$$

## Bemerkung.

• Für thermischen Block  $B_1 = 2$ ,  $B_2 = 1$  gesehen:  $d_n$  fällt exponentiell d.h. hier liefert Greedy-Verfahren exponentielle Konvergenz.

- "Lücke" zwischen Theorie & Praxis ist jedoch noch, dass  $S_{train} \neq \mathcal{P}$  weil nur endliche Mengen  $S_{train}$  betrachtet werden können.
- In der Praxis beobachtet man jedoch auch für allgemeines  $B_1$ ,  $B_2$  und solchen endlichen  $S_{train}$  konvergenz.

## Numerische Beispiele:

demos\_chapter3(5) Illustration von Gram-Schmidt ONB aus demos\_chapter(3) d.h.  $B_1 = B_2 = 3$  und nur  $\mu_1$  variiert.  $\varphi_1$  ist normierter Snapshot,  $\varphi_2, \ldots, \varphi_8$  weisen stärker werdende Gradienten auf mit lokalen Strukturen um Kanten von  $\Omega_1$ .

**demos\_chapter3(6)**  $B_1 = B_2 = 2, \ \mu \in \mathcal{P} = [0.5, 2]^4$ 

Greedy-Basis mit zufälliger Menge  $S_{train}$ ,  $|S_{train}| = 1000$ . Fehlerindikator  $\Delta(Y,\mu) = \Delta_N(\mu)$ , Gram-Schmidt ON in jeder Iteration. Testmenge  $S_{test}$ ,  $|S_{test}| = 100$ . Bestimmung von maximalem Testfehler und -Schätzer.

⇒ schöne exponentielle Konvergenz von

$$\max_{\mu \in S_{test}} \|u(\mu) - u_N(\mu)\| \quad \text{und} \quad \max_{\mu \in S_{test}} \Delta_N(\mu)$$

Schätzer ist sehr nah an echtem Fehler (gute Effektivität).

**demos\_chapter3(7)** Effekt bei steigendem  $p = B_1 \cdot B_2$ 

 $B_1 = B_2 = 2,3,4, \ \mu \in \mathcal{P} = [0.5,2]^p$ , Greedy wie in vorigem Beispiel.

(Achtung 10 Minuten Laufzeit)

Illustration des Trainingsfehlers  $(\epsilon_n)_{n\geq 1}$ 

 $\Rightarrow$  Exponentielle Konvergenz, aber schlechtere Exponenten für größere p

## Bemerkung (Trainingsmenge-Wahl).

- Die Trainingsmenge sollte möglichst repräsentativ für  $\mathcal{P}$  sein, kann aber nicht beliebig groß sein aus Laufzeitgründen. Sollte nicht zu klein gewählt werden, um nicht Overfitting zu bewirken. Sorgfältige Wahl von  $S_{train}$  kann also entweder Qualität des RB-Modells oder die Offline-Laufzeit verbessern. Hierzu gibt es einige Ansätze & Modifikationen des Greedy-Verfahrens:
- "Multistage-Greedy": Wähle sehr große Menge  $S_{train}$ , zerlege diese in Sequenz gröberer Mengen

$$S_{train}^{(0)} \subset S_{train}^{(1)} \subset \ldots \subset S_{train}^{(m)} = S_{train}$$

Erzeuge  $\Phi_{GRE}^{(0)}$  aus  $S_{train}^{(0)}$ , dann erweitere diese Basis durch Greedy-Verfahren auf  $S_{train}^{(1)}$ , etc. Effekt ist wesentliche Beschleunigung des Greedy-Verfahren für  $S_{train}$ . Die meisten Iterationen werden nur mit kleiner Trainingsmenge durchgeführt (schnell), nur wenige Iterationen für  $S_{train}^{(m)}$  erforderlich (teuer).

Ref.: Sen: Reduced-Basis Approximation and A Posteriori Error Estimation for Many-Parameter Heat Conduction Problems, Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals 54(5): 369-389, 2008.

• Randomisiertes Greedy: Statt fester Menge  $S_{train}$  der Größe  $N_{train}$  in allen Iterationen, wähle in jeder Iteration eine neue Trainingsmenge der Größe  $N_{train}$ . Dadurch

wird praktisch eine Trainingsmenge der Größe  $N \cdot N_{train}$  in der Basisgenerierung verwendet.

Ref.: [HSZ2013]: Hesthaven, Stamm, Zhang: Efficient greedy algorithms for high-dimensional parameter spaces with applications to empirical interpolation and reduced basis methods. M2AN, 2013.

• Saturierungs-Annahme (?): Unter Annahme, dass ein Fehlerindikator für ein Parameter sich in einer Sequenz von Basiserweiterungen höchstens um Faktor  $C_s$  verschlechtert, besteht folgende Beschleunigungsmöglichkeit:

Für feste Menge  $S_{train}$  wird jeder Parameter  $\mu$ , der im Laufe des Greedy-Verfahren  $\Delta_N(\mu) \leq \frac{\epsilon_{tol}}{C_s}$  erfüllt, markiert und künftige Fehlerschätzer nicht mehr berechnet, da  $\mu$  bereits präzise erfasst. [HSZ2013] mit weiteren technischen Schnörkeln.

Adaptive Trainingsmengen-Erweiterung:
 Idee: Übertragen des adaptiven FEM-Schemas "Solve, Estimate, Mark, Refine" auf das Parametergebiet:

Initiale Trainingsmenge (grob)  $S_{train}^{(0)}$  ist Menge der Knoten eines Gitters auf  $\mathcal{P}$ . Auf  $S_{train}^{(0)}$  wird ein Greedy-Verfahren mit "early stopping" angewandt, d.h. das Greedy-Verfahren wird abgebrochen, sobald Overfitting detektiert wird, d.h.  $\frac{E_{val}}{E_{train}}$  zu groß wird, wobei  $E_{val}$ ,  $E_{train}$  den aktuell maximalen Fehlerindikator über einer Validationsmenge (zufällig) und  $S_{train}$  darstellen. Sobald Overfitting detektiert wird, werden für alle Gitterelemente Fehlerindikatoren bestimmt (z.B. Fehlerschätzer im Mittelpunkt), ein Anteil  $\Theta \in (0,1]$  der Elemente mit größten Indikatoren zur Verfeinerung markiert, das Parametergebiet verfeinert und seine Knoten ergeben erweiterte Trainingsmenge  $S_{train}^{(1)}$ . Dies wird wiederholt, bis  $\epsilon_{tol}$  erreicht wird.

Ergebnis ist gleichverteilter Fehler und sehr problemangepasste Wahl von  $S_{train}$  z.B. führt dieser Algorithmus automatisch zu Verfeinerungen in wichtigen Bereichen. Bei Diffusion z.B. in bereichen kleiner Diffusionsparameter.

Ref.: [HDO11] Haasdonk, Dihlmann, Ohlberger: A Training Set and Multiple Basis Generation Approach for Parametrized Model Reduction Based on Adaptive Grids in Parameter Space. MCMDS, 17: 423-442, 2011.

• Greedy mit Optimierung: Statt großer Menge  $S_{train}$  wird kleines  $S_{train}$  gewählt. Jedes  $\mu \in S_{train}$  wird als Startwert eines Optimierungsproblems gewählt. Aus den  $N_{train}$  lokalen Optima wird  $\mu^{(n+1)}$  als nächster Snapshotparameter gewählt.

Ref.: Urban, Volkwein, Zeeb: Greedy Sampling using Nonlinear Optimization. Kapitel in: Quarteroni, Rozza: Reduced Order Methods for Modeling and Computational Reduction, Springer MS&A Serie, 2014.

**Bemerkung** (Partitionsansätze). Bei komplexen Problemen kann die für gewünschtes  $\epsilon_{tol}$  erforderliche Basisgröße N zu groß sein. Generell verhalten sich  $\epsilon_{tol}$  und N gegenläufig und können nicht unabhängig gewählt werden.

Idee: Partitionierung des Parametergebiet durch Bisektions- oder strukturierte Gitter. Für jedes Teilgebiet wird eine Basis mit dem Greedy-Verfahren erzeugt. Diese Basen sind jeweils kleiner als einzelne globale Basis. In der Online-Phase wird zu  $\mu \in \mathcal{P}$  das geeignete Teilgebiet bestimmt und dessen RB zur Simulation verwendet. Indem das Parametergitter adaptiv genügend fein gewählt wird, kann sowohl  $\epsilon_{tol}$  als auch die maximale Basisgröße  $N_{max}$ , d.h. Online-Laufzeit vorgeschrieben werden.

"Haken": Offline-Phase teuer (Rechenzeit & Daten) Ref.:

- a) Bisektionsgitter: Eftang, Patera, Ronquist: An "hp" Certified Reduced Basis Method for Parametrized Elliptic Partial Differential Equations. SJSC, 32(6): 3170-3200, 2010.
- b) Hexaeder-Gitter: [HDO11]

#### 3.5 Primal-Duale RB-Verfahren

#### Motivation

- Erinnerung: Für nichtsymmetrische, non-compliant Probleme konnten wir nur  $\Delta_{N,s}(\mu)$  bereitstellen, welcher nur linear in  $||v_r||$  skaliert und wir haben die Unmöglichkeit von Effektivitätsschranken für die Ausgabe gesehen (ohne weitere Annahmen).
- Stattdessen für compliant Fall skaliert  $\bar{\Delta}_{N,s}$  quadratisch mit  $||v_r||$  und wir konnten Effektivitätsschranken zeigen.
- Dieser Abschnitt: Verbesserte Ausgabeschätzung für allgemeine nichtsymmetrische oder nicht-compliant Probleme (aber immer noch keine Effektivitätsschranken)
- $(P(\mu))$  und  $(P_N(\mu))$  werden weiter benötigt als "primale Probleme".

**Definition 3.58** (Duales volles Problem  $(P^{du}(\mu))$ )

Seien a, f, l wie in  $(P(\mu))$  gegeben. Dann ist für  $\mu \in \mathcal{P}$  gesucht  $u^{du}(\mu) \in X$  als Lösung von

$$a(v, u^{\mathrm{du}}(\mu); \mu) = -l(v; \mu) \quad \forall x \in X$$

## Bemerkung.

- Offensichtlich "negatives Ausgabefunktional" als rechte Seite und Vertauschen der Test- / Lösungsargumente in  $a(\cdot,\cdot)$ .
- Wohlgestelltheit für a koerziv: Existenz & Eindeutigkeit & Stabilität via Lax-Milgram.
- Duales Problem wird nur formell als Referenz verwendet zu welchem wir den dualen Fehlerabschätzer verwenden.

• Literatur zu diesem Abschnitt:

[Ro03]: Rovas: Reduced-Basis Output Bound Methods for Parametrized Partial Differential Equations, PhD-Thesis, MIT, 2003.

### Dualer RB-Raum

• Wir nehmen an, dass wir einen dualen RB-Raum gewählt haben:

$$X_N^{\mathrm{du}} \subset X, \quad X_N^{\mathrm{du}} = \operatorname{span} \phi^{\mathrm{du}}, \quad \dim X_N^{\mathrm{du}} = N^{\mathrm{du}}$$

welcher duale Lösungen  $u^{\mathrm{du}}(\mu)$  gut approximiert.

• Es ist i.A.  $X_n^{\text{du}} \neq X_N$ ,  $N^{\text{du}} \neq N$ ,  $X_N^{\text{du}}$  kann durch Greedy / POD etc. Verfahren aus Snapshots  $u^{\text{du}}(\mu)$  erzeugt werden.

**Definition 3.59** (Primal-Duales RB-Problem  $(P'_N(\mu))$ )

Sei ein Problem  $(P(\mu))$  gegeben,  $X_N$ ,  $X_N^{\text{du}}$  primaler & dualer RB-Raum. Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  sei  $u_N(\mu) \in X_N$  primale RB-Lösung wie in  $(P_N(\mu))$ , d.h.

$$a(u_N(\mu), v; \mu) = f(v; \mu) \quad \forall v \in X_N$$

 $u_N^{\mathrm{du}}(\mu)\in X_N^{\mathrm{du}}.$  Sei duale  $RB\text{-}L\ddot{o}sung,$ d.h.  $a(v,u_N^{\mathrm{du}}(\mu);\mu)=-l(v;\mu),$   $\forall v\in X_N^{\mathrm{du}},$  und die RB-Ausgabe  $s_N'(\mu)\in\mathbb{R}$  gegeben durch

$$s'_{N}(\mu) = l(u_{N}(\mu); \mu) - r(u_{N}^{du}(\mu); \mu)$$
(3.25)

wobei  $r(\cdot; \mu) \in X'$  das primale Residuum, d.h.  $r(v; \mu) = f(v; \mu) - a(u_N(\mu), v; \mu)$ . Weiter benötigen wir das duale Residuum  $r^{du}(\cdot; \mu) \in X'$  definiert durch

$$r^{\mathrm{du}}(v;\mu) := -l(v;\mu) - a(v,u_N^{\mathrm{du}}(\mu);\mu) \quad \forall v \in X$$

## Bemerkung.

- Wohlgestelltheit wieder klar mit Lax-Milgram.
- In FEM-Literatur existiert der Begriff "dual-weighted residual" (DWR), ähnlich wie oben das Residuum und mit dualer Lösung kombiniert in (3.25).
- Im Vergleich zu  $(P_N(\mu))$  haben wir  $s'_N(\mu) = s_N(\mu) r(u_N^{\mathrm{du}}(\mu); \mu)$ , somit stellt  $r(u_N^{\mathrm{du}})$  ein Korrekturterm dar, der die verbesserte Ausgabeschätzung liefert.
- Wie im primalen Fall ist auch duales Residuum rechte Seite der dualen Fehlergleichung

$$a(v, u^{\mathrm{du}}(\mu) - u^{\mathrm{du}}_N(\mu); \mu) = r^{\mathrm{du}}(v; \mu) \quad \forall v \in X$$

• Reproduktion von Lösungen gilt analog zu  $(P_N(\mu))$ : Falls  $u(\mu) \in X_N$ ,  $u_N^{du}(\mu) \in X_N^{du}$ 

$$\Rightarrow u_N(\mu) = u(\mu), \quad u_N^{\mathrm{du}}(\mu) = u^{\mathrm{du}}(\mu)$$

und  $s'_N(\mu) = s(\mu)$ . Letzteres sieht man:

$$s(\mu) - s'_N(\mu) = l(u) - l(\underbrace{u_N}_u) + r(u^{\mathrm{du}}) = f(\underbrace{u^{\mathrm{du}}}_{a(u,u^{\mathrm{du}})}) - a(\underbrace{u_N}_u, u^{\mathrm{du}}) = 0$$

## Satz 3.60 (Beziehung zur Bestapproximation)

i) Für den dualen Fehler gilt

$$\|u^{\mathrm{du}}(\mu) - u_N^{\mathrm{du}}(\mu)\| \le \frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)} \inf_{v \in X_N^{\mathrm{du}}} \|u^{\mathrm{du}}(\mu) - v\|$$

ii) Für den Ausgabefehler gilt

$$|s(\mu) - s'_{N}(\mu)| = |a(u - u_{N}, u^{\mathrm{du}} - u_{N}^{\mathrm{du}})| \le \gamma(\mu) ||u - u_{N}|| ||u^{\mathrm{du}} - u_{N}^{\mathrm{du}}||$$

$$\le \frac{\gamma(\mu)^{3}}{\alpha(\mu)^{2}} \inf_{v \in X_{N}} ||u - v|| \cdot \inf_{v \in X_{N}^{\mathrm{du}}} ||u^{\mathrm{du}} - v||$$
(3.26)

Beweis.

i) Céa

ii)
$$s(\mu) - s'_{N}(\mu) = l(u) - l(u_{N}) + r(u_{N}^{du})$$

$$= \underbrace{l(u - u_{N})}_{-a(u - u_{N}, u^{du})} + \underbrace{f(u_{N}^{du})}_{a(u, u_{N}^{du})} - a(u_{N}, u_{N}^{du})$$

$$= -a(u - u_{N}, u^{du}) + a(u - u_{N}, u_{N}^{du})$$

$$= -a(u - u_{N}, u^{du} - u_{N}^{du})$$

$$= -a(u - u_{N}, u^{du} - u_{N}^{du})$$
(3.27)

Somit erste Gleichheit in (3.26), Ungleichheit in (3.27) dann klar wegen Stetigkeit und  $2\times \text{C\'ea}$ .

In a-priori-Schranke (3.26) sehen wir den "multiplikativen Effekt", somit ist  $s_N'$  tatsächlich gute Schätzung und es besteht die Hoffnung dies durch a-posteriori Schranken zu verifizieren. Zunächst ganz analog zu primalem Problem eine a-posteriori Schranke für dualen Fehler:

Satz 3.61 (Duale a-posteriori Fehlerschranke & Effektivitätsschranke)

i) 
$$||u^{\mathrm{du}}(\mu) - u_N^{\mathrm{du}}(\mu)|| \le \Delta_N^{\mathrm{du}}(\mu) := \frac{||r^{\mathrm{du}}(\mu)||_{X'}}{\alpha_{LR}(\mu)}$$

ii) 
$$\eta_N^{\mathrm{du}}(\mu) := \frac{\Delta_N^{\mathrm{du}}(\mu)}{\|u^{\mathrm{du}}(\mu) - u_N^{\mathrm{du}}(\mu)\|} \le \frac{\gamma_{UB}(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)} \le \frac{\bar{\gamma}}{\bar{\alpha}}$$

Beweis. Genauso wie für  $(P_N(\mu))$ .

Damit folgt gewünschte Schranke für Ausgabefehler:

Satz 3.62 (Primal-dualer Ausgabefehlerschätzer) Für alle  $\mu$  gilt

$$|s(\mu) - s'_N(\mu)| \le \Delta'_{N,s}(\mu) := \frac{\|r(\mu)\|_{X'} \cdot \|r^{\mathrm{du}}(\mu)\|_{X'}}{\alpha_{LB}(\mu)}$$

Beweis. Mit (3.26) folgt mit  $e := u - u_N$ ,  $e^{du} = u^{du} - u_N^{du}$ 

$$|s - s_N'| = |a(e, e^{\mathrm{du}})| = |r(e^{\mathrm{du}})| \le ||r||_{X'} \cdot ||e^{\mathrm{du}}|| \le ||r||_{X'} \Delta_N^{\mathrm{du}} = \frac{||r|| ||r^{\mathrm{du}}||}{\alpha_{LB}} = \Delta_{N,s}'$$

Bemerkung.
• Also "multiplikativer Effekt" in  $\Delta'_{N,s}$  erreicht.

- Dies liefert ein Kriterium zur Wahl von N,  $N^{\text{du}}$ : Wähle diese s.d.  $||r|| \approx ||r^{\text{du}}||$ , damit quadratischer Effekt auch numerisch realisiert wird.
- Man kann feststellen, dass ähnlich zu  $\Delta_{N,s}$  auch  $\Delta'_{N,s}$  ohne weitere Annahmen keine Effektivitätsschranke liefert:  $\Delta'_{N,s}$  kann ungleich 0 sein, während  $s-s'_N=0$ .

Wähle 
$$v_l \perp v_f \in X \setminus \{0\}, X_N = X_N^{\mathrm{du}} \perp \{v_f, v_l\}$$

$$a(u,v) := \langle u, v \rangle, \quad f(v) := \langle v_f, v \rangle, \quad l(v) := \langle v_l, v \rangle$$

$$\Rightarrow u = v_f, \ u^{\mathrm{du}} = -v_l, \ u_N = 0, \ u_N^{\mathrm{du}} = 0, \ e = v_f, \ e^{\mathrm{du}} = -v_l$$
$$\Rightarrow r \neq 0, \ r^{\mathrm{du}} \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta'_{N,s} \neq 0$$

aber 
$$s - s'_N = -a(e, e^{du}) = \langle v_f, v_l \rangle = 0.$$

• Erinnerung: Im Compliant Fall hatten wir definiert/gezeigt in 3.18

$$0 \le s - s_N \le \bar{\Delta}_{N,s}(\mu) := \frac{\|r\|^2}{\alpha_{LR}}$$

und Effektivitätsschranke erreicht.

• Im compliant Fall ist primal-dualer Ansatz überflüssig, denn für  $X_N = X_N^{\mathrm{du}}$ :

$$s'_N(\mu) = s_N(\mu)$$
 und  $\Delta'_{N,s}(\mu) = \bar{\Delta}_{N,s}(\mu)$ 

Mit l = f und Symmetrie folgt: a(v,u) = a(u,v) = f(v) = l(v)

$$\Rightarrow u = -u^{\mathrm{du}}$$
, analog  $u_N = -u_N^{\mathrm{du}}$ 

also 
$$r(v) = f(v) - a(u_N, v) = l(v) + a(u_N^{\mathrm{du}}, v) = l(v) + a(v, u_N^{\mathrm{du}}) = -r^{\mathrm{du}}(v)$$
  

$$\Rightarrow ||r|| = ||r^{\mathrm{du}}|| \Rightarrow \Delta'_{N,s} = \bar{\Delta}_{N,s}$$

Weiter ist 
$$r(u_N^{du}) = -r(u_N) = 0 \implies s'_N = l(u_N) - r(u_N^{du}) = l(u_N) = s_N.$$

# Bemerkung (Basisgenerierung).

- Erste Möglichkeit: Separate Greedy-Verfahren für  $X_N$ ,  $X_N^{\text{du}}$  mit *identischem*  $\epsilon_{tol}$ , um quadratischen Effekt zu bewirken.
- Zweite Möglichkeit: Kombiniertes Greedy-Verfahren zur simultanen Erzeugung von  $X_N$ ,  $X_N^{\text{du}}$ , indem  $\Delta'_{N,s}$  als Fehlerschätzer gewählt wird und  $u(\mu^{(n)})$ ,  $u^{\text{du}}(\mu^{(n)})$  als Anreicherung in  $X_N$ ,  $X_N^{\text{du}}$  hinzugefügt werden.

**Bemerkung** (Offline-Online für  $s'_N$ ). Im Fall separierbarer Parameterabhängigkeit folgt Offline/Online für  $A_N$ ,  $f_N$ ,  $l_N$ ,  $\|r\|^2$ ,  $\|r^{\mathrm{du}}\|^2$  analog zu §3.3. Zerlegung für Korrekturterm in  $s'_N(\mu)$  ergibt sich ähnlich aus  $u^{\mathrm{du}}_N = \sum u^{\mathrm{du}}_{N,n} \varphi^{\mathrm{du}}_n$  mit dualer Basis  $\Phi^{\mathrm{du}} = \sum u^{\mathrm{du}}_{N,n} \varphi^{\mathrm{du}}_n$ 

$$\left\{\varphi_1^{\mathrm{du}},\ldots,\varphi_{N^{\mathrm{du}}}^{\mathrm{du}}\right\},\,\underline{u}_N^{\mathrm{du}}=\left(u_{N,n}^{\mathrm{du}}\right)_{n=1}^{N^{\mathrm{du}}}$$

$$r(u_N^{\mathrm{du}}) = \sum_{q=1}^{Q_r} \Theta_r^q(\mu) r^q(u_N^{\mathrm{du}}) = \sum_{q=1}^{Q_r} \sum_{n=1}^{N^{\mathrm{du}}} \Theta_r^q(\mu) \, u_{N,n}^{\mathrm{du}}(\mu) \underbrace{r^q(\varphi_n^{\mathrm{du}})}_{\langle v_r^q, \varphi_n^{\mathrm{du}} \rangle}$$

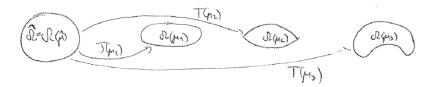
 $\Rightarrow$  Offline:  $G_{r,\mathrm{du}} := (\langle v_r^q, \varphi_n^{\mathrm{du}} \rangle)_{q=1,n=1}^{Q_r,N^{\mathrm{du}}}$ Online:  $r(u_N^{\mathrm{du}}) = \Theta_r^q(u)^T G_{r,\mathrm{du}} \underline{u}_N$ 

## 3.6 Geometrieparametrisierung

# Motivation

- Neben Koeffizientenfunktionen in elliptischen PDEs oder Randwerten können auch Geometrieparametrisierungen behandelt werden.
- Hohe Anwendungsrelevanz: Beispiel Fahrzeugkarosserie oder Flügelprofil zur Optimierung des Widerstandsbeiwerts.
- Problem: Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  sei Gebiet  $\Omega(\mu) \in \mathbb{R}^d$  und Lösungsraum  $X(\mu) := H_0^1(\Omega(\mu))$  parameterabhängig. Löse  $(P(\mu))$  nach  $u(\mu) \in X(\mu)$ .

- Hindernis: Snapshots  $u(\mu)$  lassen sich nicht linear kombinieren, Konstruktion eines  $X_N$  unklar.
- Idee/Lösung: Wahl eines Referenzparameter  $\hat{\mu} \in \mathcal{P}$ , Referenzgeometrie  $\hat{\Omega} := \Omega(\hat{\mu})$  und  $T(\mu) : \hat{\Omega} \to \Omega(\mu)$  invertierbare Abbildung. ("Geometrieabbildung", "Referenzabbildung")



• Mittels  $T(\mu)$  oder  $T^{-1}(\mu)$  sind Lösungen vergleichbar:

$$x \in \Omega(\mu) \quad \Leftrightarrow \quad T^{-1}(x;\mu) =: \hat{x} \in \hat{\Omega}$$

Falls T geeignete Regularität, so ist für u:

$$\hat{u}(\hat{x};\mu) := u(T(\hat{x};\mu);\mu) \quad \Rightarrow \quad \hat{u}(\cdot;\mu) \in X(\hat{\mu})$$

- Definiere  $\hat{X} := X(\hat{\mu})$ , zu  $\mu \in \mathcal{P}$  suche  $\hat{u}(\mu) \in \hat{X}$  als Lösung eines geeigneten  $(\hat{P}(\mu))$ , dann  $u(x;\mu) := \hat{u}(T^{-1}(x;\mu);\mu)$  Lösung von  $(P(\mu))$ .
- Damit ist RB-Behandlung klar. Suche  $\hat{X}_N \subset \hat{X}$  und RB-Lösung  $\hat{u}_N(\mu) \in \hat{X}_N$  wie in §3.1-3.5. Dann ist  $u_N(x;\mu) := \hat{u}_N(T^{-1}(x;\mu);\mu) \approx u(\mu)$ .

**Referenz:** [RHP08]: Rozza, Huynh, Patera: Reduced Basis Approximation and A Posteriori Error Estimation for Affinely Parametrized Elliptic Coercive Partial Differential Equations - Application to Transport and Continuum Mechanics, Archives of Computational Methods in Engineering, 15(3): 229-275, 2008.

**Definition 3.63** (Stückweise affine Geometrie transformation) Sei  $\Omega(\mu) \subseteq \mathbb{R}^d$  parameterabhängiges Gebiet mit Partition  $\{\Omega_k(\mu)\}_{k=1}^K$ , d.h.:

$$\Omega_k(\mu) \cap \Omega_{k'}(\mu) = \emptyset \text{ für } k = k', \quad \text{und} \quad \overline{\Omega(\mu)} = \bigcup_{k=1}^K \overline{\Omega_k(\mu)}$$

Wähle  $\hat{\mu} \in \mathcal{P}$  und  $\hat{\Omega} := \Omega(\hat{\mu}), \ \hat{\Omega}_k := \Omega_k(\hat{\mu})$ . Wir nennen  $T(\mu) : \hat{\Omega} \to \Omega(\mu)$  stückweise affine Geometrietransformation falls ex.  $T_k(\mu) : \hat{\Omega}_k \to \Omega_k(\mu)$  affin und bijektiv, d.h.

$$T_k(\hat{x}; \mu) := M_k(\mu) \cdot \hat{x} + t_k(\mu), \quad M_k(\mu) \in \mathbb{R}^{d \times d} \text{ regulär}, t_k(\mu) \in \mathbb{R}^d$$

und T ist stückweise durch  $\{T_k\}$  definiert via  $T(\mu)|_{\hat{\Omega}_k} = T_k(\mu)$  und ist für jedes  $\mu$  stetig auf  $\bigcup_{k=1}^K \partial \hat{\Omega}_k$  fortsetzbar, d.h.

$$T_k(\hat{x}; \mu) = T_{k'}(\hat{x}; \mu) \quad \forall \hat{x} \in \partial \hat{\Omega}_k \cap \partial \hat{\Omega}_{k'}$$

# Bemerkung.

- Insbesondere also  $T(\mu) \in C(\hat{\Omega}, \Omega(\mu))$ , also stetig bzgl. x (nicht notwendig bzgl.  $\mu$ ).
- Unter  $T_k$  für  $\hat{\Omega}_k \subseteq \mathbb{R}^2$  ist Bild von Dreieck ein Dreieck, entsprechend Formerhaltung von n-Eck, Parallelogramm, Ellipsen. In höheren Dimensionen analog für Simplex, Parallelepiped, Ellipsoid.
- Als  $\hat{\Omega}_k \subseteq \mathbb{R}^2$  werden meist Dreiecke, Rechtecke, Parallelogramme oder allgemeiner "elliptic triangles" oder "curvy triangles".



- Um  $T_k$  zu bestimmen, reicht es, in  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$  3 korrespondierende nicht ko-lineare Punkte zu kennen (3×2 Gleichungen für 4+2 Unbekannte), in  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  entsprechend 4 nicht ko-planare Punkte (4×3 Gleichungen für 9+3 Unbekannte)
- Wir nennen  $\{\hat{\Omega}_k\}_{k=1}^K$  auch "Makro-Gitter" der Geometrieparametrisierung. Typischerweise wird FEM-Gitter eine Verfeinerung dieses Gitters sein.
- Stückweise affine Geometrieparametrisierungen sind kompatibel mit Sobolev/FEM-Lösungsraum:

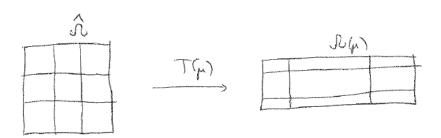
$$\hat{u} \in H_0^1(\hat{\Omega}) \quad \Leftrightarrow \quad u := \hat{u} \circ T^{-1}(\mu) \in H_0^1(\Omega(\mu))$$

Falls  $\mathcal{T}_h$  das aus  $\hat{\mathcal{T}}_h$  mit  $T(\mu)$  transformierte Gitter ist, gilt

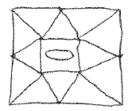
$$\hat{u}_h \in \mathbb{P}_{m,0}(\hat{\mathcal{T}}_h) \quad \Leftrightarrow \quad u_h := \hat{u}_h \circ T^{-1}(\mu) \in \mathbb{P}_{m,0}(\mathcal{T}_h)$$

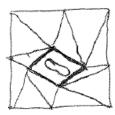
weil Polynome von Grad m unter affinen Abbildungen wieder Polynome von Grad m ergeben.

### Beispiele



i) Falls  $\hat{\Omega}$ ,  $\Omega(\mu)$ ,  $\Omega_k$  Rechtecke sind, so sind auch  $\Omega_k(\mu)$  notwendig Rechtecke, denn für  $T_k$  nur achsenparallele Streckung möglich (keine Rotation oder Scherung des mittleren Quadrates).



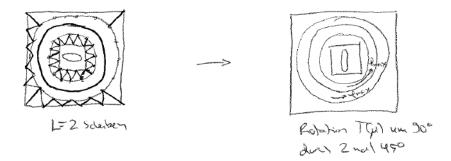


- ii) Durch Dreiecke sind auch Rotationen / Scherungen des mittleren Quadrats möglich. Man wird meist  $T(\mu)$  auch stetig bzgl.  $\mu$  wählen, z.B.  $\mu = Punktkoordinate$ , Verschiebungsparameter, Rotationswinkel oder Skalierungsfaktor, etc. Das mögliche Intervall für Rotationswinkel des mittleren Quadrats ist durch Regularitätsanforderung der  $M_k$  (Nichtdegenerieren der  $\Omega_k$ ) beschränkt, z.B. hier keine Drehung um 90° möglich, weil "mittlere" Dreiecke an jeder Kante degenerieren.
- iii) Durch genügend feines Makro-Gitter und Verwendung von Zwischenschichten kann Rotationswinkel beliebig vergrößert werden:

Kreisring mit Radien  $r_2 < r_1$ 



 $T(\mu)$  Rotation des inneren Kreises um Winkel  $\mu \in (-\varphi_{min}, + \varphi_{max})$  mit  $\varphi_{max} = \varphi_{max}(\frac{r_1}{r_2})$  realisierbar, analog  $\varphi_{min}(\frac{r_1}{r_2})$ . Durch genügend viele Punkte auf beiden Kreisen ist stückweise affine Geometrieparametrisierung definierbar, welche Makro-Dreiecksgitter regulär transformiert. Bei Verwendung von L solcher Ringe ist also insgesamt Rotation um  $\mu \in (-L\varphi_{min}, + L\varphi_{max})$  für inneres n-Eck realisierbar. Durch konforme Fortsetzung der Triangulierung der Scheiben auf Innen- & Außengebiet ist somit beliebige Rotation in Beispiel ii) möglich.



### Transformation auf Referenzgebiet

• Sei allgemeine elliptische PDE zweiter Ordnung gegeben. Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  suche  $u: \Omega(\mu) \to \mathbb{R}$  als Lösung von

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (A(\mu)\nabla u) + \nabla \cdot (b(\mu)u) + c(\mu)u &= q(\mu) & \text{auf } \Omega(\mu) \\ u &= 0 & \text{auf } \partial \Omega(\mu) \end{aligned}$$

• Schwache Form: Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  such  $u \in H_0^1(\Omega(\mu))$  sodass

$$\int_{\Omega(\mu)} (A(\mu)\nabla u) \cdot \nabla v - u(b(\mu) \cdot v) + c(\mu)uv = \int_{\Omega} qv \quad \forall v \in H_0^1(\Omega(\mu))$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\int_{\Omega(\mu)} (\nabla u^T, u) \underbrace{\begin{pmatrix} A(\mu) & 0 \\ b(\mu)^T & c \end{pmatrix}}_{B(\mu)} \begin{pmatrix} \nabla v \\ v \end{pmatrix}}_{(b(\mu)^T)} = \underbrace{\int_{\Omega} qv}_{f(v;\mu)} \quad \forall v \in H_0^1(\Omega(\mu))$$

- Dies ist Instanz von  $(P(\mu))$  wenn noch beliebiges Ausgabefunktional gewählt wird. Wir ignorieren die Ausgabe hier.
- Unter geeigneten Bedinungen an  $B(\mu)$  ist  $(P(\mu))$  koerzives Problem mit stetiger Linear-/Bilinearform auf  $X(\mu)$ . (siehe NumPDE 14/15)
- Transformation der Gradienten auf  $\Omega_k$ : Sei  $\hat{u}(\hat{x}) \in H_0^1(\hat{\Omega}), u(x) := \hat{u}(T^{-1}(x;\mu)), x \in \Omega_k$

$$\Rightarrow \nabla_x u(x) = (\mathbf{D}_x u)^T = (\mathbf{D}_{\hat{x}} \hat{u}(T^{-1}(x; \mu)) \cdot \mathbf{D}_x T^{-1}(x; \mu))^T$$
$$= (\nabla_x \hat{u}(\underbrace{T^{-1}(x; \mu)}_{\hat{x}})^T \cdot M_k^{-1})^T = M_k^{-T} \cdot \nabla_{\hat{x}} \hat{u}(\hat{x})$$

• Transformation der Bilinearform-Komponenten:

Mit  $v := \hat{v} \circ T^{-1}$ 

$$\int_{\Omega_k} (\nabla u^T, u) B(\mu) \begin{pmatrix} \nabla v \\ v \end{pmatrix} dx$$

$$= \int_{\hat{\Omega}_k} (\nabla_{\hat{x}} \hat{u}^T, \hat{u}) \begin{pmatrix} M_k^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} B(\mu) \begin{pmatrix} M_k^{-T} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_{\hat{x}} \hat{v} \\ \hat{v} \end{pmatrix} |\det M_k| d\hat{x}$$

analog Linearform.

**Satz 3.64** (Transformation auf Referenzgebiet,  $(\hat{P}(\mu))$ ) Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  löst  $u(\mu) \in X(\mu)$  das Problem  $a(u(\mu), v; \mu) = f(v; \mu), \forall v \in X(\mu)$  mit

$$a(u,v;\mu) = \sum_{k=1}^{K} \int_{\Omega_k(\mu)} (\nabla u^T, u) B(\mu) \begin{pmatrix} \nabla v \\ v \end{pmatrix}, \quad f(v;\mu) = \sum_{k=1}^{K} \int_{\Omega_k(\mu)} q(\mu) v$$

genau dann, wenn  $\hat{u}(\hat{x};\mu) := u(T(\hat{x};\mu);\mu)$  löst

$$\hat{a}(\hat{u}(\mu), \hat{v}; \mu) = \sum_{k=1}^K \int_{\hat{\Omega}_k} (\nabla \hat{u}^T, \hat{u}) \hat{B}^k(\mu) \begin{pmatrix} \nabla \hat{v} \\ \hat{v} \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^K \int_{\Omega_k} \hat{q}^k(\mu) \hat{v} =: \hat{f}(\hat{v}; \mu) \quad \forall \hat{v} \in \hat{X}$$

mit

$$\hat{B}^k(\mu) = \begin{pmatrix} M_k(\mu)^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} B(\mu) \begin{pmatrix} M_k(\mu)^{-T} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} |\det M_k|$$

und

$$\hat{q}^k(\mu) := q(\mu) \cdot |\det M_k(\mu)|$$

Bemerkung (Separierbare Parameterabhängigkeit).

- Durch Vorgabe von  $M_k(\mu) \in \mathbb{R}^{d \times d}$  ist also  $M_k^{-1}(\mu) \in \mathbb{R}^{d \times d}$  explizit bekannt, ebenso  $|\det M_k(\mu)|$ , also die Matrixeinträge/Determinante als Koeffizientenfunktion verwendbar.
- Mit  $B(\mu)$  separierbar parametrisch ist also auch  $\hat{B}^k(\mu)$  separierbar parametrisch mit  $Q_{\hat{B}} \leq (d^2+1)Q_B$ , mit  $q(\mu)$  separierbar parametrisch ist auch  $\hat{q}^k(\mu)$  separierbar parametrisch mit  $Q_{\hat{q}} = Q_q$ .
- Durch Ausmult, ist auch  $\hat{a}$  separierbar parametrisch

$$\left( \hat{a}^q(\hat{u}, \hat{v}) \right)_{q=1}^{Q_{\hat{a}}} := \left( \int\limits_{\hat{\Omega_1}} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} \hat{u} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} \hat{v} \cdot \hat{B}_{11}^{1,1}, \dots, \int\limits_{\hat{\Omega_1}} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} \hat{u} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} \hat{v} \cdot \hat{B}_{11}^{1,q_{\hat{B}}}, \dots, \int\limits_{\hat{\Omega_k}} \hat{u} \hat{v} \cdot \hat{B}_{(d+1),(d+1)}^{K,Q_{\hat{B}}} \right)$$

mit  $Q_{\hat{a}} = (d+1)^2 K \cdot Q_{\hat{B}}$  und entsprechenden Koeff.  $(\Theta_{\hat{a}}^q)_{q=1}^{Q_{\hat{a}}}$ , die sich aus  $M_k(\mu)$ ,  $\Theta_{B_ij^k}^q(\mu)$ , etc. ergeben.

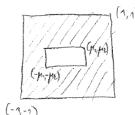
•  $Q_{\hat{a}}$  kann sehr groß sein. Diese Anzahl kann reduziert werden, falls es Koeff.  $\Theta_{\hat{a}}^q(\mu)$  gibt, die

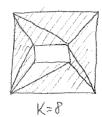
- Null sind, z. B. bei eingeschränkten Transformationen (nur Skalierung, nur Translation)  $\Rightarrow (M_k)_{1,2} = (M_k)_{2,1} = 0$
- linear abhängig sind. Falls z. B.  $\Theta_{\hat{a}}^{q}(\mu) = C \cdot \Theta_{\hat{a}}^{q'}(\mu)$

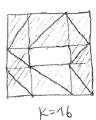
$$\Rightarrow \Theta_{\hat{a}}^{q}(\mu)\hat{a}^{q}(\,\cdot\,,\cdot\,) + \Theta_{\hat{a}}^{q'}(\mu)\hat{a}^{q'}(\,\cdot\,,\cdot\,) = \underbrace{\Theta_{\hat{a}}^{q'}(\mu)}_{\rightarrow 1 \text{ Komponente statt 2}} (C\hat{a}^{q}(\,\cdot\,,\cdot\,) + \hat{a}^{q'}(\,\cdot\,,\cdot\,))$$

also  $Q_{\hat{a}}$  reduziert.

- "Zusammenfassen" von linear abh. Termen kann automatisiert werden durch symbolische Arithmetik  $\leadsto$  rbMIT Software-Paket
- Für mögl. kleines  $Q_{\hat{a}}$  ist nicht unbedingt kleines K sinnvoll, sondern möglichst identisch transformierte Teilgebiete.







• K = 16 Zerlegung führt auf kleineres  $Q_{\hat{a}}$  als K = 8 Zerlegung.

**Bemerkung** (Inhomogene Neumann-Randbedingung). (bzw. ähnliche Argumentation bei Fluss-Kurven-Integralen als Ausgabe)

Sei  $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$  mit  $\Gamma_N \neq \emptyset$  Neumann Rand,  $g_N : \Gamma_N \to \mathbb{R}$  Neumann RW. Für  $v \in H^1_{\Gamma_D}(\Omega(\mu))$  lautet  $(P(\mu))$  rechts:

$$f(v;\mu) = \int_{\Gamma_N} g_N v$$

Ein Fluss-Kurvenintegral als Ausgabe z. B.

$$l(v; \mu) = \int_{\Gamma_N} (A(\mu)\Delta v) \cdot n$$

- Für Transformation dieser Integrale ist Rand-Geom. abb  $T_{\Gamma}: \hat{\Gamma_N} \to \Gamma_N(\mu)$  und entsprechende Jacobi-Matrix/Determinante
- Problem besteht, falls  $\Gamma_N$  gekrümmt
  - $\Rightarrow n = n(x; \mu)$  ortsabhängig.
  - $\Rightarrow$  Randintegralterm trotz separierbarem  $A(\mu)$  eventuell nicht mehr separierbar parametrisch. Explizite Referenzabbildung notwendig und "hochdimensional". Auswertung des Integrals, d. h. ohne Offline-Online-Zerlegung.

# Bemerkung (Fehlermaße).

- Im Raum  $\hat{X} = X(\hat{\mu})$  hat Norm  $||(\hat{u}(\mu)||_{H^1(\hat{\Omega})}$  keine physikalische Bedeutung für Funktionen  $u(x;\mu) := \hat{u}T^{-1}(x;\mu);\mu$ ), kann sich wesentlich von von  $||u(\mu)||_{H^1(\Omega(\mu))}$  unterscheiden.
- Die Energie(norm?) ist plausibler, kann jedoch bei starken Größenvariationen von  $\Omega(\mu)$  unterschiedliche Größenordnungen annehmen.
- Im Greedy-Verfahren macht relativer Energienorm-Fehler/-Schätzer Sinn, da dieser Größenvariationen von  $\Omega(\mu)$  ausgleicht.

#### Bemerkung (Weitere Möglichkeiten der Geometrieparametrisierung).

- In der Literatur existieren weitere Methoden, anstelle der stückweise affinen Geometrieparametrisierung: z. B. "Free-Form-Deformation" (Gitterförmig angeordnete Kontrollpunkte für Interpolation mit Bernstein-Polynomen), "Radiale Basisfunktionen Interpolation" (beliebige Platzierung von wenigen Kontrollpunkten und RBF Interpolation der Koordinatenfunktionen), 'Transfinite Mapping"
- Diese AAnsätze führen meist auf nicht-separierbare Parameterabhängigkeit in  $(\hat{P}(\mu))$ . Mit Techniken aus § 4 (z. B. "empirische Interpolationen") sind approx. separierbare Darstellungen konstruierbar.

# 4 Allgemeinere Lineare Probleme

# 4.1 Allgemeine Parameterabhängigkeit

Es folgt zunächst eine allgemeine Approximationsmethode für parametrische Funktionen, welche anschließend für RB-Behandlung von allgemeinen parametrisierten Problemen verwendet werden kann.

### Empirische Interpolation (EI)

#### Motivation

- § 3 zeigte Relevanz der separierbaren Parameterabhängigkeit für effiziente Offline/Online-Zerlegung und Glattheit der Lösung  $u(\mu)$  bzgl.  $\mu$ .
- Gesucht: Approximationsverfahren für parametrische Funktion

$$g: \Omega \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$$

der Form

$$g(x;\mu) \approx I_{\mu}(g(\cdot;\mu))(x) = \sum_{m=1}^{M} \Theta_g^m(\mu)g^m(x)$$

mit skalaren Funktionen  $\Theta_g^m(\mu)$  und "kollaterale reduzierter Basis"  $Q_\mu = \{g^m\}_{m=1}^M$ 

- Statt allg. approx. Räume (z. B. FEM-Räume, zu hohe Dimension) oder Taylor-Ansatz (nur lokale Approx.) wird wieder Snapshot-basierter Ansatz gewählt, d. h.  $Q_M \subset \operatorname{span}\{g(\cdot,\mu)|_{\mu \in S_{train} \subset \mathcal{P}}\}$
- Die empirische Interpolation ist eine Mögllichkeit. Details finden sich in

BMNP04 Barrault, Maday, Nguyen, Patera: An 'empirical interpolation' method: application to efficient reduced-basis discretization of partial differential equations

MNPP07 Maday, Nguyen, Patera, Pau: A general, multipurpose interpolation procedure: the magic points

#### **Definition 4.1** (Empirische Interpolation)

Sei  $G \subset C^0(\bar{\Omega},\mathbb{R})$  Menge von zu interpolierenden Funktionen. Für  $\mu \in \mathbb{N}$ ,  $M \leq \dim(\operatorname{span}(G))$  definiere rekursiv Interpolationspunktemenge  $T_{\mu} \subset \bar{\Omega}$  und die kollaterale Basis  $Q_{\mu} \subset \operatorname{span}(G)$ 

$$M = 1 : \tilde{q}_1 := \operatorname{argmax}_{g \in G} ||g||_{\infty}$$

$$x_1 := \operatorname{argmax}_{x \in \bar{\Omega}} |\tilde{q}_1(x)|$$

$$T_1 := \{x_1\}$$

$$q_1 := \frac{\tilde{q}_1}{\tilde{q}_1(x_1)}$$

$$Q_1 := \{q_1\}$$

$$\begin{split} M > 1 : \tilde{q}_M := & \operatorname{argmax}_{g \in G} ||g - I_{M-1}(g)||_{\infty} \\ r_M := & \tilde{q}_M - I_{M-1} \tilde{q}_M \\ x_M := & \operatorname{argmax}_{x \in \bar{\Omega}} |r_M(x)| \\ T_M := & T_{M-1} \cup \{x_M\} \\ q_M := & \frac{r_M}{r_M(x_\mu)} \\ Q_M := & Q_{M-1} \cup \{q_M\} \end{split}$$

wobei  $I_M: C^0(\bar{\Omega}, \mathbb{R}) \to \operatorname{span}(Q_\mu)$  den Interpolationsparameter zu Punkten  $T_M$  bezeichnet, d. h.  $I_M(g)(x_i) = g(x_i) \ \forall \ g \in C^0(\bar{\Omega}, \mathbb{R}), \ i = 1, \dots, M.$ 

#### Bemerkung.

- In der Praxis werden obige Optimierungsprobleme zur Bestimmung von  $\tilde{q}_m$ ,  $x_m$  durch einfache lineare Suche realisiert, indem endliche  $\bar{\Omega}$  und G betrachtet werden.
- Es sind Mehrdeutigkeiten von  $\tilde{q}_m$  und  $x_m$  möglich, welche durch Aufzählung der Mengen und "Wahl des ersten Auftretens" eindeutig werden.
- Die Basis  $Q_M$  ist weder orthogonal noch nodal, aber hierarchisch, d. h.  $Q_{M-1} \subseteq Q_M$ .

#### Bemerkung.

•  $Q_M$  sind beschränkt

$$1 = q_m(x_m) = ||q_m||_{\infty}$$

Für analytische Untersuchungen wird später die nodale Basis  $\zeta_M \subset \text{span}(Q_M)$  zu Knoten  $T_M$  betrachtet, welche jedoch nicht mehr hierarchisch sind, d. h.  $\zeta_{M-1} \not\subseteq \zeta_M$ 

• Die Erzeugung von  $Q_M$  und  $T_M$  kann als Greedy-Minimierungsstrategie für

$$\min_{\substack{X_M\subset \mathrm{span}(G)\\\dim(X_M)=M\\T_M\subset \bar{\Omega}\\|T_M|=M}}\max_{g\in G}||g-I_M(g)||_{\infty} \text{ interpretiert werden.}$$

Es kann jedoch kein monotoner Fehlerabfall garantiert werden.

#### Satz 4.2 (Berechnung der Interpolation)

Seien  $T_M = \{x_1, \dots, x_M\}$  und  $Q_M = \{q_1, \dots, q_M\}$  gemäß Def. 4.1 gegeben. Dann ist die Matrix  $\underline{Q}_M := (\underline{q}_j(x_i))_{i,j=1}^M \in \mathbb{R}^{M \times M}$  eine untere Dreiecksmatrix mit 1-Diagonale, also regulär. Sei  $g \in C^0(\bar{\Omega}, \mathbb{R}), \underline{g}_M = (g(x_i))_{i=1}^M \in \mathbb{R}^M, \underline{\alpha}_M := (\alpha_i)_{i=1}^M \in \mathbb{R}^M$  Lösung von

$$\underline{Q}_M \underline{\alpha}_M = \underline{g}_M$$

Dann ist die Interpolierte von g gerade

$$I_M(g) = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \underline{q}_i \tag{4.1}$$

Beweis. Seien  $i, j = 1, \dots, M$ 

$$i = j : (\underline{Q}_M)_{ii} = \underline{q}_i(x_i) = \frac{r_i(x_i)}{r_i(x_i)} = 1$$

$$j > i : (\underline{Q}_M)_{ij} = \underline{q}_j(x_i) = \frac{r_j(x_i)}{r_i(x_j)} = 0$$

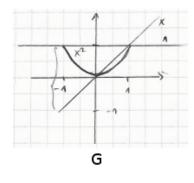
weil  $r_j(x_i) = \underline{\tilde{q}}^{(x_i)} - I_{j-1}(\underline{\tilde{q}}_j)(x_i) = 0$  da  $I_{j-1}$  Interpolierende zu  $T_{j-1}$  und  $x_i \in T_{j-1}$ .

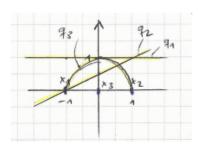
Also  $\underline{Q}_M$  untere Dreiecksmatrix mit 1-Diagonale.

Für 4.1 zeige Übereinstimmung von beiden Seiten in allen Interpolationspunkten  $T_M$ : Für i = 1, ..., M ist

$$\sum_{j=1}^{M} \alpha_j \underline{q}_j(x_i) = \sum_{j=1}^{M} \alpha_j (\underline{Q}_M)_{ij} = (\underline{Q}_M \underline{\alpha}_M)_i = (g_M)_i = g(x_i) = I_M(g)(x_i)$$

Beispiel (EI für Polynome) Sie  $G = \{1, x, x^2\}$  Monome auf  $\bar{\Omega} = [-1, 1]$ .





 $Q_M$ 

Dann ist

$$\underline{\tilde{q}}_1 := \mathrm{argmax}_{g \in G} \, ||g||_{\infty}$$
beliebig, z. B.  $\underline{\tilde{q}}_1(x) = 1$ 

und

$$x_1 = \operatorname{argmax}_{x \in [-1,1]} |\underline{\tilde{q}}_1(x)$$
beliebig, z. B.  $x_1 = -1$ 

somit ergibt sich

$$\underline{q}_1(x) = \frac{\underline{\tilde{q}}_1(x)}{\underline{\tilde{q}}_1(x_1)} = 1$$

Dann ist

$$\begin{split} \underline{\tilde{q}}_2 := \mathrm{argmax}_{g \in G} ||g - I_1(g)||_{\infty} = x, \\ r_2 = \underline{\tilde{q}}_2 - I_1(\underline{\tilde{q}}_2) = x + 1, \end{split}$$

$$x_2 := \operatorname{argmax}_{x \in [-1,1]} |r_2(x)| = 1 \text{ und}$$
 
$$\underline{q}_2(x) = \frac{r_2(x)}{r_2(x_2)} = \frac{1}{2}(x+1)$$

schließlich

$$\begin{split} \underline{\tilde{q}}_3 &:= \mathrm{argmax}_{g \in G} \, ||g - I_2(g)||_\infty = x^2 \\ r_3 &= x^2 - 1 \;\;, \;\; x_3 := \mathrm{argmax}_{x \in [-1,1]} \, |r_3(x)| = 0 \\ \\ \underline{q}_3(x) &= \frac{r_3(x)}{r_3(x_3)} = 1 - x^2 \end{split}$$

i	$x^i$	$  x  _{\infty}$	$  x^i - I_1(x^i)  _{\infty}$	$  x^i - I_2(x^i)  _{\infty}$
0	1	1	$  1-1  _{\infty}=0$	0
1	$\boldsymbol{x}$	1	$  x - (-1)  _{\infty} = 2$	0
2	$x^2$	1	$  x^2 - 1  _{\infty} = 1$	$  x^2 - 1  _{\infty} = 1$

Numerisches Beispiel demos\_chapter4(1)

$$G = \{x^i\}_{i=0}^{29}$$

- $\Rightarrow$  alle  $q_i$  beschränkt,  $||q_i||_{\infty} = 1$
- Fehler fällt nicht monoton
- $\cos^{-1}(T_M)$  ist etwa äquidistant,  $T_M$  approximieren also qualitativ die Tschebyscheff-Knoten, die für polynomiale Interpolation als beste Wahl bekannt sind  $\Rightarrow T_M$  sind sogennante "Magic Points" weil sie "auf magische Weise" wichtige Bereiche von  $\Omega$ identifizieren.

Eigenschafen der EI Wir untersuchen zunächst Stabilität der Interpolation. Dies geschieht durch Untersuchung der Lebesgue-Konstante (siehe Numerik I).

Satz 4.3 (Lebesgue-Konstante)

Sie  $I_M: C^0(\Omega, \mathbb{R}) \to X_M:= \operatorname{span}(\zeta_i)_{i=1}^M \in C^0(\bar{\Omega}, \mathbb{R})$  Interpolationsoperator zu den Punkten  $\{x_i\}_{i=1}^M$  und  $\{\zeta\}_{i=1}^M$  nodal, d. h.  $\zeta_i(x_j) = \delta_{ij}$ ,  $I_M(u) = \sum_{i=1}^M \zeta_i(x_i)$ . Dann ist

$$\Lambda_M := \max_{x \in \bar{\Omega}} \sum_{i=1}^M |\zeta_i(x)|$$

die Lebesgue-Konstante der Interpolation.

i) Es gilt

$$||u - I_M(u)||_{\infty} \le (1 + \Lambda_M) \inf_{v \in X_M} ||u - v||_{\infty}$$

$$\forall u \in C^0(\bar{\Omega}, \mathbb{R})$$

ii) Für EI gilt

$$\Lambda_M \le 2^M - 1$$

Beweis. i) Sei  $u \in C^0(\bar{\Omega}, \mathbb{R}), x \in \bar{\Omega} \text{ und } v = \sum a_i \zeta_i \in X_M.$ 

Dann ist

$$|u(x) - I_{M}(u)(x)| = |u(x) - \sum_{i=1}^{M} a_{i}\zeta_{i}(x) + \sum_{i=1}^{M} a_{i}\zeta_{i}(x) - \sum_{i=1}^{M} u(x_{i})\zeta_{i}(x) |$$

$$\leq |u(x) - v(x)| + |\sum_{i=1}^{M} \zeta_{i}(x) \cdot (a_{i} - u(x_{i}))| \qquad (4.2')$$

Für letzten Term gilt wegen  $\{\zeta_i\}$  nodal

$$|\sum_{i=1}^{M} \zeta_i(x) \cdot (a_i - u(x_i))| = |\sum_{i=1}^{M} \zeta_i(x) \cdot ((\sum_{j=1}^{M} a_j \zeta_j(x_i)) - u(x_i))|$$

$$\leq \sum_{i=1}^{M} |\zeta_i(x)| |v(x_i) - u(x_i)|$$

$$\leq (\max_x \sum_{i=1}^{M} |\zeta_i(x)|) \cdot ||u - v||_{\infty}$$

Also für (??):

$$||u - I_M(u)||_{\infty} \le ||u - v||_{\infty} + \Lambda_M ||u - v||_{\infty} = (1 + \Lambda_M)||u - v||_{\infty}$$

nach Infimum über  $v \in X_M$  folgt Behauptung.

ii)  $\rightarrow$  Übung.

Bemerkung.

- Obige Abschätzung für  $\Lambda_M$  ist sehr pessimistisch, in der Praxis meist bessere Raten/Lebesgue-Konstanten (langsameres Wachstum), jedoch ist die Schranke scharf, d. h. es ex. Beispiele mit  $\Lambda_M = 2^M 1$ .
- Für gewisse Mengen G ist sogar exponentielle Konvergenz des Interpolationsfehleres beweisbar, wie in folgendem Satz. Dort auftretende Forderung ist "Beschränktheit durch Müslipackung", d. h. Polytop mit exponentiell abfallenden Seitenlängen.

#### Satz 4.4 (Exponentielle Konvergenz der EI)

Falls es Sequenz von exponentiell approx. Unterräumen gibt, d.h.  $Z_1 \subset Z_2 \subset \cdots \subset$  $Z_M \cdots \subset \operatorname{span}(G), \dim Z_M = M \text{ und ex. } c > 0, \alpha > \log 4 \text{ so dass } \inf_{v \in Z_M} ||u - v|| \leq 1$  $c\cdot e^{-\alpha M}\ \forall\,u\in G,M\in\mathbb{N},$ dann findet der EI-Basiskonstruktionsprozess "fast so gute Räume" indem

$$||u - I_M(u)|| \le c \cdot e^{-(\alpha - \log 4)M}$$
.

Beweis. siehe MNPP07 

Neben solchen a priori-Aussagen ist auch a posteriori-Fehlerkontrolle möglich.

#### Satz 4.5 (A posteriori-Fehlerschätzer für EI)

Seien  $I_M, I_{M'}: C^0(\bar{\Omega}, \mathbb{R}) \to \operatorname{span}(G)$  EI-Operatoren für  $M' > M, Q_M \subset Q_{M'} =$ 

 $\{q_i\}_{i=1}^{M'}, T_M \subset T_{M'} = \{x_i\}_{i=1}^{M'}.$  Sei  $\underline{Q} := (\underline{q}_i(x_i))_{i,j=M+1}^{M'}$ . Für  $g \in G$  sei  $\underline{g} := (g(x_i)) - I_M(g)(x_i))_{i=M+1}^{M'}$  und  $\underline{\alpha}' := (\underline{q}_i(x_i))_{i,j=M+1}^{M'}$  $\{\alpha_i'\}_{i=M+1}^{M'} := \underline{Q}^{-1}\underline{g}'.$ 

Falls  $g \in \operatorname{span}(\overline{Q_{M'}})$ , so gelten folgende a posteriori-Fehlerschranken für den Interpolationsfehler:

$$||g - I_M(g)||_{\infty} \le \Delta_{M,M',\infty}(g) := ||\underline{\alpha}'||_1 = \sum_{i=M+1}^{M'} |\alpha_i'|$$
$$||g - I_M(g)||_{L^2} \le \Delta_{M,M',L^2}(g) := \sqrt{(\underline{\alpha}')^T K_Q \underline{\alpha}'}$$

mit 
$$K_Q := (\int_{\Omega} q_i q_j)_{i,j=M+1}^{M'}$$

Beweis. Nach Def. der EI gilt

$$I_M(g) = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \underline{q}_i , \ I_{M'}(g) = \sum_{i=1}^{M'} \alpha'_i \underline{q}_i$$

mit  $\underline{Q}_{M}\underline{\alpha}_{M} = \underline{g}_{M}$  und  $\underline{Q}_{M'}\underline{\alpha}_{M'} = \underline{g}_{M'}$  mit  $\underline{\alpha}_{M} = (\alpha_{i})_{i=1}^{M}, \underline{\alpha}_{M'} = (\alpha'_{i})_{i=1}^{M'}.$  Da  $\underline{Q}_{M}$  oberer linker Block von  $\underline{Q}_{M'}$  und  $\underline{Q}$  unterer rechter Block von  $\underline{Q}_{M'}$ , und jeweils untere Dreiecksmatrizen gilt  $\alpha_{i} = \alpha'_{i}, \ i = 1, \dots, M$  und  $g - I_{M}(g) = I_{M'}(g) - I_{M}(g) = I_{M'}(g)$  $\sum_{i=M+1}^{M'} \alpha_i' \underline{q}_i$ 

Für 
$$L^{\infty}$$
-Norm folgt  $||g-I_{M}(g)||_{\infty} \leq \sum_{i=M+1}^{M'} |\alpha_{i}'| \underbrace{||\underline{q}_{i}||_{\infty}} = ||\underline{\alpha}'||_{1}$ 

Für 
$$L^2$$
-Norm gilt  $||g - I_M(g)||_2 = \left(\sum_{i,j=M+1}^{M'} \alpha_i' \alpha_j' \int_{\bar{\Omega}} \underline{q}_i \underline{q}_j\right)^{\frac{1}{2}} = \Delta_{M,M',L^2}(g)$ 

Satz 4.6 (Erhaltungseigenschaft)

Sie  $f \in [C^0(\bar{\Omega}, \mathbb{R})]'$  und  $f(g) = 0 \ \forall g \in G$ .

Dann ist auch  $f(I_M(g)) = 0 \ \forall g \in G$ .

Beweis. wg. Linearität folgt  $f(\sum \beta_i g_i) = 0 \ \forall \beta_i \in \mathbb{R}, g_i \in G$ 

$$\Rightarrow f(g) = 0 \ \forall g \in \operatorname{span}(G)$$

Nach Konstruktion ist 
$$Q_M \subseteq \operatorname{span}(g)$$
, also  $f(\underline{q}_i) = 0, i = 1, \dots, M$ , also auch  $f(I_M(g)) = f(\sum \alpha_i q_i) = 0 \ \forall g \in G$ 

Bemerkung. Anschauliche Beispiele

- Falls  $g(\bar{x}) = 0 \ \forall g \in G \Rightarrow I_M(g)(\bar{x}) = 0 \ \text{via } f \equiv \text{Punktauswertung in } \bar{x}.$
- Falls  $g \in G$ haben Mittelwert 0, d. h.  $\int\limits_{\Omega} g(x) dx = 0 \; \forall \, g \in G$

$$\Rightarrow \int_{\Omega} I_M(g) = 0 \ \forall g \in G.$$

**Anwendung in RB-Methoden** Falls eine Koeffizientenfunktion nicht separierbar parametrisch ist, erzeuge mittels EI eine separierbar parametrische Approximation.

**Definition 4.7** (EI für Funktionale)

Sie  $f(v;\mu) = \int_{\Omega} g(x,\mu)v(x)dx$  parametrisch stetige Linearform,  $g(\cdot;\mu) \in C^0(\bar{\Omega},\mathbb{R})$ . Wähle  $S_{train} \subset \mathcal{P}$  endliche Teilmenge, setze  $G := \{g(\cdot;\mu)|\mu \in S_{train}\}$  Konstruiere EI-Basis  $Q_M = \{q^i\}_{i=1}^M$  und EI-Punkte  $T_M = \{x_i\}_{i=1}^M$  gemäß Definition 4.1. Dann ist  $g(x;\mu) \approx \sum_{m=1}^M \Theta^m(\mu)q^m(x)$  also

$$f(v;\mu) \approx \tilde{f}(v;\mu) := \sum_{m=1}^{M} \Theta^{m}(\mu) \underbrace{\int_{\Omega} q^{m}(x)v(x)dx}_{\tilde{f}^{m}(v)} =: \sum_{m=1}^{M} \Theta^{m}(\mu)\tilde{f}^{m}(v)$$

Mit Komponenten  $\{\tilde{f}^m\}_{m=1}^M$  und Koeffizienten  $(\Theta^1(\mu), \dots, \Theta^m(\mu))^T := \underline{Q}_M^{-1}\underline{g}(\mu)$ , wobei  $g\mu$ ) durch lokale Auswertungen definiert ist

$$g(\mu) = (g(x_1; \mu), \dots, g(x_M; \mu))^T$$

# Bemerkung.

- Analoge Vorgehensweise bei Ausgabefunktional oder Bilinearform möglich. Anschließend Offline/Online Zerlegung wie in §3 realisierbar.
- Fehlerschätzer aus §3 sind mit EI im Allgemeinen nicht rigoros, da der Interpolationsfehler zusätzlich berücksichtigt werden muss. Falls  $g(\cdot; \mu) \in \text{span}(Q_M)$  (starke Annahme) so sind Schätzer weiterhin rigoros.

• Falls Interpolatinosfehler  $\neq 0$ , aber Fehlerschätzer für EI vorhanden, so kann mittels eines Hilfsproblems (hochdimensionales interpoliertes Problem) ( $\tilde{\mathcal{P}}(\mu)$ ) Fehlerkontrolle für das interpolierte und reduzierte Problem realisiert werden. (wir ignorieren wieder Ausgabe im Folgenden).

**Definition 4.8** (Interpolierte Probleme  $(\tilde{P}(\mu)), (\tilde{P}_N(\mu))$ )

Sei eine Instanz von  $(P(\mu))$  gegeben mit  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  koerziv. Seien Approximationen  $\tilde{a}(\cdot,\cdot;\mu)$  und  $\tilde{f}(\cdot;\mu)$  bilinear/linear gegeben mit  $\tilde{a}, \tilde{f}$  separierbar parametrisch und

$$|a(u,v;\mu) - \tilde{a}(u,v;\mu)| \le \epsilon_a ||u|| ||v|| \qquad \forall u,v \in X, \mu \in \mathcal{P}$$
$$|f(v;\mu) - \tilde{f}(v;\mu)| \le \epsilon_f ||v|| \qquad \forall v \in X, \mu \in \mathcal{P}$$

mit möglichen kleinen Approximationsfehlern  $\epsilon_a, \, \epsilon_f \geq 0.$ 

Wir nennen  $\tilde{u}(\mu) \in X$  Lösung des vollen interpolierten Problems  $(\tilde{P}(\mu))$ 

$$\tilde{a}(\tilde{u}(\mu), v; \mu) = \tilde{f}(v; \mu) \quad \forall v \in X$$

und  $\tilde{u}_N \in X_N$  Lösung des reduzierten interpolierten Problems  $(\tilde{P}_N(\mu))$ 

$$\tilde{a}(\tilde{u}_N(\mu), v; \mu) = \tilde{f}(v; \mu) \quad \forall v \in X_N$$

für beliebige gewählten  $X_N \subset X$ .

**Bemerkung** (Beispiele für  $\epsilon_a$ ,  $\epsilon_f$ , aus EI). Sie  $X = H_0^1(\Omega)$  und  $f(v) = \int_{\Omega} q(x)v(x)dx$  mit  $q \in L^1(\Omega) \cap C^0(\Omega)$  und  $q_M$  EI von q, damit  $\tilde{f}(v) := \int_{\Omega} q_M(x)v(x)dx$ 

$$\Rightarrow |f(v) - \tilde{f}(v)| = |\int_{\Omega} (q(x) - q_M(x))v(x)dx| \overset{CS}{\leq} ||q - q_M||_{L^2} \underbrace{||v||_{L^2}}_{\leq ||v||_{H^1_0}} \overset{4.5}{\leq} \Delta_{\mu;\mu;2}(q)||v||$$

 $\Rightarrow \epsilon_f := \Delta_{\mu;\mu;2}(q)$  (bzw. Supremum über  $\mathcal{P}$  falls q parametrisch)

Sei z. B.  $a(u,v)=\int_{\Omega}\kappa(x;\mu)u(x)v(x)dx$  mit  $\kappa(x;\mu)\in C^0(\bar{\Omega})$  und  $\kappa_{\mu}$  EI von  $\kappa$ 

$$\begin{split} \tilde{a}(u,v) &= \int_{\Omega} \kappa_{\mu}(x;\mu) u(x) v(x) dx \\ \Rightarrow |a(u,v) - \tilde{a}(u,v)| &\leq ||\kappa - \kappa_{\mu}||_{\infty} \underbrace{|\int_{\Omega} u(x) v(x) dx|}_{\leq ||u||_{L^{2}} ||v||_{L^{2}}} \leq ||u||_{H^{1}_{0}} ||v||_{H^{1}_{0}} \Delta_{\mu;\mu;\infty}(\kappa) \\ \Rightarrow \epsilon_{a} := \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \Delta_{\mu;\mu;\infty}(\kappa(\,\cdot\,;\mu)) \end{split}$$

**Bemerkung** (Wohlgestelltheit von  $(\tilde{P}(\mu))$ ,  $(\tilde{P}_N(\mu))$ ). Falls  $\epsilon_a$ ,  $\epsilon_f$  genügend klein, sind  $\tilde{a}$ ,  $\tilde{f}$  stetig,  $\tilde{a}$  ist koerziv, damit ist  $(\tilde{P}(\mu))$  nach Lax-Milgram wohlgestellt (Existenz & Eindeutigkeit & Stabilität bzgl. rechter Seite). Genauer: Bei  $\epsilon_a$ ,  $\epsilon_f < \infty$  folgt Stetigkeit.

$$\begin{split} |\tilde{f}(v)| &\leq |\tilde{f}(v) - f(v)| + |f(v)| \leq \epsilon_f ||v|| + ||f|| \cdot ||v|| = (\epsilon_f + ||f||_{X'}) ||v|| \\ \Rightarrow &\tilde{f} \in X' \text{ mit } ||\tilde{f}|| \leq ||f|| + \epsilon_f \end{split}$$

Falls  $\epsilon_a < \alpha$  mit  $\alpha$  Koerzivitätskonstante von  $a(\cdot, \cdot)$ , so folgt

$$\frac{\tilde{a}(u,u)}{||u||^2} = \frac{a(u,u) - (a(u,u) - \tilde{a}(u,u))}{||u||^2} \ge \underbrace{\frac{a(u,u)}{||u||^2}}_{>\alpha} - \underbrace{\frac{|\tilde{a}(u,u)|}{||u||^2}}_{<\epsilon_a} \ge \alpha - \epsilon_a > 0$$

also  $\tilde{a}$  koerziv mit Koerzivitätskonstante  $\tilde{\alpha} \geq \alpha - \epsilon_a$ .

**Bemerkung** (Schranke  $||u - \tilde{u}||$ ). Falls  $\epsilon_a < \alpha$  so folgt mit Störungsargument eine Schranke für  $||u - \tilde{u}||$  bezüglich  $\epsilon_a$ ,  $\epsilon_f$ 

$$a(u-\tilde{u},v)=a(u,v)-a(\tilde{u},v)=f(v)-a(\tilde{u},v)=:r(v,\tilde{u})$$

Lax-Milgram liefert also mit  $r(v,\tilde{u}) = f(v) - \underbrace{\tilde{f}(v) + a(\tilde{u},v)}_{0} - a(\tilde{u},v).$ 

$$||u - \tilde{u}|| \le \frac{||r(\cdot; \tilde{u})||_{X'}}{\alpha} \le \frac{1}{\alpha} (\epsilon_f + \epsilon_a ||\tilde{u}||)$$
(4.2)

Für  $||\tilde{u}||$  liefert Lax-Milgram

$$||\tilde{u}|| \le \frac{||\tilde{f}||}{\tilde{\alpha}} \le \frac{||\tilde{f}||}{\alpha - \epsilon_a}$$

also insgesamt in 4.3

$$||u - \tilde{u}|| \le \frac{1}{\alpha} \epsilon_f + \frac{||\tilde{f}||}{\alpha(\alpha - \epsilon_a)} \epsilon_a =: \Delta_{EI}$$
 (4.3)

Dreiecksungleichung  $||u - \tilde{u}_N|| \le ||u - \tilde{u}|| + ||\tilde{u} - \tilde{u}_N||$  und deren Schranken (4.4) bzw.  $\Delta_N$  liefern:

#### Korollar 4.9 (EI-RB Fehlerschranke)

Seien  $(P(\mu))$ ,  $(\tilde{P}(\mu))$ ,  $(\tilde{P}_N(\mu))$  wie in Definition 4.8 gegeben und  $\epsilon_a < \alpha$  Dann gilt die Fehlerschranke

$$||u(\mu) - u_N(\mu)|| \leq \Delta_{EI}(\mu) + \Delta_N(\mu)$$

mit  $\Delta_{EI}(\mu)$  aus (4.4) und  $\Delta_N(\mu)$  Standard RB-Fehlerschranke für  $||\tilde{u} - \tilde{u}_N||$  aus Satz 3.13 ii).

# 4.2 Inf-sup stabile Probleme

# **Definition 4.10** (inf-sup Stabilität)

Eine stetige Bilineaform  $a: X_1 \times X_2 \to \mathbb{R}$  heißt inf-sup stabil auf  $X_1 \times X_2$  mit inf-sup-Konstante  $\beta$  falls

$$\beta := \inf_{v \in X_1 \setminus \{0\}} \sup_{w \in X_2 \setminus \{0\}} \frac{a(v, w)}{||v|| ||w||} > 0$$

Wir fassen einige Einsichten/Aussagen zu inf-sup stabilen Problemen zusammen, für Beweise siehe Skript NUMPD14/15 oder Braess FEM.

# Bemerkung (Beziehung zwischen $\alpha/\beta$ ).

 $\bullet\,$ inf-sup Stabilität ist allgemeinerer Stabilitätsbegriff als Koerzivität.

falls a koerziv  $\Rightarrow$  a inf-sup stabil mit  $\beta \geq \alpha$ 

falls a koerziv & symmetrisch  $\Rightarrow$  a inf-sup stabil mit  $\beta = \alpha$ 

 $\beta$  ist also immer "bessere" (oder gleich gute) Konstante als  $\alpha$ .

• inf-sup Stabilität vererbt sich nicht auf Teilräume dies stellt bei FEM- und RB-Behandlung ein Problem dar.

# Bemerkung (Beispiel).

- a) Divergenzgleichung: Sie  $\Omega$  Lipschitz-Gebiet und beschränkt Für  $q \in Q_1 := L_0^2(\Omega) = \{ p \in L^2(\Omega) | \int_{\Omega} p(x) dx = 0 \}$  und  $v \in V := H_0^1(\Omega)^d$  ist  $a(q,v) = \int_{\Omega} q \operatorname{div}(v)$  inf-sup stabil auf  $Q \times V$ .
- b) Stokes-Problem:

$$-\mu \Delta u + \nabla p = r$$
 in  $\Omega$ , div  $u = 0$  in  $\Omega$ ,  $u = 0$  auf  $\Gamma$ 

ergibt mit  $X_1 := X_2 := H_0^1(\Omega)^d \times L_0^2(\Omega)$  schwache Form:

Suche  $(u,p) \in X_1$  so dass a((u,p),(v,q)) = f((v,q))  $\forall (v,q) \in X_2$ 

mit 
$$a((u,p),(v,q)) := \mu \int_{\Omega} \nabla u : \nabla v - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(v) - \int_{\Omega} q \operatorname{div}(u).$$

Dann ist a inf-sup stabil auf  $X_1 \times X_2$ .

Der folgende Satz garantiert Wohlgestelltheit für inf-sup stabile Probleme

#### Satz 4.11 (Nečas-Theorem)

Sei  $a: X_1 \times X_2$  stetig Bilinearform,  $l \in X_2'$ . Die Gleichung

$$a(u,v) = l(v) \quad \forall v \in X_2$$

hat eine eindeutige Lösung  $u \in X_1$  und ist stetig von den Daten abhängig via

$$||u||_{X_1} \le \frac{1}{\beta} ||l||_{X_2'}$$

für ein  $\beta > 0$  (unabhängig von l) genau dann wenn eine der folgenden Bedingungen gilt:

- i)  $a(\cdot,\cdot)$  erfüllt  $\inf_v \sup_w \frac{a(v,w)}{||v||_{X_1}||w||_{X_2}} \ge \beta > 0$ und  $\forall w \in X_2, \ w \ne 0$  ex.  $v \in X_1$  mit  $a(v,w) \ne 0$ .
- ii)  $a(\cdot,\cdot)$  erfüllt  $\inf_{w} \sup_{v} \frac{a(v,w)}{||v||_{X_1}||w||_{X_2}} \ge \beta > 0$ und  $\forall v \in X_1, v \ne 0$  ex.  $w \in X_2$  mit  $a(v,w) \ne 0$ .

# Bemerkung.

- inf-sup Stabilität ist also "allgemeinerer" Stabilitätsbegriff, welcher Wohlgestelltheit impliziert.
- Lax-Milgram kann als Korollar von 4.11 gezeigt werden
- Aus 4.11 folgt insbesondere

wohlgestellt 
$$\Rightarrow \inf_{v \in X_1} \sup_{w \in X_2} \frac{a(v, w)}{||v||||w||} = \beta = \inf_{w \in X_2} \sup_{v \in X_1} \frac{a(v, w)}{||v||||w||}$$
 (4.4)

also dasselbe  $\beta$  für beide Richtungen. Umgekehrte Richtung in (4.6) gilt auch.

**Satz 4.12** (Eigenschaften von  $\beta$ / Suprimierender Operator) Sie  $a(\cdot, \cdot)$  stetige Bilinearform auf  $X_1 \times X_2$  und

$$a(u,v) = \langle Au, v \rangle_{X_2} \qquad \forall (u,v) \in X_1 \times X_2$$

mit Operator  $A \in L(X_1, X_2)$ . Dann gilt:

i) A ist suprimierender Operator,

$$\sup_{v \in X_2} \frac{a(u,v)}{||v||} = \frac{a(u,Au)}{||Au||} \qquad \forall u \in X_1 \setminus \{0\}$$

ii)

$$\beta = \inf_{u \neq 0} \frac{||Au||}{||u||}$$

iii)

$$\gamma = \sup_{u \neq 0} \frac{||Au||}{||u||}$$

- iv)  $\forall u \in X_1 \text{ ex. } v \in X_2 \text{ s. d. } \beta||u||||v|| \le a(u,v)$
- v) A ist injektiv, d. h.  $\forall v \neq 0$  gilt  $Av \neq 0$ .

Beweis. Satz 3.32 in NUMPDE14/15

**Bemerkung.** Solches A existiert wegen Riesz:  $a(u, \cdot) \in X_2'$  also existiert Riesz-Repräsentant  $Au \in X_2$  mit  $a(u, \cdot) = \langle Au, \cdot \rangle_{X_2}$ .

**Satz 4.13** (Eigenwert für  $\beta/\gamma$ )

Seien  $X_1$ ,  $X_2$  Hilberträume,  $a: X_1 \times X_2$  stetige Bilinearform mit  $a(u,v) = \langle Au, v \rangle$  und A,  $A^*$  komp. Operator d.h.  $A \in K(X_1,X_2)$ ,  $A^* \in L(X_2,X_1)$  und  $\sigma := \sigma(A^*A)$  Spektrum von  $A^*A$ . Dann gilt:

i) 
$$\forall \lambda \in \sigma \text{ ex. } u \in X_1$$
:

$$\langle Au, Av \rangle_{X_2} = \lambda \langle u, v \rangle_{X_1} \qquad \forall v \in X_1$$

ii) 
$$\beta^2 = \inf \sigma$$

iii) 
$$\gamma^2 = \max \sigma$$

Beweis. i) Seien 
$$u, \lambda$$
 EV/EW von  $A^*A \Rightarrow \langle A^*Au, v \rangle_{X_1} = \langle \lambda u, v \rangle_{X_1}$   $\forall v \in X_1$   $\Rightarrow \langle Au, Av \rangle_{X_1} = \lambda \langle u, v \rangle_{X_1}$   $\forall v \in X_1$ 

ii) Wegen  $A^*A$  komp. & selbstadjungiert folgt mit Spektralsatz

$$A^*Au = \sum_{i \in I} \lambda_i \langle u, \varphi_i \rangle \varphi_i$$

und  $\sigma = {\lambda_i}_{i \in I}$  oder  $\sigma = {\lambda_i}_{i \in I} \cup {0}$ 

Nach 4.12 ii) 
$$\beta = \inf_{u \neq 0} \frac{||Au||}{||u||} = \inf_{u \neq 0} \sqrt{\frac{||Au||^2}{||u||^2}} = \inf_{||u||=1} \sqrt{\langle Au, Au \rangle} = \inf_{||u||=1} \sqrt{\langle A^*Au, A \rangle}$$

$$\beta^2 = \inf_{||u||=1} \langle A^*Au, u \rangle \tag{4.4'}$$

 $\text{Falls } 0 \in \sigma \text{ mit EV } \varphi^0 \Rightarrow 0 \leq \beta^2 = \langle A^*A\varphi^0, \varphi^0 \rangle = 0 \Rightarrow \beta^2 = 0 = \inf \sigma.$ 

Falls  $0 \notin \sigma \Rightarrow \{\varphi_i\}_{i \in I}$  ist vollständiges ONS von  $X_1$ 

$$\Rightarrow \forall u \in X_1 \text{ mit } ||u|| = 1 \text{ ex. } u_i \in \mathbb{R} \text{ mit } u = \sum_{i \in I} u_i \varphi_i \,, \, \sum u_i^2 = 1$$

$$\overset{(???)}{\Rightarrow}\beta=\inf_{||u||=1}\langle A^*Au,u\rangle=\inf_{||u||=1}\sum\lambda_iu_i^2\underbrace{\geq}_{\text{Konvexkombination}}\inf\{\lambda_i\}=\inf\sigma$$

und 
$$\beta^2 = \inf_{||u||=1} \sum_{i} \lambda_i u_i^2 \underbrace{\leq}_{u=\varphi_i} \sum_{i} \lambda_i u_i^2 = \lambda_j \Rightarrow \beta^2 \leq \inf\{\lambda_i\} \Rightarrow \beta^2 = \inf \sigma$$

iii) analog zu ii)

Korollar 4.14 (Inf-sup Stabilität im Endlichdimensionalen)

Sei  $X_1 = \mathbb{R}^m, X_2 = \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times m}, m \leq n$  und  $a(u,v) := \langle Au, v \rangle$ . Seien  $\{\sigma_i\}_{i=1}^m$  Singulärwerte von A. Dann

i) 
$$\beta = \min_{i=1,\dots,m} \sigma_i$$

ii) a inf-sup stabil  $\iff$  A hat vollen Spaltenrang

Beweis. i) a stetig und  $A, A^T$  kompakter linearer Operator, da endlichdimensionale Bilder. Mit 4.13 folgt wegen  $\sigma(A^TA) = \{\sigma_i^2\}_{i=1}^m : \beta^2 = \inf \sigma(A^TA) = \min_{i=1,\dots,m} \{\sigma_i^2\}.$  Weil  $\beta \geq 0, \sigma_i \geq 2 \Rightarrow \beta = \min_{i=1,\dots,m} (\sigma_i).$ 

ii) a inf-sup-stabil  $\iff \beta > 0 \stackrel{i)}{\iff} \sigma_i > 0 \,\forall i \iff A \text{ hat Rang } m \iff A \text{ hat vollen Spaltenrang.}$ 

RB-Methode folgt mit Petrov Galerkin-Projektion

**Definition 4.15**  $((P(\mu)), (P_N(\mu)))$  für inf-sup stabilen Fall)

Sei  $a: X_1 \times X_2 \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$  stetig param. Bilinearform,  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  inf-sup stabil mit  $\beta(\mu)$  inf-sup Konstante  $f(\cdot;\mu)$  stetig param. Linearform. Zu  $\mu \in \mathcal{P}$  ist  $u(mu) \in X_1$  Lösung des vollen Problems

$$a(u(\mu), v; \mu) = f(v; \mu) \quad \forall v \in X_2$$

Seien  $X_{N,1}\subseteq X_1,\ X_{N,2}\subseteq X_2$  mit  $N=\dim X_{N,1}=\dim X_{N,2}$  RB-Räume. Dann ist  $u_N(\mu)\in X_{N,1}$  RB-Lösung von

$$a(u_N(\mu), v; \mu) = f(v; \mu) \quad \forall v \in X_{N,2}$$

#### Bemerkung.

• Wir verzichten in 4.15 auf das Ausgabefunktional, dies kann analog zu §3.5 behandelt werden, d. h. l parametrische Linearform

$$s'_N(\mu) = l(u_N(\mu); \mu) - r(u_N^{du}; \mu) \text{ mit } u_N^{du} \in X_{N,2}^{du} \text{ L\"osung von}$$

$$\tag{4.5}$$

$$a(v, u_N^{du}; \mu) = -l(v; \mu) \ \forall \ v \in X_{N,1}^{du}$$
 und dualen RB-Räumen  $X_{N,1}^{du}, X_{N,2}^{du}$  (4.6)

• Wahl von  $X_{N,1}, X_{N,2}$  ist nicht beliebig, sondern müssen geeignet gewählt werden, so dass  $(P_N(\mu))$  gute Approximation liefert (wie in §3. Wähle  $X_{N,2}$  s. d.  $(P_N(\mu))$  möglichst stabil, d. h. möglichst große diskrete inf-sup Konstante.

Wegen dim  $X_{N,1}$  = dim  $X_{N,2}$  vereinfacht sich Charakterisierung von inf-sup Stabilität.

Satz 4.16 (Diskrete inf-sup Bedingung)

Für  $a: X_{N,1} \times X_{N,2} \to \mathbb{R}$  sind äquivalent

i) 
$$\inf_{v \in X_{N,1}} \sup_{w \in X_{N,2}} \frac{a(v,w)}{||v||||w||} = \beta_N > 0$$

ii) 
$$\inf_{w \in X_{N,2}} \sup_{v \in X_{N,1}} \frac{a(v,w)}{||v||||w||} = \beta_N > 0$$

iii)  $\forall w \in X_{N,2} w \neq 0$  ex.  $v \in X_{N,1}$  mit  $a(v,w) \neq 0$  (A surjektiv)

iv) 
$$\forall v \in X_{N,1}v \neq 0$$
 ex.  $w \in X_{N,2}$  mit  $a(v,w) \neq 0$  (A injektiv)

Beweis. Satz 3.46 in NUMPDE14/15

# **Korollar 4.17** (Wohlgestelltheit von $(P_N)$ )

Falls a eine der Bedingungen aus 4.16 erfüllt, dann hat ads PRoblem  $(P_N(\mu))$  aus 4.15 eindeutige Lösung  $u_N(\mu) \in X_{N,1}$  mit

$$||u_N(\mu)|| \le \frac{||f||_{X_2'}}{\beta_N(\mu)}$$

Beweis. klar mit Nečas

Petrov-Galerkin Projektion erlaubt Approximationsaussage:

# Satz 4.18 (Beziehung zur Bestapproximation)

Sei a inf-sup stabil mit  $\beta_N > 0$ . Dann gilt

$$||u(\mu) - u_N(\mu)|| \le \frac{\gamma(\mu)}{\beta_N(\mu)} \inf_{v \in X_{N,1}} ||u(\mu) - v||$$

Beweis. Satz 3.55 in NUMPDE14/15

#### Bemerkung.

• Es gilt wieder "Reproduktion von Lösung":

Falls  $u(\mu) \in X_{N,1} \Rightarrow u_N(\mu) = u(\mu)$ 

• Im Fall von primal-dualem Ansatz (4.7), (4.8) gilt analoge Aussage wie Satz 3.60, insbesondere multiplikativer Effekt für Ausgabefehler

$$||u^{du} - u_N^{du}|| \le \frac{\gamma(\mu)}{\beta_N^{du}} \inf ||u^{du} - v||$$

$$|s(\mu) - s_N'(\mu)| \le \gamma(\mu)||u - u_N||||u^{du} - u_N^{du}||$$

# Satz 4.19 (A-posteriori Fehlerschätzer)

Sei  $\beta_{LB}(\mu) > 0$  untere Schranke für  $\beta_N(\mu)$ . Dann gilt

$$||u - u_N|| \le \Delta_N(\mu) := \frac{||v_r||}{\beta_{LB}}$$

mit  $v_r \in X_2'$  Riesz-Repräsentant des Residuums wie in §3.

Beweis.  $u - u_N$  ist Lösung von  $a(u - u_N, v) = r(v) \ \forall \ v \in X_2$ , also folgt mit Nečas

$$||u - u_N|| \le \frac{||r||_{X_2'}}{\beta_N(\mu)} \le \frac{||v_r||_{X_2}}{\beta_{LB}} = \Delta_N$$

Bemerkung.

• Ident. zu Satz 3.16 ii) folgt Effektivitätsschranke

$$\eta_N(\mu) := \frac{\Delta_N(\mu)}{||e||} \le \frac{\gamma_{LB}(\mu)}{\beta_{LB}(\mu)}$$

• Analog zu 3.61 & 3.62 gilt Schranke für duale Lösung & Ausgabe

$$||u^{du} - u_N^{du}|| \le \Delta_N^{du}(\mu) := \frac{||r^{du}||}{\beta L B^{du}}$$

$$|s - s'_N| \le \Delta'_{N,s}(\mu) : 0 \frac{||v_r|| \cdot ||v_r^{du}||}{\beta_{LB}(\mu)}$$

also multiplikativer Effekt erreicht.

- Zusammenfassend: (fast) alle Aussagen aus §3 gelten mit  $\alpha_{LB}$  ersetzt durch  $\beta_{LB}$ , bzw.  $\alpha$  durch  $\beta$ .
- Offline-Online-Zerlegung folgt analog zu §3.
- Einzig offene Punkte: Wahl von  $X'_{N,2}$  und Bestimmung von  $\beta_{LB}$ . Das sind kritische Komponenten: Weil inf-sup Stabilität nicht auf Teilräume vererbt wird, kann  $\beta_N(\mu)$  und damit  $\beta_{LB}(\mu)$  beliebig klein, sogar Null werden.
  - $\rightarrow$  singuläres red. System trotz  $\beta(\mu) > 0$ . Ziel ist daher Wahl von  $X_{N,2}$  s. d.  $\beta_N(\mu)$  möglichst groß uniform in N, d. h. Verhindern von  $\lim_{N\to\infty} \beta_N(\mu) \to 0$ . Idealerweise Ziel:

$$\beta_N(\mu) > \beta(\mu) > 0$$

# **Satz 4.20** (Kriterium für $X_{N,2}$ )

Sei  $A(\mu)$  suprimierender Operator aus 4.12. Falls für alle  $v \in X_{N,1}$  gilt, dass  $A(\mu) \in X_{N,2}$ , dann ist a inf-sup stabil auf  $X_{N,1} \times X_{N,2}$  mit  $\beta_N(\mu) \ge \beta(\mu)$ .

Bemerkung (Min. Residuum Verfahren).

- Sei  $X_{N,1} = \text{span}\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ . Wähle  $X_{N,2} := \text{span}\{A(\mu)\varphi_1, \dots, A(\mu)\varphi_N\} \Rightarrow \dim X_{N,1} = \dim X_{N,2}$  wegen Injektivität von A.
  - Wegen Linearität gilt:  $\forall v \in X_{N,1} \Rightarrow A(\mu)v \in X_{N,2}$  also ideales RB-Verfahren gemäß 4.20 erreicht. Aber  $X_{N,2}$  ist  $\mu$ -abhängig. Dies stellt jedoch kein Problem dar, denn Offline-Online weiter möglich.
- Petrov-Galerkin-System entspricht einem Galerkin-RB-System eines koerziven, symmetrischen Problems mit separierbar parametrischen Bilinearform  $\tilde{a}$ :

Definiere 
$$\tilde{a}(u,v;\mu) := \langle A(\mu)u, A(\mu)v \rangle_{X_2} \quad \forall u,v \in X_1$$

 $\Rightarrow \tilde{a}$  ist bilinear, stetig, symmetrisch.  $\tilde{a}$  ist koerziv

$$\frac{\tilde{a}(u,u)}{||u||^2} = \frac{\langle Au, Au \rangle}{||u||^2} = \frac{||Au||^2}{||u||^2} \ge \left(\inf_{v \ne 0} \frac{||Av||}{||v||}\right)^2 \stackrel{4.12ii}{=} \underbrace{(\beta(\mu))^2}_{-\tilde{\alpha}} > 0 \tag{4.7}$$

also  $\tilde{\alpha} := \beta(\mu)^2$  Koerzivitätskonstante von  $\tilde{a}$ .

 $\tilde{a}$  ist separierbar parametrisch  $Q_{\tilde{a}} = (Q_a)^2$  Komp.  $\{\langle A^q \cdot, A^q \cdot \rangle\}_{q,q'=1}^{Q_a}$  und Koeffizienten  $\Theta_a^q(\mu), \Theta_a^{q'}(\mu)$ .

Für Petrov-Galerkin-System gilt mit  $\overline{\varphi_i} := A(\mu)\varphi_i$ 

$$\begin{split} A_N \underline{u}_N &= \underline{f}_N \text{ mit } (A_N)_{ij} = a(\varphi_j, \overline{\varphi}_i) = a(\varphi_j, A(\mu)\varphi_i) \\ &= \langle A\varphi_j, A\varphi_i \rangle = \tilde{a}(\varphi_j, \varphi_i) \end{split}$$

also RB-Matrix für  $\tilde{a}$ . Analog  $(\underline{f}_N)_i=f(\overline{\varphi}_i;\mu)=f(A\varphi_i)=\tilde{f}(\varphi;\mu)$  mit  $\tilde{f}:=f\circ A$ 

• Darstellung durch FEM-Matrizen: Seien  $\underline{A}, K, \underline{\Phi_N}, \underline{f}$  die bekannten FEM-Matrizen/Vektoren aus §3.3.

 $A\varphi_j$  ist Riesz-Repräsentant von  $a(\varphi_j,\cdot)$ 

$$\Rightarrow A\varphi_j \in X_1$$
 hat FEM Koeff.-Vektor  $K^{-1}(a(\varphi_j\psi_i)_{i=1}^H = K^{-1}\underline{A}\varphi_j$ 

$$A_N = (\langle A\varphi_j, A\varphi_i \rangle_{i,j=1}^N = \underline{\Phi}_N^T \underline{A}^T K^{-1} \underline{A} \underline{\Phi}_N$$

analog 
$$f_N = \underline{\Phi}_N^T \underline{A} K^{-1} f$$

• Überraschung: RB-System entspricht Gauß'schen Normalengleichungen:

Mit 
$$\underline{\hat{A}} := K^{-\frac{1}{2}} \underline{A} \underline{\Phi}_N \in \mathbb{R}^{H \times N}$$
 und  $\underline{\hat{f}} := K^{-\frac{1}{2}} \underline{f}(\mu) \in \mathbb{R}^H$  gilt

$$A_N \underline{u}_N = f_N \quad \Leftrightarrow \quad \underline{\hat{A}}^T \underline{\hat{A}} \, \underline{u}_N = \hat{A}^T \hat{f}$$

Aus NLA/Numerik wissen: dies entspricht Ausgleichsproblem:

$$\underline{u}_{N} = \arg \min_{\underline{v} \in \mathbb{R}^{N}} \|\hat{A}\underline{v} - \hat{f}\|^{2}$$

$$= \arg \min_{\underline{v} \in \mathbb{R}^{N}} (\underline{A}\underline{\Phi}_{N}\underline{v} - \underline{f})^{T} K^{-1} (\underline{A}\underline{\Phi}_{N}\underline{v} - \underline{f})$$

Riesz-Repräsentant des Residuums  $v_r \in X_1$  hat FEM-Koeffizienten-Vektor

$$\underline{v}_r := K^{-1} \left( \underline{f} - \underline{A} \Phi_N \underline{v} \right)$$

also

$$\underline{u}_{N} = \arg\min_{\underline{v} \in \mathbb{R}^{N}} \underline{v}_{r} K \underline{v}_{r} = \arg\min_{\underline{v} \in \mathbb{R}^{N}} \arg\min_{\underline{v} \in \mathbb{R}^{N}} \langle v_{r}, v_{r} \rangle$$
$$= \arg\min_{\underline{v} \in X_{N,1}} \|f(\cdot; \mu) - a(v, \cdot; \mu)\|_{X'_{2}}^{2}$$

also entspricht Wahl von  $X_{N,2}$  via Suprimieren einem Minimum-Residuum Ansatz.

• Heuristische Vereinfachung: Min-Res Ansatz hat Online-Komplexität  $\mathcal{O}(Q_a^2 + Q_a Q_f)$  für Lösen des Systems, also teuer falls  $Q_a$ ,  $Q_f$  nicht sehr klein.

Alternative: Seien  $X_{N,1} = \operatorname{span} \varphi_1, \dots, \varphi_N = \operatorname{span} \{u(\mu_i)\}_{i=1}^N$ . Wähle  $X_{N,2} := \operatorname{span} \{A(\mu_i)u(\mu_i)\}_{i=1}^N$ . Dann ist immerhin für alle  $v = u(\mu) \Rightarrow A(\mu)v \in X_{N,2}$  für  $\mu = \mu_i, \ i = 1, \dots, N$ . Bedingung in Satz 4.20 gilt also für ein paar  $v \in X_{N,1}$ , aber leider für übriges  $v \in X_{N,1}$  unklar. Aber Online-Komplexität ist  $\mathcal{O}(Q_a + Q_f)$ , also besser als für Min-Res.

# Successive Constraint Method (SCM)

#### Motivation:

- Wir benötigen untere Schranken  $\beta_{LB}(\mu)$  an inf-sup Konstante.
- Wir haben gesehen, dass  $\beta(\mu) = \sqrt{\tilde{a}(\mu)}$  in (??), es reicht also für allgemeine koerzive Probleme untere Schranke  $\alpha_{LB}(\mu)$  an Koerzivitätskonstante berechnen zu können.
- Min-Θ-Verfahren aus ?? hat leider starke Voraussetzungen, allgemeines Verfahren erforderlich.

Für Details zu Folgendem siehe: [HRSP07] Huynh, Rozza, Sen, Patera: A Successive Constraint Linear Optimization Method for Lower Bounds of Parametric Coercivity and Inf-Sup Stability Constants. C. R. Math. Acad. Sci. Paris, Series I, 345:473-478, 2007.

# **Definition 4.21** (SCM)

Sei  $a(\cdot,\cdot;\mu)$  gleichmäßig koerziv bzgl.  $\mu$  und separierbar parametrisch mit  $Q:=Q_a$ . Seien  $C,D\subset\mathcal{P}$  endliche Teilmengen und  $M_{\alpha},M_{+}\in\mathbb{N}$ . Definiere

$$Y := \left\{ y = (y_1, \dots, y_Q) \in \mathbb{R}^Q \mid \exists u \in X \text{ mit } g_q = \frac{a^q(u, u)}{\|u\|^2}, 1 \le q \le Q \right\}$$

Wir definieren eine Zielfunktion  $J: \mathcal{P} \times \mathbb{R}^Q \to \mathbb{R}$ 

$$J(\mu, y) := \sum_{q=1}^{Q} \Theta_a^q(\mu) y_a$$

und ein Polytop durch

$$\sigma_{q}^{-} := \inf_{u \in X} \frac{a^{q}(u, u)}{\|u\|^{2}}, \quad \sigma_{q}^{+} := \sup_{u \in X} \frac{a^{q}(u, u)}{\|u\|^{2}}$$
$$B_{Q} := \prod_{q=1}^{Q} [\sigma_{q}^{-}, \sigma_{q}^{+}] \subset \mathbb{R}^{Q}$$

Für  $M \in \mathbb{N}$ ,  $\mu \in \mathcal{P}$  definiere  $\mathcal{P}_M(\mu, C) \subset C$  durch

$$M \in \mathbb{N}, \ \mu \in \mathcal{P} \text{ definiere } \mathcal{P}_M(\mu, C) \subset C \text{ durch}$$
 
$$\mathcal{P}_M(\mu, C) := \begin{cases} M\text{-nächsten Nachbarn von } \mu \text{ in Menge } C & \text{falls } 1 \leq M \leq |C| \\ C & \text{falls } |C| \leq M \\ \emptyset & \text{falls } M = 0 \end{cases}$$

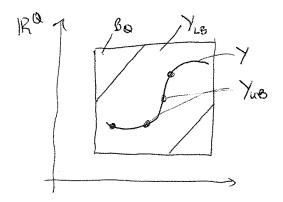
Wir definieren hiermit für  $\mu \in \mathcal{P}$ :

$$Y_{LB}(\mu) := \left\{ y \in B_Q \middle| J(\mu', y) \ge \alpha(\mu') \, \forall \mu' \in \mathcal{P}_{M_{\alpha}}(\mu, C) \land J(\mu', y) \ge 0 \, \forall \mu' \in \mathcal{P}_{M_{+}}(\mu, D) \right\}$$
$$Y_{UB} := \left\{ y^*(\mu') \middle| \mu' \in C \right\} \quad \text{mit} \quad y^*(\mu') := \arg \min_{y \in Y} J(\mu', y)$$

und hiermit Schranken

$$\alpha_{LB}(\mu) := \min_{y \in Y_{LB}(\mu)} J(\mu, y), \quad \alpha_{UB}(\mu) := \min_{y \in Y_{UB}} J(\mu, y)$$

#### Illustration:



**Satz 4.22** ( $\alpha$ -Approximation mit SCM)

Es gilt für alle  $\mu \in \mathcal{P}$ 

$$\alpha_{LB}(\mu) < \alpha(\mu) < \alpha_{UB}(\mu)$$

Beweis. Zunächst sehen wir, dass

$$\alpha(\mu) = \inf_{u \in X} \frac{\sum_{q=1}^{Q} \Theta_a^q(\mu) a^q(u, u)}{\|u\|^2} = \min_{y \in Y} J(\mu, y)$$

Es gilt weiter  $Y_{UB} \subset Y \subset Y_{LB}(\mu)$ , denn:

$$y \in Y_{UB} \Rightarrow y = y^*(\mu') = \arg\min_{\bar{y} \in Y} J(\mu', \bar{y}) \text{ für ein } \mu' \in C \Rightarrow y \in Y$$
  
 $y \in Y \Rightarrow y \in B_Q \text{ und } \alpha(\mu') = \min_{\bar{y} \in Y} J(\mu', \bar{y}) \leq J(\mu', y) \ \forall \mu' \in C$ 

analog folgt

$$0 < \alpha(\mu') \le J(\mu', y) \ \forall \mu' \in D \implies y \in Y_{LB}(\mu)$$

Also

$$\underbrace{\min_{y \in Y_{LB}(\mu)} J(\mu, y)}_{=\alpha_{LB}(\mu)} \leq \underbrace{\min_{y \in Y} J(\mu, y)}_{=\alpha(\mu)} \leq \underbrace{\min_{y \in Y_{UB}} J(\mu, y)}_{=\alpha_{UB}(\mu)}$$

Bemerkung.

- Für festes  $\mu$  ist J also insbesondere linear in y, also Berechnung von  $\alpha_{LB}(\mu)$  ein kleines, schnell lösbares lineares Optimierungsproblem.
- $\bullet$  C, D sind durch ein Greedy-Verfahren bestimmbar.

# 5 Nichtlineare Probleme

Wir diskutieren RB-Ansätze für nichtlineare Probleme anhand von "quadratischen" Nichtlinearitäten, Kommentare zur Verallgemeinerung folgen am Ende des Kapitels.

**Definition 5.1** (Nichtlineares volles Problem  $(P(\mu))$ )

Sei X Hilbertraum,  $\mu \in \mathcal{P}$  gesucht ist  $u(\mu) \in X$ ,  $s(\mu) \in \mathbb{R}$  als Lösung von

$$a(u,u,v;\mu) + b(u,v;\mu) = f(v;\mu) \quad \forall v \in X$$
$$s(\mu) = l(u(\mu);\mu)$$

mit a, b, f, l stetige parametrische Tri-/Bi-/Linearformen.

#### Bemerkung (Wohlgestelltheit).

- Existenz und Eindeutigkeit im Allgemeinen unklar: Mehrere oder keine Lösung möglich.
- Lokale Existenz und Eindeutigkeit von  $(P(\mu))$  wird später a-posteriori nach erfolgreicher RB-Approximation möglich sein.

#### Annahmen:

- Seien a, b, f, l stetig mit Stetigkeitskonstanten  $\gamma_a(\mu), \gamma_b(\mu), \gamma_f(\mu), \gamma_l(\mu)$  und separierbar parametrisch.
- Seit a symmetrisch bzgl. ersten beiden Argumenten:  $a(u,v,\cdot;\mu)=a(v,u,\cdot;\mu)$
- Lokale Wohlgestelltheit der Linearisierung:

Für alle  $\mu \in \mathcal{P}$  existiert  $\gamma_u \in \mathbb{R}^+ \cup \{\infty\}$ , sodass  $\forall u \in B(0,\gamma_u) \subset X$  und alle  $g \in X'$  die Gleichung

$$2a(u,h,\cdot;\mu) + b(h,\cdot;\mu) = g(\cdot)$$
(5.1)

eine eindeutige Lösung  $h \in X$  besitzt mit

$$||h|| \le \frac{1}{\beta(\mu)} ||g||_{X'}$$

mit geeignetem Stabilitätsfaktor  $\beta(\mu) > 0$ .

#### Referenzen:

- [VPP03]: Veroy, Prud'homme, Patera: Reduced-basis approximation of the viscous Burgers equation: rigorous a posteriori error bounds. C. R. Acad. Sci. Paris, Series I, 337: 619-624, 2003.
- [VPRP03]: Veroy, Prud'homme, Rovas, Patera: A posteriori error bounds for reduced-basis approximation of parametrized noncoercive and nonlinear elliptic partial differential equations. In Proc. 16th AIAA computational fluid dynamics conference, 2003, Paper 2003.3847.

#### Beispiele:

a) Poisson-Gleichung mit nichtlinearem Reaktionsterm: gesucht  $u \in H_0^1(\Omega) = X$  mit

$$-\mu_1 \Delta u + \mu_2 u^2 = q \qquad \text{in } \Omega, \, \mu_1, \mu_2 > 0$$
$$u = 0 \qquad \text{auf } \partial \Omega$$

Schwache Form:

$$\underbrace{\mu_1 \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v}_{b(u,v;\mu)} + \underbrace{\mu_2 \int_{\Omega} u^2 v}_{a(u,u,v;\mu)} = \underbrace{\int_{\Omega} qv}_{f(v;\mu)} \quad \forall v \in X$$

Für  $\Omega \subset \mathbb{R}, q \in L^2(\Omega)$  sind (Multi-)Linear formen stetig (via  $H^1_0 \to L^4$  stetig).

b) Viskose Burgers-Gleichung

$$-\mu_1 \Delta u + \nabla(\mu_2 u^2) = q \qquad \text{in } \Omega$$
$$u = 0 \qquad \text{auf } \partial\Omega$$

Schwache Form:

$$\mu_1 \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \underbrace{-\mu_2 \int_{\Omega} u^2 \nabla v}_{a(u,u,v;\mu)} = \int_{\Omega} qv \quad \forall v \in X$$

Quadratische Nichtlinearität ist ähnlich zu inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen in mehreren Raumdimensionen. Bei Burgers-Gleichung erwartet man also ähnliche Effekte/Probleme wie bei "echten" Strömungen.

# Numerische Lösung von $(P(\mu))$

- Mit  $F(u; \mu) := a(u, u, \cdot; \mu) + b(u, \cdot; \mu) f(\cdot; \mu) \in X'$  lautet Bedingung für  $u(\mu)$  einfach  $F(u(\mu); \mu) = 0$ , also Nullstellensuche. Numerische Behandlung mit Newton-Schema möglich.
- Richtungsableitungen:  $\forall u, h \in X$  gilt

$$DF|_{u}(h) = \lim_{\delta \to 0} \frac{F(u + \delta h) - F(u)}{\delta}, \quad DF|_{u} : X \to X'$$

$$F(u + \delta h) - F(u) = a(u + \delta h, u + \delta h, \cdot) - a(u, u, \cdot)$$

$$+ b(u + \delta h, \cdot) - b(u, \cdot) + f(\cdot) - f(\cdot)$$

$$= 2\delta a(u, h, \cdot) + \delta^{2} a(h, h, \cdot) + \delta b(h, \cdot)$$

$$\Rightarrow DF|_{u}(h) = 2a(u, h, \cdot) + b(h, \cdot)$$

• Newton-Schleife:

- Wähle  $u^0 \in X$
- Wiederhole:

Bestimme  $h^k$  als Lösung von  $DF|_{u^k}(h^k) = -F(u^k)$ :

$$2a(u^{k}, h^{k}, v) + b(h^{k}, v) = -a(u^{k}, u^{k}, v) - b(u^{k}, v) + f(v) \quad \forall v \in X$$

Setze 
$$u^{k+1} := u^k + h^k$$

bis 
$$||u^{k+1} - u^k|| < \epsilon_{tol}$$

Falls Newton-Verfahren konvergiert ⇒ Existenz einer Lösung.

**Definition 5.2** (Reduziertes nichtlineares Problem  $(P_N(\mu))$ )

Sei 
$$X_N \subset X$$
 RB-Raum,  $\mu \in \mathcal{P}$ . Gesucht ist  $u_N(\mu) \in X_N$ ,  $s_N(\mu) \in \mathbb{R}$  mit

 $a(u_N, u_N, v; \mu) + b(u_N, v; \mu) = f(v; \mu)$ 

$$s_N(\mu) = l(u_N)$$

# Bemerkung.

- $(P_N(\mu))$  ist also äquivalent zu  $F_N(u_N(\mu)) = 0$  für entsprechendes  $F_N : X_N \to (X_N)'$  mit  $F_N(u) := F(u)|_{X_N} \ \forall u \in X_N$ .
- Newton-Verfahren liefert wieder eine Sequenz  $(u_N^k)_k \subset X_N$ . Falls diese konvergiert, haben wir (lokale) Lösung von  $(P_N(\mu))$ .

# Offline-Online-Zerlegung:

Sei  $X_N = \operatorname{span} \{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ Offline:

$$\underline{f}_{N}^{q} := (f^{q}(\varphi_{i}))_{i=1}^{N}, 
\underline{f}_{N}^{q} := (b^{q}(\varphi_{j}, \varphi_{i}))_{i,j=1}^{N}, 
\underline{f}_{N}^{q} := (b^{q}(\varphi_{j}, \varphi_{i}))_{i,j=1}^{N}, 
\underline{f}_{N}^{q} := (a^{q}(\varphi_{i}, \varphi_{j}, \varphi_{k}))_{i,j,k=1}^{N} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$$

$$\underline{f}_{N}^{q} := (b^{q}(\varphi_{i}, \varphi_{j}, \varphi_{k}))_{i,j=1}^{N}, 
\underline{f}_{N}^{q} := (a^{q}(\varphi_{i}, \varphi_{j}, \varphi_{k}))_{i,j,k=1}^{N} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$$

Online:

- Setze  $\mu \in \mathcal{P}$
- Setze  $\underline{A}_N(\mu) := \sum_{q=1}^{Q_a} \Theta_a^q(\mu) \underline{A}_N^q$ , analog  $\underline{f}_N(\mu)$ ,  $\underline{l}_N(\mu)$ ,  $\underline{B}_N(\mu)$
- Wähle  $\underline{u}_N^0 = \left(u_{N,i}^0\right)_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N$
- Wiederhole:
  - Bestimme  $\underline{h}_N^k \in \mathbb{R}^N$ als Lösung von

$$\left(2\sum_{n=1}^{N}(\underline{A}_{N})_{n,:,:}u_{N,n}^{k}+\underline{B}_{N}\right)\underline{h}_{N}^{k}=-\sum_{n,m=1}^{N}(\underline{A}_{N})_{n,m,:}u_{N,n}^{k}-B_{N}u_{N}^{k}+\underline{f}_{N}$$

$$-\ \underline{u}_N^{k+1} := \underline{u}_N^k + \underline{h}_N^k$$

- Bis  $(\underline{u}_N^{k+1} \underline{u}_N^k)\underline{K}_N(\underline{u}_N^{k+1} \underline{u}_N^k) < \epsilon_{tol}^2$
- Setze  $\underline{u}_N := \underline{u}_N^{k+1}, \, s_N(\mu) := \underline{l}_N^T \underline{u}_N$

**Bemerkung.** Komplexität  $\mathcal{O}(Q_aN^3)$  für Speichern und Linearkombinieren von  $A_N(\mu)$  aus Komponenten ist erheblich.

# Lösungstheorie für $(P(\mu))$

Satz 5.3 (Inversion gestörter Operator)

Seien  $A, B \in L(X,Y), A$  invertierbar. Falls  $||A^{-1}B||_{X;X} := \sup_{x \neq 0} \frac{||A^{-1}Bx||_X}{||x||_X} < 1$ , so ist A + B invertierbar und

$$\|(A+B)^{-1}\|_{Y;X} \le \frac{1}{1-\|A^{-1}B\|_{X:X}} \|A^{-1}\|_{Y;X}$$

Beweis. Identisch zu Störungssatz für Inversion von Matrizen.  $\leadsto$  NLA/Numerik 1.  $\square$ 

**Satz 5.4** (Lokale Existenz und Eindeutigkeit für Nichtlineare Probleme) Sei  $G: X \to Y$  eine  $C^1$ -Abbildung (d.h. DG stetig auf X). Sei  $v \in X$  mit  $DG|_v \in L(X,Y)$ Isomorphismus. Definiere

$$\epsilon := \|G(v)\|_{Y}$$

$$\gamma := \|(DG|_{v})^{-1}\|_{Y;X}$$

$$L(\alpha) := \sup_{x \in \bar{B}(v,\alpha)} \|DG|_{v} - DG|_{x}\|_{X;Y}$$

Falls  $2\gamma L(2\gamma\epsilon) \leq 1 \Rightarrow$  existiert eindeutiges  $u \in \bar{B}(v,2\gamma\epsilon)$  mit

$$G(u) = 0$$

und  $DG|_u$  invertierbar mit

$$||(DG|_u)^{-1}||_{Y:X} \le 2\gamma$$

Für alle  $x \in \bar{B}(v, 2\gamma\epsilon)$  gilt

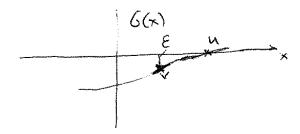
$$||x - u||_X \le 2\gamma ||G(x)||_Y$$

#### Bemerkung.

• Satz und Beweis aus Theorem 2.1 in

Caloz, Rappaz: Numerical Analysis For Nonlinear And Bifurcation Problems. In P.G. Ciarlet and J.L. Lions, "Handbook of Numerical Analysis Vol. V", Elsevier '97.

 Anschauung: Falls v approximative Lösung mit genügend kleinem Residuum und DG lokal invertierbar und DG ändert sich nicht zu start, dann muss Lösung u existieren.



Beweis. Definiere  $H: X \to X$ 

$$H(x) := x - (DG|_v)^{-1}G(x)$$

u Fixpunkt von  $H \Leftrightarrow G(u) = 0$ .

Suche also Fixpunkt mit Banach'schem Fixpunktsatz. Sei  $x \in \bar{B}(v, 2\gamma\epsilon) =: \bar{B}$ 

$$H(x) - v = (DG|_v)^{-1} \left[ DG|_v(x - v) - (G(x) - G(v)) \right] - (DG|_v)^{-1} G(v)$$

Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung:

$$G(x) - G(v) = \int_0^1 DG|_{v+t(x-v)}(x-v) dt$$

$$\Rightarrow H(x) - v = (DG|_v)^{-1} \underbrace{\left[DG|_v(x-v) - \int_0^1 DG|_{v+t(x-v)}(x-v) dt\right]}_{\int_0^1 (DG|_v - DG|_{v+t(x-v)})(x-v) dt} - (DG|_v)^{-1} G(v)$$

$$||H(x) - v|| \le \gamma \int_0^1 ||DG|_v - DG|_{v+t(x-v)}||_{X;Y} dt \cdot ||x - v||_X + \gamma \cdot \epsilon$$

$$\le \gamma \cdot \underbrace{L(2\gamma\epsilon) \cdot 2\gamma}_{\le 1} \epsilon + \gamma\epsilon \le 2\gamma\epsilon$$
(5.2)

 $\Rightarrow H(x) \in \bar{B}$  also  $H(\bar{B}) \subseteq \bar{B}$  Selbstabbildung von  $\bar{B}$  auf  $\bar{B}$ . Seien  $x, x' \in \bar{B}$ 

$$H(x) - H(x') = x - (DG|_{v})^{-1}G(x) - x' + (DG|_{v})^{-1}G(x')$$

$$= x - x' - (DG|_{v})^{-1}(G(x) - G(x'))$$

$$= (DG|_{v})^{-1}DG|_{v}(x - x') - (DG|_{v})^{-1} \int_{0}^{1} DG|_{x'+t(x-x')}(x - x') dt$$

$$= (DG|_{v})^{-1} \int_{0}^{1} (DG|_{v} - DG|_{x'+t(x-x')})(x - x') dt$$
(5.2')

$$\Rightarrow ||H(x) - H(x')|| \le \gamma L(2\gamma\epsilon) ||x - x'|| \le \frac{1}{2} ||x - x'||$$

also H Kontraktion auf  $\bar{B}$ .  $\overset{\mathrm{BFPS}}{\Rightarrow}$  es existiert eindeutiger Fixpunkt  $u \in \bar{B}$ . Mit Störungssatz ?? ist  $DG|_u$  invertierbar:

$$DG|_{u} = \underbrace{DG|_{v}}_{"A"} + \underbrace{\left(DG|_{u} - DG|_{v}\right)}_{"B"}$$

und

$$||(DG|_v)^{-1}(DG|_u - DG|_v)||_{X;X} \le \gamma L(2\gamma\epsilon) \le \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow ||(DG|_u)^{-1}||_{Y;X} \le \frac{1}{1 - \frac{1}{2}}\gamma = 2\gamma$$

$$\begin{aligned} u - x &= H(u) - x \\ &= u - (DG|_v)^{-1}G(u) - x \end{aligned}$$

$$= (DG|_v)^{-1}(DG|_v)(u - x) - (DG|_v)^{-1}\left(G(x) + \int_0^1 DG|_{x+t(u-x)}(u - x) dt\right)$$

$$= (DG|_v)^{-1}\left[-G(x) - \int_0^1 (DG|_v - DG|_{x+t(u-x)})(u - x) dt\right]$$

$$\Rightarrow \|u - x\| \le \gamma[\|G(x)\| + L(2\gamma\epsilon)\|u - x\|]$$

$$\Rightarrow \underbrace{(1 - \gamma L(2\gamma\epsilon))\|u - x\|} \le \gamma \|G(x)\| \quad \Rightarrow \quad \|u - x\| \le 2\gamma \|G(x)\|$$

Dieser Satz ist für unser  $(P(\mu))$  anwendbar wegen der Annahme der Wohlgestelltheit der Linearisierungen (5.1):

**Korollar 5.5** (Lokale Existenz und Eindeutigkeit für  $(P(\mu))$ ) Sei  $u_N(\mu)$  eine Lösung für  $(P_N(\mu))$ . Setze duale Norm des Residuums

$$\epsilon := \|F(u_N)\|_{X'} = \|a(u_N, u_N, \cdot; \mu) + b(u_N, \cdot) - f(\cdot)\|_{X'}$$
(5.3)

und verallgemeinerte inf-sup Konstante

$$\beta_{u_N}(\mu) := \|(DF|_{u_N})^{-1}\|_{X' \cdot X}^{-1} \ge \beta(\mu) > 0$$

und  $L_{DF} := 2\gamma_a \in \mathbb{R}$  Lipschitz-Konstante von DF bzgl.  $v: ||DF|_u - DF|_v|| \le L_{DF} ||u - v||$ . Falls

$$\frac{8\epsilon\gamma_a}{\beta_{u_N}^2(\mu)} \le 1$$

so existiert eindeutige  $u \in B(u_N, \frac{2\epsilon}{\beta_{u_N}})$  Lösung von  $(P(\mu))$ .

Beweis.  $L_{DF} = 2\gamma_a$  ist tatsächlich Lipschitz-Konstante, denn

$$(DF|_{u} - DF|_{v})(h)(w) = |2a(u,h,w) + b(h,w) - 2a(v,h,w) - b(h,w)|$$

$$= |2a(u - v,h,w)| \le 2\gamma_{a}||u - v|||h|||w||$$

$$\Rightarrow ||DF|_{u} - DF|_{v}||_{X,X'} = \sup_{h \in X} \sup_{w \in X} \frac{|(DF|_{u} - DF|_{v})(h)(w)|}{||h|||w||} \le 2\gamma_{a}||u - v||$$

Überprüfe Bedingung von Satz 5.4 mit G = F,  $v = u_N$ : F ist  $C^1$  Abbildung (DF stetig auf X)  $DF|_{u_N} \in L(X,X')$  Isomorphismus nach Annahme.

$$\epsilon = \|F(u_N)\|_{X'}$$

$$\gamma := \|(DF|_{u_N})^{-1}\|_{X';X} = \frac{1}{\beta_{u_N}}$$

$$L(\alpha) := \sup_{x \in \bar{B}(u_N,\alpha)} \|DF|_{u_N} - DF|_x\|_{X;X'}$$

$$\leq \sup_{x \in \bar{B}(u_N,\alpha)} L_{DF}\|u_N - x\| = L_{DF}\alpha = 2\gamma_a\alpha$$

$$2\gamma L(2\gamma\epsilon) \leq 2\gamma L_{DF} \cdot 2\gamma\epsilon = \frac{4L_{DF}\epsilon}{\beta_{u_N}^2} = \frac{8\epsilon\gamma_a}{\beta_{u_N}^2} \leq 1$$

 $\stackrel{5.4}{\Rightarrow}$  existiert eindeutige  $u \in \bar{B}(u_N, 2\gamma\epsilon)$  Lösung von F(u) = 0.

**Bemerkung.** Mit untere Schranke  $0 < \beta_{LB}(\mu) \le \beta_{u_N}(\mu)$  hat man mit obigem also auch Fehlerschätzer  $||u - u_N|| \le \frac{2\epsilon}{\beta_{LB}}$ . Dies lässt sich jedoch noch wesentlich verbessern und Effektivitäten beweisen:

Satz 5.6 (A-posteriori Fehlerschätzer und Effektivitätsschranke)

Sei  $u_N$  Lösung von  $(P_N(\mu))$  aus Definition ?? und  $\beta_{LB} \leq \beta_{u_N}$ ,  $\epsilon$  aus (5.3) duale Norm des Residuums,  $\epsilon := ||F(u_N; \mu)||_{X'}$ . Sei

$$\tau := \frac{4\epsilon L_{DF}}{\beta_{LB}^2} = \frac{8\epsilon \gamma_a}{\beta_{LB}^2} \le 1$$

und u eindeutige Lösung von  $\left(P(\mu)\right)$  in  $B(u_N, \frac{2\epsilon}{\beta_{u_N}})$  gemäß Korollar ??. Dann gilt

$$||u - u_N|| \le \Delta_N := \frac{\beta_{LB}}{2L_{DF}} (1 - \sqrt{1 - \tau})$$
$$\eta_N := \frac{\Delta_N}{||u - u_N||} \le 4 \frac{\gamma_{DF}(u_N)}{\beta_{LB}}$$

mit  $L_{DF} = 2\gamma_a$  und

$$\gamma_{DF} := 2\gamma_a \|u_N\| + \gamma_b \ge \|DF|_{u_N}\|_{X;X'}$$

Bemerkung.

•  $\beta_{LB}$  im Zähler sieht zunächst seltsam aus. Weil  $\tau \in [0,1]$  ist  $(1-\sqrt{1-\tau}) \in [0,1]$ , also insbesondere  $\sqrt{(\cdot)}$  wohldefiniert und

$$\Delta_N \le \frac{\beta_{LB}}{2L_{DF}}\tau = \frac{\beta_{LB}}{2L_{DF}} \cdot \frac{4\epsilon L_{DF}}{\beta_{LB}^2} = \frac{2\epsilon}{\beta_{LB}}$$
 (5.4)

Also gewohnte Struktur: Residuum durch Stabilitätskonstante, jedoch Faktor 2.

Beweis. Ähnlich zu 5.4, statt festem Radius betrachte Kugel mit variablem Radius  $\alpha$ . Weil DF Lipschitz-stetig, ist  $H(x) = x - (DF|_{u_N})^{-1}H(x)$  Kontraktion auf  $B(u_N,\alpha)$  falls  $\alpha \leq \frac{\beta_{LB}}{2L_{DF}} = \frac{\beta_{LB}}{4\gamma_a} =: \hat{\alpha}$ :

Für  $x, x' \in B(u_N, \alpha)$  ist mit (5.2')

$$||H(x) - H(x')|| \stackrel{(5.2')}{\leq} \underbrace{\gamma}^{\leq \frac{1}{\beta_{LB}}} \underbrace{L(\alpha)}_{\leq L_{DF}} \leq \frac{1}{\beta_{LB}} \cdot L_{DF} \cdot \frac{\beta_{LB}}{2L_{DF}} ||x - x'|| = \frac{1}{2} ||x - x'||$$

Suche nun Bedingung für  $\alpha$  sodass H Selbstabbildung auf  $B(u_N,\alpha)$ . Mit (5.2) folgt für  $x \in B(u_N,\alpha)$ 

$$||H(x) - u_N|| \le \underbrace{\gamma}_{\le \frac{1}{\beta_{LB}}} \left( \int_0^1 ||DF|_{u_N} - DF|_{u_N + t(x - u_N)}||_{X;X'} \right) \underbrace{||x - u_N||}_{\le \alpha} + \gamma \cdot \epsilon$$

$$\le \frac{1}{\beta_{LB}} L_{DF} \alpha^2 + \frac{1}{\beta_{LB}} \epsilon$$

Falls also

$$\frac{L_{DF}}{\beta_{LB}}\alpha^2 + \frac{\epsilon}{\beta_{LB}} \le \alpha \tag{5.5}$$

so ist H Selbstabbildung.

$$(5.6) \Leftrightarrow \alpha^{2} - \frac{\beta_{LB}}{L_{DF}} \alpha + \frac{\beta_{LB}}{L_{DF}} \cdot \frac{\epsilon}{\beta_{LB}} \leq 0$$

$$\Leftrightarrow \alpha \in [\alpha_{-}, \alpha_{+}] \text{ mit } \alpha_{\pm} := \frac{\beta_{LB}}{2L_{DF}} \pm \sqrt{\frac{\beta_{LB}^{2}}{4L_{DF}^{2}} - \frac{\epsilon}{L_{DF}}}$$

$$\alpha_{\pm} = \hat{\alpha} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{\epsilon}{L_{DF} \hat{\alpha}^{2}}} \right) = \hat{\alpha} (1 \pm \sqrt{1 - \tau})$$

weil

$$\frac{\epsilon}{L_{DF}\hat{\alpha}^2} = \frac{\epsilon}{L_{DF}} \cdot \frac{4L_{DF}^2}{\beta_{LB}^2} = \frac{4L_{DF}}{\beta_{LB}^2} \epsilon = \tau \le 1$$

also  $\alpha_{\pm}$  wohldefiniert.

Für  $\alpha \in [\alpha, \hat{\alpha}]$  ist H Selbstabbildung und Kontraktion. Für kleinstes  $\alpha = \alpha_-$  erhalte beste Schranke, also ex.  $u \in B(u_N, \alpha_-)$  mit

$$||u - u_N|| \le u_N = \alpha_-$$

Für Effektivitätsschranke setze  $e:=u-u_N.$  Sei  $v_r\in X$  Riesz-Repräsentant des Residuums

$$\langle v_r, v, = \rangle F(u_N)(v)$$

Benötigt Fehler-Residuums-Beziehung für quadratisches Problem

$$F(u_N) = a(u_N, u_N, \cdot) - b(u_N, \cdot) - \underbrace{f(\cdot)}_{=a(u, u, \cdot) - b(u, \cdot)}$$

$$= 2a(u_N, u_N, \cdot) - 2a(u_N, u, \cdot) - a(u_N, u_N, \cdot)$$

$$+ 2a(u_N, u, \cdot) - a(u, u, \cdot) - b(u - u_N, \cdot)$$

$$= -2a(u_N, e, \cdot) - b(e, \cdot) - a(e, e, \cdot)$$

$$= -DF|_{u_N}(e) - a(e, e, \cdot)$$

$$\Rightarrow ||v_r||^2 = \langle v_r, v_r, = \rangle F(u_N)(v_r) = -DF|_{u_N}(e)(v_r) - a(e, e, v_r)$$

$$\leq \gamma_{DF}(u_N) ||e|| ||v_r|| + \gamma_a ||e|| ||v_r||$$

$$\Rightarrow ||v_r|| \leq \gamma_{DF}(u_N) ||e|| + \gamma_a ||e||^2$$

Mit 
$$||v_r|| = \epsilon$$
 und  $\Delta_N \stackrel{(5.4)}{\leq} \frac{2\epsilon}{\beta_{LB}}$  folgt

$$\Delta_N \le \frac{2\|v_r\|}{\beta_{LB}} \le \frac{2}{\beta_{LB}} \gamma_{DF} \|e\| + \frac{2}{\beta_{LB}} \gamma_a \underbrace{\|e\|^2}_{<\Delta_N \cdot \Delta_N}$$

Wegen

$$\frac{2}{\beta_{LB}} \gamma_a \Delta_N \leq \frac{2\gamma_a}{\beta_{LB}} \cdot \frac{2\epsilon}{\beta_{LB}} = \frac{4\gamma_a \epsilon}{\beta_{LB}^2} = \frac{1}{2}\tau \leq \frac{1}{2}$$

folgt

$$\Delta_N \le \frac{2}{\beta_{LB}} \gamma_{DF} \|e\| + \frac{1}{2} \Delta_N \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2} \Delta_N \le \frac{2}{\beta_{LB}} \gamma_{DF} \|e\|$$
$$\Rightarrow \frac{\Delta_N}{\|e\|} \le \frac{4\gamma_{DF}(u_N)}{\beta_{LB}}$$

Bemerkung.

• Lokale Existenz und Eindeutigkeit und Fehlerschranken gilt analog für allgemeinere Nichtlinearitäten F, welche Lipschitz-stetige Ableitungen besitzen. Nur die Effektivitätsschranke in 5.6 verwendet die Struktur des quadratischen nichtlinearen Problems.

- Ausgabe-Fehlerschranken sind einfach möglich analog zu  $\Delta_{N,s}$  aus §3. Auch verbesserte Abschätzung mittels geeigneten dualen Problems ist möglich.
- Berechnung von  $\beta_{LB}$  durch SCM-ähnliche Techniken möglich, siehe [VPP03].
- Falls PDE linear, aber Ausgabe quadratisch nichtlinear, lässt sich ein erweitertes Hilfsproblem formulieren, welche linear, inf-sup-stabil, symmetrisch ist und identische Ausgabe wie Originalproblem mittels geeignetem linearen Ausgabefuntionals liefert.  $\Rightarrow$  Techniken aus §3 und §4 anwendbar. Damit z.B. Fehlerfunktionale  $s(\mu) = \int_{\Omega} (u(\mu) u_d)^2$  oder Variationen oder Energien in verschiedenen Versionen behandelbar.
  - Referenz: [HP07]: "Reduced basis approximation and a posteriori error estimation for stress intensity factors", IJNME, 72, 1219-1259, 2007.
- Falls PDE polynomiell in u der Ordnung p, lässt sich eine p+1 Multilinearform-Formulierung der schwachen Form finden und Techniken aus §5 analog anwenden. Problem wird für  $p \gg 3$  jedoch die Offline-Online-Zerlegung (...???) weil Komponenten-Tensoren der Stufe p+1, also sind Offline Datenmengen und Assemblierungskosten  $\mathcal{O}(Q_aN^{p+1})$ .
- Falls PDE nichtpolynomiell nichtlinear, kann mit Hilfe der EI ein nichtlineares reduziertes Problem formuliert werden. Eine Variante ist die Empirische Operatorinterpolation in
  - [HOR08]: Haasdonk, Ohlberger, Rozza: A Reduced Basis Method for Evolution Schemes with Parameter-Dependent Explicit Operators, ETNA, 32:145-161, 2008.
  - [DHO12]: Drohmann, Haasdonk, Ohlberger: Reduced Basis Approximation for Nonlinear Parametrized Evolution Equations based on Empirical Operator Interpolation, SJSC, 34:A937-A969, 2012.

# 6 Zeitabhängige Probleme

#### Motivation:

Anfangs-Randwertprobleme, z.B. Wärmeleitung. Suche  $u(x,t), x \in \Omega, t \in [0,T]$ 

$$\partial_t u - \Delta u = q$$
 in  $\Omega \times (0,T)$   
 $u(x,t) = g_D(x,t)$  auf  $\partial \Omega \times (0,T)$   
 $u(x,0) = u_0(x)$  in  $\Omega$ 

#### Numerischer Ansatz:

Zeitdiskretisierung: Wähle  $K \in \mathbb{N}, \ \Delta t := \frac{T}{K}$ 

$$t^k := k \cdot \Delta t, \quad k = 0, \dots, K$$

Wähle  $X\subseteq Y:=L^2(\Omega)$  Lösungsraum bezüglich Ortsraum, z.B.  $X=L^2(\Omega)$  oder  $X=H^1_0(\Omega)$  oder  $X=\operatorname{span}(\mathbbm{1}_{e_i})_{i=1}^H$  Finite-Volumen-, oder  $X=\operatorname{span}(\psi_i)_{i=1}^H$  Finite-Elemente-Raum, etc.

Suche Lösungssequenz  $u = (u^k)_{k=0}^K \in (X)^{K+1}$  mit  $u^k(x) \approx u(x,t^k)$ . Referenzen:

- Für PDE-Diskretisierung siehe NUMPDE14/15.
- Für Folgende RB-Behandlung siehe auf S. 8 genanntes Tutorial.

Bemerkung. Statt variationeller Formulierung betrachte im Folgenden operatorbasierte Formulierung, dies erfasst auch Finite-Differenzen oder Finite-Volumen Diskretisierungen. Alles Folgende könnte auch durch Variationsformulierung ausgedrückt werden.

**Definition 6.1** (Volles Evolutions problem  $\big(E(\mu)\big))$ 

Sei X Hilbertraum,  $\mu \in \mathcal{P}$ :  $u(\mu) = (u^k(\mu))_{k=0}^K \in (X)^{K+1}$  Lösungen von

$$\mathcal{L}_I^k(\mu)u^{k+1} = \mathcal{L}_E^k(\mu)u^k + b^k(\mu)$$
$$u^0 := P_X(u_0)$$

mit  $\mathcal{L}_{I}^{k}$ ,  $\mathcal{L}_{E}^{k} \in L(X)$ ,  $P_{X}: Y \to X$  beliebige stetige Projektion.

# Bemerkung.

- Wir verzichten hier wieder auf Ausgabefunktionale.
- Obiges erfasst allgemeine implizite/explizite Zeitdiskretisierung wie impliziter/expliziter Euler oder Crank-Nicolson-Verfahren für parabolische oder hyperbolische DGL.
- $\mathcal{L}_{I}^{k}$ ,  $\mathcal{L}_{E}^{k}$ ,  $b^{k}$  hängen typischerweise von  $\Delta t$  ab.

# Annahmen an Operatoren:

- $\mathcal{L}_I^k$ ,  $\mathcal{L}_E^k$  seien stetig mit Konstanten  $\gamma_I^k(\mu)$ ,  $\gamma_E^k(\mu)$  und uniform in t,  $\mu$ , d.h.  $\gamma_I^k(\mu) \leq \bar{\gamma}$ ,  $\gamma_E^k(\mu) \leq \bar{\gamma}_E$ .
- $\mathcal{L}^k_I$ sei uniform koerziv bzgl.  $\mu$  und k,d.h. ex.  $\bar{\alpha}_I,\,\alpha_I^k(\mu)$  mit

$$0 < \bar{\alpha}_I \le \alpha_I^k(\mu) := \inf_v \frac{\langle \mathcal{L}_I^k v, v \rangle_X}{\|v\|^2}$$

- $b^k$  seien uniform beschränkt  $||b^k(\mu)|| \leq \bar{\gamma}_b \ \forall k, m.$
- $\mathcal{L}_I^k,\,\mathcal{L}_E^k$  seien separierbar parametrisch mit zeitunabhängigen Komponenten

$$\mathcal{L}_{I}^{k}(\mu) = \sum_{q=1}^{Q_{I}} \Theta_{I,q}^{k}(\mu) \mathcal{L}_{I,q}, \quad \mathcal{L}_{I,q} \in L(X)$$

analog für  $\mathcal{L}_E$ ,  $b^k$ ,  $u_0$ .