



FACHBEREICH 10
MATHEMATIK UND
INFORMATIK

Modellreduktion und partielle Differentialgleichungen

Mitschrift der Tafelnotizen

Tobias Wedemeier

5. Januar 2016
gelesen von
Dr. Smetana

Hierbei handelt es sich um eine Mitschrift der Tafelnotizen von **Dr. Smetana**, WWU Münster, aus der Vorlesung **Modellreduktion und partielle Differentialgleichungen** im Wintersemester 2015/16. Dies ist kein Skript der Vorlesung und keine eigene Arbeit des Autors.

Für Fehler in der Mitschrift wird keine Haftung übernommen. Hinweise auf Fehler sind gerne gesehen, hierfür kann man mich in der Uni ansprechen oder alternativ eine e-Mail an: tobias.wedemeier@gmx.de
Auch ist eine Mitarbeit über Github möglich.

Wenn Teile aus der Vorlesung selber fehlen, können diese gerne an meine e-Mail versandt werden. Ich werde diese dann einarbeiten.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Motivation	1
1.1	Parameterabhängige PDGL	1
1.2	Definition (schwache Formulierung in Hilberträumen)	1
1.3	Definition (hochdimensionales, diskretes Modell)	1
1.4	Parameterabhängige Lösungsmenge	2
1.5	Beispiel	2
1.6	Definition (reduziertes Modell)	2
1.7	Bemerkung (Begrifflichkeit)	2
1.8	Organisation der Vorlesung	3
2	Grundlagen	3
2.1	Lineare Funktionalanalysis in Hilberträumen	3
2.1.1	Lineare Operatoren	3
2.1	Definition	3
2.2	Beispiele	4
2.3	Lemma	4
2.4	Definition	4
2.5	Definition	4
2.6	Beispiel	5
2.7	Satz	5
2.8	Folgerung	5
2.9	Satz	5
2.10	Folgerung / Beispiel:	6
	Definition 2.11	6
2.12	Bemerkung	7
2.13	Satz	7
2.14	Satz	7
2.1.2	Sobolevräume	8
2.15	Bemerkung	8
2.16	Definition	8
2.17	Definition	8
2.18	Lemma	8
2.19	Beispiel	8
2.20	Beispiel	8
2.21	Definition	8
2.22	Bemerkung	9
2.23	Beispiel	9
2.24	Satz	9
2.25	Definition	9
2.26	Satz	9
2.27	Satz	9
2.28	Satz	9
2.29	Satz	10
2.1.3	Schwache Formulierung elliptischer Randwertprobleme	10
2.30	Definition	10
2.31	Satz	10
2.32	Bemerkung	11
2.33	Bemerkung	11
2.34	Definition	11

2.1.4	Regularität	11
2.35	Satz	12
2.36	Bemerkung	12
2.2	Ritz-Galerkin Verfahren und abstrakte Fehlerabschätzungen	12
2.37	Definition	12
2.38	Bemerkung	12
2.39	Satz	12
2.40	Bemerkung	13
2.41	Beispiel	13
2.42	Folgerung	13
2.3	Finite Elemente Verfahren	13
2.43	Definition	14
2.44	Definition	14
2.45	Lemma	14
2.46	Definition	15
2.47	Definition	15
2.48	Beispiel	15
2.49	Bemerkung	15
2.50	Definition	16
2.51	Definition	16
2.52	Satz	16
2.53	Bemerkung	16
2.54	Bemerkung	17
3	Reduzierte Basis Methoden für lineare, koerzive Probleme	18
3.1	Parameterabhängigkeit	18
3.1	Definition	18
3.2	Bemerkung	18
3.3	Defintion	18
3.4	Lemma	18
3.5	Definition	19
3.6	Bemerkung	19
3.7	Definition	19
3.8	Folgerung	19
3.9	Definition	19
3.10	Bemerkung	19
3.2	Reduzierte Basisverfahren	19
3.11	Definition	19
3.12	Bemerkung	20
3.13	Definition	20
3.14	Bemerkung	20
3.15	Bemerkung	20
3.16	Folgerung	20
3.17	Folgerung	20
3.18	Folgerung	21
3.19	Satz	21
3.20	Bemerkung	22
3.21	Korollar	22
3.22	Bemerkung	22
3.23	Folgerung	23
3.24	Bemerkung	23
3.25	Satz	23

3.26 Satz	23
3.27 Bemerkung	24
3.28 Folgerung	24
3.3 Offline/Online Zerlegung des RB-Modells	25
3.29 Bemerkung	25
3.30 Definition	25
3.31 Folgerung	26
3.32 Bemerkung	26
3.33 Bemerkung	26
3.4 A posteriori Fehlerschätzer	27
3.4.1 A posteriori Fehlerschranken und Effektivität	27
3.34 Lemma	27
3.35 Satz	27
3.36 Folgerung	28
3.37 Bemerkung	28
3.38 Bemerkung	28
3.39 Satz	28
3.40 Folgerung	29
3.41 Bemerkung	29
3.42 Folgerung	29
3.34 Satz	29
3.44 Satz	30
3.45 Bemerkung	31
3.4.2 Offline/Online-Zerlegung des Fehlerschätzers	31
3.46 Lemma	32
3.47 Lemma	32
3.48 Satz	33
3.49 Satz	33
3.50 Satz	34
3.51 Satz	35
3.52 Bemerkung	35
5.53 Bemerkung	35
3.54 Bemerkung	35
3.55 Bemerkung	35
3.56 Bemerkung	36
4 Basiskonstruktion	37
4.1 Definition	37
4.2 Bemerkung	37
4.1 Greedy-Algorithmus	38
4.3 Definition	39
4.4 Bemerkung	39
4.5 Bemerkung	39
4.6 Bemerkung	39
4.7 Bemerkung	40
4.1.1 Konvergenzraten des Greedy-Algorithmus	40
4.8 Satz	40
4.9 Bemerkung	41
4.10	41
4.1.2 Praktische Realisierung	41
4.11 Bemerkung	41
4.12 Bemerkung	41

4.13	Bemerkung	41
4.14	Bemerkung	42
4.2	Proper Orthogonal Decomposition (POD)	42
4.2.1	Exkurs Spektraltheorie/Motivation	42
4.15	Lemma	42
4.16	Definition	42
4.17	Beispiele	43
4.18	Satz	43
4.19	Satz	44
4.20	Satz	44
4.2.2	Kontinuierliche POD	44
4.21	Satz	44
4.22	Satz	45
4.23	Folgerung	46
4.2.3	POD im Diskreten Setting	47
4.24	Satz	47
4.25	Beispiel	47
4.26	Beispiel	47
4.27	Bemerkung	47
4.28	Definition	48
4.29	Definition	48
4.30	Definition	48
4.31	Satz	48
4.32	Satz	48
4.33	Folgerung	52
4.34	Bemerkung	54
4.35	Satz	54
4.36	Bemerkung	54
4.37	Lemma	55

1 Einleitung und Motivation

1.1 Parameterabhängige PDGL

Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ ein polygonales Gebiet. Zu einem Parametervektor $\mu \in P \subseteq \mathbb{R}^d$ aus einer Menge von 'erlaubten' Parametern ist eine Funktion, z.B. 'Temperatur'

$$u(\mu) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

gesucht, so dass $-\nabla(\kappa(\mu)\nabla u(\mu)) = q(\mu)$ in Ω , wobei $u(\mu) = 0$ auf $\partial\Omega$, mit $\kappa(\mu) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ dem 'Wärmeleitkoeffizient' und $q(\mu)$ eine 'Wärmequelle', z.B. $q(\mu) = 1$. Weiter kann eine Ausgabe erwünscht sein, z.B.

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

die mittlere Temperatur auf Ω_s .

1.2 Definition (schwache Formulierung in Hilberträumen)

Sei X ein reeller Hilbertraum. Zu $\mu \in P$ ist gesucht ein $u(\mu) \in X$ und eine Ausgabe $s(\mu) \in \mathbb{R}$, so dass

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

für eine Bilinearform $b(\cdot, \cdot; \mu) : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ und linearen Funktionalen $f(\cdot; \mu), l(\cdot; \mu) : X \rightarrow \mathbb{R}$. Die schwache Formulierung für Beispiel 1.1 lautet:

$$X := H_0^1(\Omega) = \left(f \in L^2(\Omega) : + \frac{d}{dx_1} f \in L^2(\Omega), f|_{\partial\Omega=0} \right)$$

Dann kann man die Bilinearform über

$$b(u(\mu), v; \mu) := \int_{\Omega} \kappa(\mu) \nabla u(\mu) \nabla v dx; \quad f(v; \mu) := \int_{\Omega} \lim_{\Omega} q(\mu) v dx$$

ausdrücken und

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

ABER: Für sehr wenige PDGL's können wir die Lösung analytisch bestimmen. Daher sind wir an einer numerische Approximation interessiert. Ein weit verbreitetes Diskretisierungsverfahren ist die Finite Elemente Methode. Diese Methode basiert auf obiger schwacher Formulierung.

1.3 Definition (hochdimensionales, diskretes Modell)

Sei $X_h \subseteq X$ mit $\dim(X_h) = N_h < \infty$. Der Index h bezeichnet hier die Gitterweite. Zu $\mu \in P$ ist gesucht ein $u_h(\mu) \in X_h$ und eine Ausgabe $s_h(\mu) \in \mathbb{R}$, so dass

$$b(u_h(\mu), v_h; \mu) = f(v_h; \mu), \quad s_h(\mu) = l_h(v_h(\mu); \mu) \quad \forall v_h \in X_h. \quad (1.1)$$

Anwendungen für die Standarddiskretisierungsverfahren sehr teuer oder zu teuer sind:

many-query context

- Parameterstudien
- Design
- Parameteridentifikation / inverse Probleme

- Optimierung
- Statistische Analyse

schnelle Simulationsantwort

- Echtzeit-Steuerung technischer Geräte
- interaktive Benutzeroberflächen

1.4 Parameterabhängige Lösungsmenge

Sei $X := \{u(\mu) : \mu \in P\} \subseteq P$ für $P \in \mathbb{R}^p$ ist die durch μ parametrisierte Lösungsmenge. X ist im Allgemeinen unendlichdimensional. \Rightarrow Motivation für die Suche nach einem 'niedrigdimensionalen' Teilraum $X_N \subseteq X$ zur Approximation von M und einer Approximation $u_N(\mu) \approx u(\mu)$, $u_N \in X_N$. Eine Möglichkeit eine reduzierte Basis zu generieren besteht darin geschickt Parameterwerte $\mu_1, \dots, \mu_N \in P$ zu wählen und den Raum als $X_N := \text{span}\{u(\mu_1), \dots, u(\mu_N)\}$ zu definieren. Eine Lösung $u(\mu_i)$ für einen Parameterwert $\mu \in P$ wird auch **Snapshot** genannt.

1.5 Beispiel

Gesucht ist $u(\cdot; \mu) \in C^2([0, 1])$ mit $(1 + \mu)u'' = 1$ auf $(0, 1)$ und $u(0) = u(1) = 1$ für den Parameter $\mu \in P := [0, 1] \subseteq \mathbb{R}$.

Snapshots:

$\mu_1 = 0 \Rightarrow u_1 := u(\cdot; \mu_1) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}x + 1$, $\mu_2 = 1 \Rightarrow u_2 := u(\cdot; \mu_2) = \frac{1}{4}x^2 - \frac{1}{4}x + 1$ und $X_N := \text{span}\{u_1, u_2\}$. Dann ist die reduzierte Lösung $u_N(\mu) \in X_N$ gegeben durch

$$u_N(\mu) = \alpha_1(\mu)u_1 + \alpha_2(\mu)u_2,$$

mit $\alpha_1 = \frac{2}{\mu+1} - 1$ und $\alpha_2 = 2 - \frac{2}{\mu-1}$. Diese erfüllt folgende Fehleraussage und ist somit exakt:

$$\|u_N(\mu) - u(\mu)\|_\infty = \sup_{\mu \in [0,1]} |u_N(x; \mu) - u(x; \mu)| = 0$$

Da $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ und $0 \leq \alpha_1, \alpha_2 \leq 1$ ist M die Menge der Konvexkombinationen von u_1 und u_2 .

1.6 Definition (reduziertes Modell)

Sei $X_N \subseteq X$ ein reduzierter Basisraum mit $\dim(X_N) < \infty$. Zu $\mu \in P$ ist gesucht ein $u_N(\mu) \in X_N$ und eine Ausgabe $s_N(\mu) \in \mathbb{R}$, so dass

$$b(u_N(\mu), v_N; \mu) = f(v_N; \mu), \quad s_N(\mu) = l_N(u_N(\mu); \mu) \quad \forall v_N \in X_N \quad (1.2)$$

1.7 Bemerkung (Begrifflichkeit)

Zusammengefasst unterscheiden wir zwischen den folgenden drei Modellen:

- 1) Eine partielle DGL ist ein **analytisches Modell**, welches die analytische Lösung $u(\mu) \in X$ in einem (typischerweise) ∞ -dimensionalen Funktionenraum charakterisiert ist.
- 2) Ein **hochdimensionales, diskretes Modell** ist ein Berechnungsverfahren zur Bestimmung einer Näherung $u_h(\mu) \in X_h$, wobei X_h ein hochdimensionaler Funktionenraum ist. Beispiele sind **Finite Elemente** oder **Finite Volumenräume** und typischerweise hat X_h eine Dimension von mindestens 10^5 .

- 3) Ein **reduziertes Modell** ist ein Berechnungsverfahren zur Bestimmung einer Näherung $u_N(\mu) \in X_N$ in einem sehr problemangepassten und daher niedrigdimensionalen Raum von typischerweise $\dim X_N < 100$.
- 4) **Modellreduktion** beschäftigt sich mit Modellen der Erzeugung von reduzierten Modellen aus hochdimensionalen, diskreten (oder auch analytischen) Modellen und Untersuchungen ihrer Eigenschaften.

1.8 Organisation der Vorlesung

Zentrale Fragen:

- **Reduzierte Basis:** Wie kann ein möglichst kompakter Teilraum konstruiert werden?
- **Reduziertes Modell:** Existenz von reduzierten Lösungen $u_N(\mu)$? Wie kann eine reduzierte Lösung $u_N(\mu)$ berechnet werden?
- **Effizienz:** Wie kann $u_N(\mu)$ schnell berechnet werden?
- **Stabilität:** Wie kann die Stabilität des reduzierten Modells für wachsendes N garantiert werden?
- **Approximationsgüte:** Warum können wir erwarten, dass eine relativ kleine Anzahl von Basisfunktionen ausreicht?
- **Fehlerschätzer:** Kann der Fehler des reduzierten zum vollen Modell beschränkt werden?
- **Effektivität:** Kann garantiert werden, dass der Fehlerschätzer den Fehler nicht beliebig überschätzt?

Vorläufige Gliederung (bis Weihnachten)

- 1) Einleitung / Motivation
- 2) Grundlagen:
 - Kurze Einführung in lineare Funktionalanalysis
 - Kurze Einführung in Finite Elemente
- 3) Reduzierte Basis Methoden für lineare, koerzive Probleme
 - Reduzierte Basis Verfahren
 - Offline-/ Online-Zerlegung
 - Fehlerschätzer
 - Basisgenerierung

2 Grundlagen

2.1 Lineare Funktionalanalysis in Hilberträumen

2.1.1 Lineare Operatoren

2.1 Definition (Hilbertraum)

Sei X ein reeller Vektorraum mit $(\cdot, \cdot) : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ ein Skalarprodukt und induzierter Norm $\|x\| := \sqrt{(x, x)}$, falls X vollständig bzgl. $\|\cdot\|$, ist X ein (reeller) **Hilbertraum** (HR).

2.2 Beispiele (Hilbertraum)

- (1) $X := \mathbb{R}^d$ mit $(x, y) := \sum_{i=1}^d x_i y_i$ ist ein HR.
- (2) $X := L^2(\Omega)$ mit $(x, y) := \int_{\Omega} f(x)g(x)dx$ ist ein HR.
- (3) $X := C^0([0, 1])$ mit $(f, g) := \int_0^1 f(x)g(x)dx$ ist kein HR.

2.3 Lemma

Seien X und Y reelle Vektorräume. Ist die Abbildung $T : X \rightarrow Y$ linear und $x_0 \in X$, so sind äquivalent:

- (1) T ist stetig.
- (2) T ist stetig in x_0 .
- (3) $\sup_{\|x\|_X \leq 1} \|Tx\|_Y < \infty$.
- (4) \exists Konstante (mit $\|Tx\|_Y \leq c \|x\|_X \quad \forall x \in X$)

2.4 Definition (Lineare Operatoren)

Seien X und Y reelle Vektorräume. Wir definieren

$$L(X; Y) := \{T : X \rightarrow Y ; T \text{ ist linear und stetig}\}.$$

Abbildungen in $L(X; Y)$ nennen wir **lineare Operatoren**. Nach Lemma 2.3 (3) ist für jeden Operator $T \in L(X; Y)$ die **Operatornorm** von T definiert durch

$$\|T\|_{L(X; Y)} := \sup_{\|x\|_X \leq 1} \|Tx\|_Y < \infty,$$

oder in kurz $\|T\|$. Es ist $L(X) := L(X; X)$.

2.5 Definition (Spezielle lineare Operatoren)

- (1) $X' := L(X; \mathbb{R})$ ist der **Dualraum** von X . Die Elemente von X' nennen wir auch **lineare Funktionale**.
- (2) Die Menge der kompakten (linearen) Operatoren von X nach Y ist definiert durch

$$K(X; Y) := \left\{ T \in L(X; Y) ; T(\overline{B_1(0)}) \text{ kompakt} \right\}.$$

- (3) Eine lineare Abbildung $P : X \rightarrow X$ heißt (lineare) **Projektion**, falls $P^2 = P$.
- (4) Für $T \in L(X; Y)$ ist $\ker(T) := \{x \in X ; Tx = 0\}$ der **Nullraum** oder **Kern** von T . Aus der Stetigkeit von T folgt, dass $\ker(T)$ ein abgeschlossener Unterraum ist. Der **Bildraum** von T ist $\text{bild}(T) := \{Tx \in Y ; x \in X\}$.
- (5) Ist $T \in L(X; Y)$ bijektiv, so ist $T^{-1} \in L(Y; X)$. Dann heißt T (linear, stetiger) **Isomorphismus**.
- (6) $T \in L(X; Y)$ heißt **Isometrie**, falls

$$\|Tx\|_Y = \|x\|_X \quad \forall x \in X$$

2.6 Beispiel

Sei $g \in L^2(\Omega)$. Dann ist nach der Hölderungleichung durch

$$T_g f := \int_{\Omega} f(x)g(x)dx$$

ein Funktional $T_g \in L^2(\Omega)'$ definiert.

2.7 Satz (Projektionssatz)

Sei X ein Hilbertraum und $A \subseteq X$ nicht leer, abgeschlossen und konvex. Dann gibt es genau eine Abbildung $P : X \rightarrow A$ mit

$$\|x - Px\|_X = \text{dist}(x, A) = \inf_{y \in A} \|x - y\|_X \quad \forall x \in X.$$

Die Abbildung $P : X \rightarrow A$ heißt orthogonale Projektion von X auf A .

Beweis: [Alt, Satz 2.2, S.96]

2.8 Folgerung

Ist $A \subseteq X$ nicht-leer, abgeschlossen und Unterraum, so ist P linear und $Px \in A$ charakterisiert durch $(x - Px, a)_X = 0 \quad \forall a \in A$. Falls $\dim(A) = n < \infty$ und $(\varphi_i)_{i=1}^n$ Orthonormalbasis von A , gilt

$$Px = \sum_{i=1}^n (x, \varphi_i)_X \varphi_i.$$

2.9 Satz (Riesz'scher Darstellungssatz)

Ist X Hilbertraum, so ist $J : X \rightarrow X'$ definiert durch

$$J(v)(w) := (v, w)_X \quad \forall v, w \in X$$

eine stetige, lineare, bijektive Isometrie. Insbesondere existiert zu $l \in X'$ ein eindeutiger **Riesz Repräsentant** $V_l := J^{-1}(l) \in X$ mit $l(\cdot) = (v_l, \cdot)_X$.

Beweis:

C-S-Ungleichung: $|J(v)(w)| \leq \|v\|_X \|w\|_X$. Dann folgt: $J(v) \in X'$ mit

$$\|J(v)\|_{X'} = \sup_{w \in X \setminus \{0\}} \frac{|J(v)(w)|}{\|w\|_X} = \sup_{w \in X \setminus \{0\}} \frac{|(v, w)_X|}{\|w\|_X} \leq \|v\|_X \Rightarrow J \text{ stetig.}$$

Da $|J(v)(v)| = \|v\|_X^2$ folgt:

$$\sup_{w \in X \setminus \{0\}} \frac{|J(v)(w)|}{\|w\|_X} \geq \frac{|J(v)(v)|}{\|v\|_X} = \frac{\|v\|_X^2}{\|v\|_X} = \|v\|_X.$$

Also ist J eine Isometrie und insbesondere ist J injektiv.

Zeige J surjektiv: Sei $l \in X'$, $l \neq 0$, $\text{Kern}(l)$ ist abgeschlossener Teilraum, also existiert $P : X \rightarrow \text{Kern}(l)$ orthogonale Projektion nach Satz 2.7. Sei $v_0 \in X$ mit $l(v_0) = 1$. Setze $v_1 := v_0 - Pv_0 \Rightarrow l(v_1) = l(v_0) = 1$ und $v_1 \neq 0$. Mit Folgerung 2.8:

$$\Rightarrow (w, v)_X = 0 \quad \forall w \in \text{Kern}(l) \Rightarrow v_1 \perp \text{Kern}(l).$$

Für $v \in X$ gilt

$$\underbrace{v - l(v) \cdot v_1}_{\in \ker(l)} + l(v) \cdot v_1$$

und $v - l(v)v_1 \in \ker(l)$ wegen

$$l(v - l(v)v_1) = l(v) - l(v)l(v_1) = 0.$$

Also ist

$$\begin{aligned} (v_1, v)_X &= (\underbrace{v_1, v - l(v)v_1}_{=0, \text{ da } \ker(l) \perp v_1})_X + (v_1, l(v)v_1)_X \\ &= l(v) \|v_1\|_X^2 \\ &\Rightarrow l(v) = \left(\frac{v_1}{\|v_1\|_X^2}, v \right)_X = J \left(\frac{v_1}{\|v_1\|_X^2} \right) (v). \\ &\Rightarrow l \in \text{bild}(J) \Rightarrow J \text{ bijektiv.} \end{aligned}$$

□

2.10 Folgerung / Beispiel:

Mit Hilfe des Rieszschen Darstellungssatz können wir damit $L^2(\Omega)'$ - den Dualraum von $L^2(\Omega)$ - charakterisieren. Wie in 2.6 definieren wir für $g \in L^2(\Omega)$ das Funktional

$$T_g f := \int_{\Omega} f(x) g(x) dx.$$

Definition 2.11 (Bilinearformen)

Seien X_1, X_2 Hilberträume, $b : X_1 \times X_2 \rightarrow \mathbb{R}$ eine Bilinearform.

(1) Falls

$$\gamma := \sup_{u \in X_1 \setminus \{0\}} \lim_{v \in X_2 \setminus \{0\}} \frac{b(u, v)}{\|u\|_{X_1} \|v\|_{X_2}} < \infty$$

so ist b stetig mit Stetigkeitskonstante γ .

(2) Falls $X = X_1 = X_2$, definieren

$$b_s(u, v) = \frac{1}{2}b(u, v) + b(v, u), \quad b_a = \frac{1}{2}b(u, v) - b(v, u) \quad \forall u, v \in X$$

den symmetrischen bzw. antisymmetrischen Anteil von $b = b_s + b_a$.

(3) Falls $X = X_1 = X_2$, b stetig und

$$\alpha := \inf_{u \in X \setminus \{0\}} \frac{b(u, u)}{\|u\|_X^2} > 0$$

heißt b Koerziv mit Stetigkeitskonstante α .

2.12 Bemerkung

(1) $\alpha \in \mathbb{R}$ ist wohldefiniert, denn mit Stetigkeit folgt

$$\frac{b(u, u)}{\|u\|_X^2} \geq -\gamma \frac{\|u\|_X \|u\|_X}{\|u\|_X^2} = -\gamma.$$

(2) b ist koerziv bzgl. $\alpha \Leftrightarrow b_s$ ist koerziv bzgl. α .

2.13 Satz (Operatoren und Bilinearformen)

Seien X_1, X_2 Hilberträume.

(1) Zu $B \in L(X_1, X_2)$ existiert eine eindeutig definierte stetige Bilinearform $b : X_1 \times X_2 \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$b(u, v) = (Bu, v)_{X_2} \quad \forall u \in X_1, v \in X_2. \quad (2.1)$$

(2) Zu $b : X_1 \times X_2 \rightarrow \mathbb{R}$ stetige Bilinearform existiert eindeutiges $B \in L(X_1, X_2)$ welches (2.1) erfüllt.

Beweis:

(1) b definiert durch (2.1) ist bilinear wegen Bilinearität von (\cdot, \cdot) und Linearität von B . Stetigkeit:

$$b(u, v) = (Bu, v)_{X_2} \stackrel{\text{C.S.}}{\leq} \|B\| \|u\|_{X_1} \|v\|_{X_2}$$

daraus folgt $\gamma \leq \|B\| < \infty$.

(2) Sei $u \in X_1$ fest. Dann ist $b(u, \cdot) : X_2 \rightarrow \mathbb{R}$ linear und stetig:

$$\sup_{v \in X_2 \setminus \{0\}} \frac{b(u, v)}{\|v\|_{X_2}} \leq \sup_{v \in X_2 \setminus \{0\}} \frac{\|u\|_{X_1} \|v\|_{X_2}}{\|v\|_{X_2}} \cdot \gamma = \gamma \|u\|_{X_1} < \infty.$$

Daraus folgt $b(u, \cdot) \in X_2'$ und es existiert nach Satz 2.9 ein eindeutiger Riesz-Repräsentant $v_u \in X_2$ mit $b(u, \cdot) = (v_u, \cdot)$. Definiere $B : X_1 \rightarrow X_2$ durch $Bu := v_u \in X_2$. Hiermit (2.1) und Eindeutigkeit klar. Linearität damit klar.

Stetigkeit:

$$\begin{aligned} \|Bu\|^2 &= (Bu, Bu) = (v_u, Bu)_{X_2} = b(u, Bu) \leq \gamma \|u\|_{X_1} \|Bu\|_{X_2} \\ \Rightarrow \|Bu\|_{X_2} &\leq \gamma \|u\|_{X_1} \Rightarrow \sup_{u \in X_1 \setminus \{0\}} \frac{\|Bu\|_{X_2}}{\|u\|_{X_1}} \leq \gamma. \end{aligned}$$

□

2.14 Satz von Lax-Milgram

Sei x HR, $b : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ koerzive, stetige Bilinearform mit Koerzivitätskonstante α . Dann existiert ein eindeutiger Operator $B \in L(X)$ mit

$$b(u, v) = (Bu, v) \quad \forall u, v \in X.$$

Ferner gilt: B ist bijektiv, $B^{-1} \in L(X)$ mit

$$\|B\| \leq \gamma \quad \text{und} \quad \|B^{-1}\| \leq \frac{1}{\alpha}.$$

2.1.2 Sobolevräume

2.15 Bemerkung (Motivation Sobolevräume)

Wie in 1.1 motiviert, eignet sich die sogenannte Schwache Formulierung (s. 1.2) einer PDgl besonders gut um Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen zu untersuchen. Die dazu geeigneten Räume sind die **Sobolevräume**.

2.16 Definition ($L^p_{log}(\Omega)$)

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet. Dann ist der Raum $L^p_{log}(\Omega)$ definiert durch

$$L^p_{log}(\Omega) := \{u \in L^p(K) \mid \forall K \subset \Omega, K \text{ kompakt}\}.$$

2.17 Definition (schwache Ableitung)

Sei $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$ ein Multiindex. Eine Funktion $u \in L^1_{log}(\Omega)$ besitzt eine schwache Ableitung $u_\alpha \in L^1_{log}(\Omega)$, wenn für alle Testfunktionen $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$ gilt

$$\int_{\Omega} u D^\alpha \varphi = (-1)^{|\alpha|} \cdot \int_{\Omega} u^{(\alpha)} \varphi,$$

mit $D^\alpha = D_1^{\alpha_1} \cdots D_d^{\alpha_d}$, $|\alpha| = \alpha_1 + \cdots + \alpha_d$. Wir schreiben dann auch $u^{(\alpha)} = D^\alpha u$ für die schwache Ableitung.

2.18 Lemma

Falls $u \in C^{|\alpha|}(\bar{\Omega})$ und $|\alpha| \geq 1$, gilt: $D^\alpha u = u^{(\alpha)}$, d.h. klassische und schwache Ableitung stimmen überein.

2.19 Beispiel

Sei $\Omega = (-1, 1)$ und $u(x) = |x|$. Dann ist $u'(x) = -1(x \leq 0), 1(x > 0)$ die schwache Ableitung von u .

Beweis:

Es gilt für beliebige $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$:

Foto

2.20 Beispiel

Im Gegensatz zu $|x|$ ist $v(x) = -1(x \leq 0)1(x > 0)$ auf $\Omega = (-1, 1)$ nicht schwach differenzierbar.

2.21 Definition (Sobolevräume)

Seien $m \in \mathbb{N}_0$, $p \in [1, \infty]$ und $u \in L^p_{log}(\Omega)$. Wir nehmen an, dass alle schwachen partiellen Ableitungen $D^\alpha u$ existieren für $|\alpha| \leq m$. Dann definieren wir die **Sobolevnormen** $\|u\|_{H^{m,p}(\Omega)}$, durch

$$\|u\|_{H^{m,p}(\Omega)} = \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_{L^p(\Omega)}^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad \text{falls } 1 \leq p < \infty$$

und für $p = \infty$ als

$$\|u\|_{H^{m,p}(\Omega)} := \max_{|\alpha| \leq m} \lim_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_{L^\infty(\Omega)}.$$

Schließlich definieren wir die **Sobolevräume** $H^{m,p}(\Omega)$ durch

$$H^{m,p}(\Omega) := \left\{ u \in L^p_{log}(\Omega) \mid \|u\|_{H^{m,p}(\Omega)} < \infty \right\}.$$

2.22 Bemerkung

Anstelle von $H^{m,p}(\Omega)$ werden die Sobolevräume in der Literatur auch oft mit $W^{m,p}(\Omega)$ bezeichnet.

2.23 Beispiel

Seien $\Omega = B_{\frac{1}{2}}(0) \subset \mathbb{R}^2$ und $u(x) = \ln |\ln |x||$, $x \in \Omega$. Dann gilt: $u \in H^{1,2}(\Omega)$, aber $u \notin C^0(\Omega)$. D.h. Funktionen in $H^{1,p}(\Omega)$ sind in mehreren Raumdimensionen nicht notwendigerweise stetig.

2.24 Satz (Vollständigkeit von Sobolevräumen)

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet. Dann ist $H^{m,p}(\Omega)$ $1 \leq p \leq \infty$, $m \in \mathbb{N}_0$ mit der in 2.21 definierten Norm ein Banachraum, $H^{m,p}(\Omega)$ ist ein Hilbertraum mit dem Skalarprodukt

$$(u, v)_{H^{m,p}(\Omega)} := \sum_{|\alpha| \leq m} (D^\alpha u, D^\alpha v)_{L^2(\Omega)}.$$

Da wir uns mit Randwertproblemen befassen wollen, ist es notwendig zu klären in welchem Sinne wir bei Sobolevräumen von Randwerten reden können. Da die Funktionen zunächst nur bis auf Nullmengen definiert sind und der Rand eines Gebietes eine Nullmenge darstellt, auf der man L^p -Funktionen beliebig abändern kann. In der folgenden Definition klären wir zunächst was wir unter Nullrandwerten im schwachen Sinne verstehen wollen.

2.25 Definition (schwache Nullrandwerte)

Für $1 \leq p \leq \infty$ und $m \in \mathbb{N}$ definieren wir die Sobolevräume mit Nullrandwerten $H_0^{m,p}(\Omega)$ durch

$$H_0^{m,p}(\Omega) := \overline{C_0^m(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^{m,p}(\Omega)}}.$$

2.26 Satz

Für $1 \leq p < \infty$ ist $H_0^{m,p}(\Omega)$ ein abgeschlossener Teilraum von $H^{m,p}(\Omega)$ und damit ein Banachraum.

Dass aus der Definition von $H_0^{m,p}(\Omega)$ tatsächlich folgt, dass solche Funktionen Randwerte besitzen, drückt der folgende Satz aus.

2.27 Satz (Spursatz)

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Lipschitz-Gebiet und $1 \leq p < \infty$. Dann gibt es einen linearen **Spuroperator** $\tau : H^{1,p}(\Omega) \rightarrow L^p(\partial\Omega)$, so dass für $u \in H^{m,p}(\Omega) \cap C^\infty(\bar{\Omega})$ gilt:

$$\tau u = u|_{\partial\Omega}.$$

Insbesondere gilt für $u \in H_0^{1,p}(\Omega) : \tau u = 0$.

Beweis:

Im Buch von Alt oder von Evans.

2.28 Satz (2. Soblev'scher Einbettungssatz)

Sei $1 \leq p < \infty$, dann gilt:

$$H^{1,p}((a, b)) \hookrightarrow C^0([a, b]),$$

d.h. dass (möglicherweise nach Änderung von Funktionswerten auf einer Nullmenge) Funktionen in $H^{1,p}((a, b))$ stetig sind.

Sei nun $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet und $1 \leq p < \infty$. Dann gilt

$$H_0^{2,p}(\Omega) \hookrightarrow C^0(\Omega), \text{ falls } 2 - \frac{d}{p} > 0.$$

Ist Ω ein Lipschitz-Gebiet, so gilt diese Aussage auch für Sobolevräume ohne Nullrandwerte.

Beweis:

Im Buch von Alt.

2.29 Satz (Poincaré-Friedrichs Ungleichung)

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet mit Durchmesser $D := \text{diam}(\Omega)$ und $1 \leq p < \infty$. Dann gibt es eine Konstante $c_p \leq 2D$, so dass für alle $v \in H_0^{1,p}(\Omega)$ gilt:

$$\|v\|_{L^p(\Omega)} \leq c_p \|\nabla v\|_{L^p(\Omega)}.$$

Beweis:

Siehe Buch von Dziuk.

2.1.3 Schwache Formulierung elliptischer Randwertprobleme

Wir betrachten zunächst die stationäre Wärmeleitgleichung. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet mit glattem Rand und seien $q \in C^0(\Omega)$ und $\kappa \in C^1(\Omega)$ mit $\kappa \geq \kappa_1 > 0$, $\kappa_1 \in \mathbb{R}$ Konstante. Gesucht ist eine Funktion $u \in C^2(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega})$, die sogenannte klassische Lösung, so dass

$$\begin{aligned} -\nabla(\kappa \nabla u) &= q \text{ in } \Omega, \\ u &= 0 \text{ auf } \partial\Omega. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Mit Hilfe von schwachen Ableitungen und den Sobolevräumen können wir nun den klassischen Lösungsbegriff verallgemeinern:

2.30 Definition (schwache Formulierung der stationären Wärmeleitgleichung)

Seien $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Lipschitz-Gebiet, $q \in L^2(\Omega)$ und $\kappa \in L^\infty(\Omega)$ mit $0 < \kappa_1 \leq \kappa$ für eine Konstante $\kappa_1 \in \mathbb{R}$ gegeben. Dann heißt $u \in H_0^{1,p}(\Omega)$ schwache Lösung des Randwertproblems der stationären Wärmeleitgleichung (2.2), falls für alle Testfunktionen $v \in H_0^1(\Omega)$ gilt

$$\int_{\Omega} \kappa(x) \nabla u(x) \nabla v(x) dx = \int_{\Omega} q(x) v(x) dx.$$

2.31 Satz (Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen)

Unter den Voraussetzungen von Def. 2.30 gibt es genau eine schwache Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ des Randwertproblems der stationären Wärmeleitgleichung.

Beweis:

Zunächst wird durch $l(v) := \int_{\Omega} q(x) v(x) dx$ ein lineares Funktional in $(H_0^1(\Omega))'$ definiert, denn

$$\|l(v)\|_{(H_0^1(\Omega))'} = \sup_{v \in (H_0^1(\Omega)) \setminus \{0\}} \frac{(q, v)_{L^2(\Omega)}}{\|v\|_{H^1(\Omega)}} \leq \|q\|_{L^2(\Omega)}.$$

Ferner wird wegen der Poincaré-Friedrichs Ungleichung durch

$$(w, v)_{H_0^1(\Omega)} := \int_{\Omega} \nabla w(x) \nabla v(x) dx$$

ein Skalarprodukt auf dem Hilbertraum $H_0^1(\Omega)$ definiert. Daher existiert nach dem Riesz'schen Darstellungssatz 2.9 ein eindeutiger Riesz-Repräsentant w_l mit $l(\cdot) = (w_l, \cdot)_{H_0^1(\Omega)}$.

Um den Beweis zu schließen, müssen wir noch nachweisen, dass die Bilinearform $b : H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ definiert durch

$$b(w, v) := \int_{\Omega} \kappa(x) \nabla w(x) \nabla v(x) dx$$

die Voraussetzungen des Satzes von Lax-Milgram erfüllt. Wir müssen also zeigen, dass die Bilinearform b stetig und koerziv ist.

Stetigkeit:

$$b(w, v) \leq \|\kappa\|_{L^\infty(\Omega)} \|w\|_{H_0^1(\Omega)} \|v\|_{H_0^1(\Omega)}.$$

Koerzitivität:

$$b(w, v) \geq \kappa_1 \|w\|_{H_0^1(\Omega)}^2.$$

Damit existiert ein bijektiver Operator $B \in L(H_0^1(\Omega))$ mit $b(u, v) = (Bu, v)_{H_0^1(\Omega)}$ und wir definieren die eindeutige Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ des Randwertproblems als $u := B^{-1}w_l$, wobei w_l der eindeutige Riesz-Repräsentant mit $l(\cdot) = (w_l, \cdot)_{H_0^1(\Omega)}$ war. \square

2.32 Bemerkung

Mit der gleichen Beweistechnik lassen sich auch allgemeinere PDgl'en behandeln, wie zum Beispiel das Randwertproblem in Divergenzform

$$\begin{aligned} -\nabla(A(x)\nabla u) + b(x)\nabla u + c(x)u &= q \text{ in } \Omega, \\ u &= 0 \text{ auf } \partial\Omega. \end{aligned}$$

$A(x) \in C^1(\Omega, \mathbb{R}^{d \times d})$, $b(x) \in C^0(\Omega, \mathbb{R}^d)$, $c(x) \in C^1(\Omega)$, wobei die Koeffizienten gewisse Anforderungen erfüllen müssen damit die Koerzitivität der entsprechenden Bilinearform nachgewiesen werden können.

2.33 Bemerkung (Reduktion auf Nullrandwerte)

Zur Betrachtung von allgemeinen Dirichletrandwerten, kann man wie folgt vorgehen. Seien $g_D \in H^1(\Omega)$ und $q \in L^2(\Omega)$, $\kappa \in L^\infty(\Omega)$, $\kappa \geq \kappa_1 > 0$. Dann ist $u \in H^1(\Omega)$ schwache Lösung von $-\nabla(\kappa(x)\nabla u(x)) = q$ in Ω und $u = g$ auf $\partial\Omega$. Wenn gilt $\tilde{u} := u - g_D \in H_0^1(\Omega)$ und für alle $v \in H_0^1(\Omega)$ gilt (2.3). Dabei ist zu bemerken, dass mit der Definition von \tilde{u} (2.3) äquivalent ist zu

$$\int_{\Omega} \kappa(x) \nabla \tilde{u} \nabla v(x) dx = \int_{\Omega} q(x) v(x) dx - \int_{\Omega} \nabla g_D(x) \nabla v(x) dx.$$

Die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung folgt dann daraus, dass durch $l(v) := \int_{\Omega} q(x) v(x) dx - \int_{\Omega} \nabla g_D(x) \nabla v(x) dx$ ein lin. Funktional in $(H_0^1(\Omega))'$ definiert wird.

2.34 Definition (schwache Formulierung)

Seien X reeller Hilbertraum, $b : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige und koerzive Bilinearform mit Stetigkeitskonstante γ und Koerzivitätskonstante α und $l \in X'$. Dann bezeichnen wir mit $u \in X$ die eindeutige Lösung des Problems

$$b(u, v) = l(v) \quad \forall v \in X. \quad (2.3)$$

2.1.4 Regularität

Zur Motivation betrachte in einer Raumdimension die Dgl. $u''(x) = q(x)$ mit einer stetigen Funktion $q(x)$. Dann folgt mit dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung, dass bereits $u \in C^2$ gelten muss.

2.35 Satz (H^2 -Regularität)

Sei Ω ein Gebiet mit glattem Rand (es gelte $\partial\Omega$ ist in C^2) oder ein konvexes Lipschitz-Gebiet. Ferner seien $q \in L^2(\Omega)$ und $\kappa \in C^1(\bar{\Omega})$. Dann gilt für die eindeutige schwache Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ der stationären Wärmeleitungsgleichung (2.2) dass $u \in H^2(\Omega)$ und dass eine Konstante $c > 0$ existiert, so dass die folgende Abschätzung gilt:

$$\|u\|_{H^2(\Omega)} \leq c \|q\|_{L^2(\Omega)}$$

Beweis:

Für glatten Rand: Buch von Evans.

2.36 Bemerkung

Betrachtet man nicht konvexe Lipschitz-Gebiete, so kann man im Allgemeinen keine Lösung $u \in H^2(\Omega)$ erwarten.

2.2 Ritz-Galerkin Verfahren und abstrakte Fehlerabschätzungen

In diesem Abschnitt wollen wir uns mit der Approximation der Lösung der schwachen Formulierung von (2.4) befassen.

2.37 Definition (Ritz-Galerkin Verfahren)

Seien X, b wie in Definition 2.34 und $X_m \subset X$ mit $\dim(X_m) = m$ ein Unterraum. Dann ist die **Ritz-Galerkin Approximation** $u_m \in X_m$ definiert durch

$$b(u_m, v_m) = l(v_m) \quad \forall v_m \in X_m.$$

2.38 Bemerkung

Die Existenz und Eindeutigkeit von u_m folgt unmittelbar aus dem Satz von Lax-Milgram 2.14, da der Unterraum X_m wieder ein Hilbertraum mit dem aus X geerbten Skalarprodukt ist.

2.39 Satz (Abstrakte Fehlerabschätzung/Lemma von Céa)

Seien X, X_m, b, u und u_m wie in den Definitionen 2.34 und 2.37 definiert. Dann gilt die abstrakte Fehlerabschätzung

$$\|u - u_m\|_X \leq \frac{\gamma}{\alpha} \inf_{v_m \in X_m} \|u - v_m\|_X.$$

Außerdem gilt die Galerkin-Orthogonalität

$$b(u - u_m, v_m) = 0 \quad \forall v_m \in X_m.$$

Beweis:

Wir zeigen zunächst die Galerkin-Orthogonalität: Dazu sei $v_m \in X_m$ und es folgt mit $X_m \subset X$:

$$b(u - u_m, v_m) = b(u, v_m) - b(u_m, v_m) = l(v_m) - l(v_m) = 0.$$

Mit der Stetigkeit und Koerzivität von b folgt weiter

$$\begin{aligned} \alpha \|u - u_m\|_X^2 &\leq b(u - u_m, u - u_m) = b(u - u_m, u - v_m) \\ &\leq \gamma \|u - u_m\|_X \|u - v_m\|_X \\ &\Rightarrow \|u - u_m\|_X \leq \frac{\gamma}{\alpha} \|u - v_m\|_X \end{aligned}$$

Gehe auf beiden Seiten der Ungleichung zum Infimum über, dann folgt die Behauptung. \square

2.40 Bemerkung

Die abstrakte Fehlerabschätzung zeigt, dass der Fehler zwischen Ritz-Galerkin Approximationen und exakter Lösung abgeschätzt werden kann durch die Bestapproximation in dem Teilraum X_m . Die weitere numerische Analyse beruht somit allein auf der Approximationstheorie. Insbesondere bestimmt im wesentlichen der Teilraum X_m die Approximationsgüte.

2.41 Beispiel (mögliche Wahl von Teilräumen)

Betrachten wir konkret die Stationäre Wärmeleitungsgleichung (2.2) oder allgemeiner ein elliptisches Problem in Divergenzform mit $X = H_0^1(\Omega)$ auf einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, so sind neben den Finiten Elemente Verfahren, die wir im nächsten Abschnitt betrachten wollen, vor allem folgende Wahlen von Teilräumen gebräuchlich:

- Polynomräume $X_M := \mathbb{P}^{k(m)}(\Omega) \cap \{v_m \in C^0(\bar{\Omega}) \mid v_m = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}$, wobei $\mathbb{P}^{k(m)}(\Omega)$ der Raum der Polynome mit Grad $\leq k(m)$ über Ω ist. Die zugehörigen Verfahren nennt man **Spektralverfahren**.
- $X_m := \text{span} \{u_i \in X \mid Lu_i = \lambda u_i, i = 1, \dots, m\}$ wobei u_i die i -te Eigenfunktion des zugrundeliegenden Differentialoperators L ist.
- $X_m := \text{span} \{u_i \in X \mid \Delta u_i = \lambda u_i, i = 1, \dots, m\}$, wobei u_i die i -te Eigenfunktion des Laplaceoperators Δ ist.

2.42 Folgerung (Matrix-Vektor von Ritz-Galerkin Verfahren)

Seien X, X_m, b, u und u_m wie in den Definitionen 2.34 und 2.37 definiert und sei zudem X_m endlichdimensional, mit Dimension $m := \dim X_m$. Ist dann $\Phi := \{\varphi_1, \dots, \varphi_m\}$ eine Basis von X_m so folgt mit der Darstellung $u_m = \sum_{i=1}^m U_i \varphi_i$ aus der Definition von u_m

$$b\left(\sum_{i=1}^m U_i \varphi_i, \varphi_j\right) = l(\varphi_j), \quad j = 1, \dots, m.$$

Durch Ausnutzen der Linearität von b im 1. Argument folgt weiter:

$$\sum_{i=1}^m b(\varphi_i, \varphi_j) U_i = l(\varphi_j), \quad j = 1, \dots, m.$$

Definieren wir also die Matrix $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ durch $\mathbf{S}_{ji} := b(\varphi_i, \varphi_j)$, $i, j = 1, \dots, m$ und die Vektoren $\mathbf{u}, \mathbf{l} \in \mathbb{R}^m$ durch $\mathbf{u}_i := U_i$, $\mathbf{l}_i := l(\varphi_i)$, $i = 1, \dots, m$, so ist u_m genau dann Lösung des Ritz-Galerkin Verfahrens, wenn u das folgende lineare Gleichungssystem löst: $\mathbf{S}\mathbf{u} = \mathbf{l}$.

2.3 Finite Elemente Verfahren

Finite Elemente Verfahren sind Spezialfälle von Ritz-Galerkin Verfahren für eine bestimmte Klasse von Teilräumen $X_h \subset X$, wobei X_h der **Finite Elemente Raum** ist. Die Konstruktion von x_h im Falle von Finite Elemente (FE) Verfahren beruht auf einer Zerlegung des Gebietes Ω in nicht überlappende Teilgebiete, die selbst wiederum einfache geometrische Objekte sind. Die einfachste Klasse von Finiten Elementen sind Lagrange Elemente, auf welche wir uns in dieser Vorlesung beschränken werden. Ferner betrachten wir nur Teilräume X_h welche auf einer simplizialen Zerlegung des Gebietes Ω beruhen. In zwei Raumdimensionen besteht das Rechengitter aus Dreiecken, in drei Raumdimensionen aus Tetraedern. Eingeschränkt auf einen Simplex wird eine Funktion aus X_h , dann ein Polynom mit Grad $\leq k$, $k \in \mathbb{N}$ sein. Für andere FE siehe z.B. das Buch von Brenner und Scott.

2.43 Definition (Simplex)

Seien $s \in \{1, \dots, d\}$ und $a_0, \dots, a_s \in \mathbb{R}^d$ Punkte, so dass $(a_j - a_0)_{j=1, \dots, s}$ linear unabhängig sind. Dann heißt

$$T := \left\{ x \in \mathbb{R}^d \mid x = \sum_{i=0}^s \lambda_i a_i, 0 \leq \lambda_i, \sum_{i=0}^s \lambda_i = 1 \right\}$$

nicht-degeneriertes s -dimensionaler Simplex im \mathbb{R}^d . Die Punkte a_0, \dots, a_s heißen Ecken des Simplex. Ist $r \in \{0, \dots, s\}$ und $\tilde{a}_0, \dots, \tilde{a}_r \in \{a_0, \dots, a_s\}$, so heißt

$$\tilde{T} := \left\{ x \in \mathbb{R}^d \mid x = \sum_{i=0}^s \lambda_i \tilde{a}_i, 0 \leq \lambda_i, \sum_{i=0}^s \lambda_i = 1 \right\}$$

r -dimensionales Seitensimplex von T . Die nulldimensionalen Seitensimplexe heißen Ecken, die eindimensionalen Kanten. Wir bezeichnen mit T_0 den Simplex zu den Punkten $a_0 = e_0 = (0, \dots, 0)$, $a_i = e_i$, $i = 1, \dots, d$, T_0 heißt d -dimensionaler Einheitssimplex. Der **Durchmesser** von T ist gegeben durch $h(T) := \text{diam}(T) = \max_{i,j=1, \dots, s} |a_i - a_j|$. Mit

$$\rho(T) := 2 \sup\{R \mid B_R(x_0) \subset T\}$$

bezeichnen wir den **Inkugeldurchmesser** von T und mit

$$\delta(T) := \frac{h(T)}{\rho(T)}$$

den Quotienten aus h und ρ .

2.44 Definition (Baryzentrische Koordinaten)

Die baryzentrischen Koordinaten $\lambda_0, \dots, \lambda_s \in [0, 1]$ eines Punktes $x \in T$ des s -dim. Simplex T sind die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$x = \sum_{i=0}^s \lambda_i a_i, \sum_{i=0}^s \lambda_i = 1.$$

Der Schwerpunkt x_s von T ist definiert durch $x_s := \frac{1}{s+1} \sum_{i=0}^s a_i$ und hat die baryzentrischen Koordinaten $\lambda_i := \frac{1}{s+1}$. Für die Eckpunkte a_k von T sind die baryzentrischen Koordinaten gegeben durch $\lambda_k = 1$, $\lambda_i = 0$, $i \neq k$. Die baryzentrischen Koordinaten sind eindeutig bestimmt.

2.45 Lemma (Referenzabbildung)

Jedes s -dimensionale Simplex T im \mathbb{R}^s ist affin äquivalent zum Einheitssimplex T_0 der gleichen Dimension. Die eindeutige affine Abbildung $F : T_0 \rightarrow T$, $F(x) = Ax + b$, $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$, $b \in \mathbb{R}^s$, $\det A \neq 0$ mit $F(e_j) = a_j$, $j = 0, \dots, s$ heißt **Referenzabbildung**. F ist invertierbar und es gelten die Abschätzungen

$$\|\nabla F\| = \|A\| \leq \frac{h(T)}{\rho(T_0)}, \|\nabla(F^{-1})\| = \|A^{-1}\| \leq \frac{h(T_0)}{\rho(T)}$$

sowie

$$c \cdot \rho(T)^s \leq |\det(\nabla F)| = |\det A| = \frac{|T|}{|T_0|} \leq C \cdot h(T)^s, c, C > 0.$$

Beweis:

Im Buch von Dziuk.

2.46 Definition (Zulässige Triangulierung)

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet und

$$\mathbb{T}_h := \{T_j \mid j = 1, \dots, m, T_j \text{ ist } d\text{-dim. Simplex im } \mathbb{R}^d\}.$$

\mathbb{T}_h heißt zulässige Triangulierung der Feinheit h und Güte ρ von Ω , falls gilt:

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{j=1}^m T_j, \quad \partial\Omega = \bigcup_{j=1}^m \tilde{T}_j,$$

wobei \tilde{T}_j Flächen der Simplexe T_j sind. Für je zwei $T_1, T_2 \in \mathbb{T}_h$ mit $S := T_1 \cap T_2$ gilt $S = \emptyset$ oder S ist $(d - k)$ -dim. Seitensimplex von T_1 und T_2 für ein $k \in \{1, \dots, d\}$. Mit $h := \max_{j=1, \dots, m} h(T_j)$ und $\rho := \min_{j=1, \dots, m} \rho(T_j)$.

Zur Definition von Finite Elemente Räumen basierend auf einer Triangulierung \mathbb{T}_h müssen wir nun lediglich lokale Funktionenräume auf dem Simplex $T \in \mathbb{T}_h$ angeben und festlegen wie solche lokalen Funktionen global zusammengesetzt werden. Ein Tripel bestehend aus einem geometrischen Objekt T , einer lokalen Basis Φ und lokalen Freiheitsgraden δ , wollen wir um folgenden **Element** nennen.

2.47 Definition (lineares simpliziales Lagrange Element)

Sei $T \subset \mathbb{R}^d$ ein d -dim. Simplex. Sei $\delta := \{a_k \mid k = 0, \dots, d\}$ die Menge der Ecken von T . Dann ist durch Angabe von Werten in den Punkten $a_k \in \delta$ eindeutig eine lineare Funktion $p \in \mathbb{P}^1(T)$ definiert. Durch $\Phi := \{\varphi_i \mid \varphi_i(a_k) = \delta_{ik} \ i, k = 1, \dots, d\}$ ist eine modale Basis von $\mathbb{P}^1(T)$ gegeben. Wir nennen das Tripel (T, Φ, δ) **lineares simpliziales Lagrange Element**. Die Basisfunktionen $\varphi_i \in \Phi$ werden **Formfunktionen** oder im Englischen **Shapelfunctions** genannt und δ ist die Menge der **modalen Variablen**. Zur Wohldefiniertheit kann man im Buch von Dziuk nachschauen.

2.48 Beispiel (lineares Lagrange Element für $d = 2$)

Wir betrachten das Einheitsdreieck T_0 mit Eckpunkten $a_0^0 = (0, 0)$, $a_1^0 = (1, 0)$, $a_2^0 = (0, 1)$. Die Formfunktionen sind dann gegeben durch

$$\varphi_0^0(x, y) = 1 - x - y, \quad \varphi_1^0(x, y) = x, \quad \varphi_2^0(x, y) = y.$$

Sind $p(a_0^0), p(a_1^0), p(a_2^0)$ Funktionswerte einer linearen Funktion $p \in \mathbb{P}^1(T_0)$, so ist p gegeben durch

$$p(x, y) = \sum_{i=0}^2 p(a_i^0) \varphi_i^0(x, y).$$

Für ein beliebiges Dreieck $T \subset \mathbb{R}^2$ erhält man das Lagrange Element mit Hilfe der Referenzabbildung $F : T_0 \rightarrow T$ aus Lemma 2.45.

2.49 Bemerkung

Das Beispiel 2.48 zeigt, dass es ausreicht ein Finites Element auf einer Referenzgeometrie zu definieren. Durch die Referenzabbildung erhält man dann die entsprechende Klasse von Elementen auf beliebigen Geometrien im Raum.

Ein Finites Element legt lediglich ein lokalen Funktionenraum auf einen Simplex T fest, um zu einem Unterraum von $H_0^1(\Omega)$ zu gelangen, müssen wir zusätzlich festlegen auf welche Weise die lokalen Funktionen global zusammengesetzt werden.

2.50 Definition (linearer Finite Elemente Raum S_h^1)

- (1) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und \mathbb{T}_h eine zulässige Triangulierung von Ω . Wir definieren den Raum der **linearen Finite Elemente** auf simplizialen Gittern S_h^1 durch

$$S_h^1 := \{v_h \in C^0(\Omega) \mid v_h|_T \in \mathbb{P}^1(\Omega), T \in \mathbb{T}_h\}.$$

- (2) Sind \bar{a}_j , $j = 1, \dots, N_h$ die Ecken der Triangulierung \mathbb{T}_h , so ist eine Funktion $v_h \in S_h^1$ durch die Vorgabe von Funktionswerten in den Ecken $v_h(\bar{a}_j)$ eindeutig definiert. Insbesondere gilt $\dim(S_h^1) = N_h$. Eine Basis von S_h^1 ist durch die Funktionen

$$\bar{\varphi}_i \in S_h^1, \bar{\varphi}_i(\bar{a}_j) = \delta_{ij}, i, j = 1, \dots, N$$

gegeben. Diese Basis heißt **Knotenbasis** oder **modale Basis**.

- (3) Ist (T_0, Φ, δ) das lineare Lagrange Element auf dem Einheitssimplex T_0 und $v_h \in S_h^1$ gegeben durch

$$v_h(x) := \sum_{i=1}^{N_h} v_h(\bar{a}_i) \bar{\varphi}_i(x),$$

so gilt für beliebige Simplexe $T \in \mathbb{T}_h$ mit Ecken a_0, \dots, a_d

$$v_h|_T(x) = \sum_{i=1}^d v_h(a_i) \varphi_i^0(T^{-1}(x)),$$

wobei $F : T_0 \rightarrow T$ die Referenzabbildung und $\varphi_i^0 \in \Phi$ die Formfunktionen von T_0 sind.

2.51 Definition (lineares Finite Elemente Verfahren)

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und \mathbb{T}_h zulässige Triangulierung von Ω . Seien $X := H_0^1(\Omega)$ und $X_h := S_{h,0}^1 := S_h^1 \cap \{v \in C^1(\Omega) \mid v = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}$. Weiter seien eine stetige und koerzive Bilinearform $b : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ und ein $l \in X'$ gegeben. Dann ist $X_h \subset X$ ein Teilraum und $u_h \in X_h$ heißt Lösung des **linearen Finite Elemente Verfahrens** für das Problem aus 2.34, falls gilt:

$$b(u_h, v_h) = l(v_h) \quad \forall v_h \in X_h.$$

2.52 Satz (A priori Fehlerabschätzung)

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \leq 3$ ein Lipschitz-Gebiet und \mathbb{T}_h eine zulässige Triangulierung von Ω mit $\sigma(T) \leq \sigma < \infty$, $\sigma \in \mathbb{R}$, $\forall T \in \mathbb{T}_h$. Seien X, X_h, b, u_h wie in Definition 2.51 und $u \in X$ wie in Definition 2.34. Liegt nun $u \in H_2(\Omega)$ so gibt es eine Konstante $c > 0, c \in \mathbb{R}$, die nur von d, σ, Ω abhängt, so dass gilt:

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \leq ch |u|_{H^2(\Omega)}, \quad (2.4)$$

wobei $|u|_{H^2(\Omega)} := \|D^2 u\|_{L^2(\Omega)}$.

Beweis:

Für Poissonproblem siehe Buch von Dziuk.

2.53 Bemerkung (a priori \leftrightarrow a posteriori Fehlerabschätzung)

Satz 2.52 macht eine Aussage über die Konvergenz des linearen FE Verfahrens. Da auf der rechten Seite der Ungleichung (2.4) aber der Term $|u|_{H^2(\Omega)}$ auftaucht, ist (2.4) nicht geeignet um den tatsächlichen Wert des Approximationsfehlers abzuschätzen. Zu diesem Zweck leitet man A posteriori Fehlerabschätzungen her, bei denen der Fehler ausschließlich durch berechenbare Größen abgeschätzt wird. Für eine Übersicht über A posteriori Fehlerabschätzungen für FE Verfahren verweisen wir auf das Buch von Verfürth.

2.54 Bemerkung

Betrachten wir Definition 2.51 des linearen FE Verfahrens, so stellen wir zunächst fest, dass wir in der schwachen Formulierung exakte Integrale bestimmen müssen, was im Allgemeinen nicht realisierbar ist. in der Praxis verwendet man Quadraturformeln. Ferner schränkt uns Definition 2.51 auf polygonal berandete Gebiete ein. Um auch Gebiete mit glattem Rand behandeln zu können, kann man z.B. eine Gebietsapproximation durchführen bei dem alle Ecken auf dem Rand des polygonal berandeten approximierenden Gebiets $\partial\Omega_h$ auch auf $\partial\Omega$ liegen. Hier ist dann X_h nicht Teilraum von X und das Lemma von Céa nicht anwendbar. Allerdings kann man in beiden Fällen unter gewissen Voraussetzungen zeigen, dass die zusätzlichen Approximationsfehler die Konvergenzordnung des FE Verfahrens nicht beeinflussen. Für weitere Details siehe z.B. das Buch von Dziuk oder Brenner und Scott.

3 Reduzierte Basis Methoden für lineare, koerzive Probleme

3.1 Parameterabhängigkeit

3.1 Definition (parametrische Formen)

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

- (1) $f : X \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ eine parametrische stetige Linearform oder ein parametrisches stetiges lineares Funktional, falls $\forall \mu \in \mathcal{P} : f(\cdot, \mu) \in X$.
- (2) Wir nennen $b : X_1 \times X_2 \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ eine parametrische stetige koerzive Bilinearform, falls $\forall \mu \in \mathcal{P} : b(\cdot, \cdot, \mu) : X_1 \times X_2 \rightarrow \mathbb{R}$ bilinear stetig und koerziv ist. Wir bezeichnen die Stetigkeitskonstante mit $\gamma(\mu)$ und die Koerzivitätskonstante mit $\alpha(\mu)$.

3.2 Bemerkung

Eine parametrische stetige Bi-/Linearform ist nicht unbedingt stetig bzgl. μ . Betrachte dazu das Beispiel $X = \mathbb{R}, \mathcal{P} = [0, 1], f : X \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

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

3.3 Definition (Parametrische Beschränktheit, Stetigkeit)

- (1) Wir nennen eine parametrische stetige Linearform f beschränkt bzw. Bilinearform b **gleichmäßig beschränkt** bzgl. μ , falls $\gamma_0, \gamma_1 \in \mathbb{R}^+$ existieren so dass

$$\sup_{\mu \in \mathcal{P}} \|f(\cdot, \mu)\|_X \leq \gamma_0 \text{ bzw. } \sup_{\mu \in \mathcal{P}} \gamma(\mu) \leq \gamma_1.$$

- (2) Wir nennen b **glm. koerziv** bzgl. μ , falls ein $\alpha_0 > 0$ existiert so dass

$$\inf_{\mu \in \mathcal{P}} \alpha(\mu) \geq \alpha_0 > 0.$$

- (3) Wir nennen f bzw. b Lipschitz-stetig bzgl. μ , falls ein $L_f \in \mathbb{R}^+$ bzw. ein $L_b \in \mathbb{R}^+$ existiert, so dass für alle $\mu_1, \mu_2 \in \mathcal{P}$ gilt

$$|f(u, \mu_1) - f(u, \mu_2)| \leq L_f \|u\|_X \|\mu_1 - \mu_2\| \quad \forall u \in X,$$

bzw.

$$|b(u, v, \mu_1) - b(u, v, \mu_2)| \leq L_b \|u\|_{X_1} \|v\|_{X_2} \|\mu_1 - \mu_2\| \quad \forall u \in X_1, v \in X_2.$$

3.4 Lemma (Energienorm)

Sei X HR, $b : X \times X \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ parametrische, koerzive, stetige Bilinearform. Dann ist für $\mu \in \mathcal{P}$ durch

$$((u, v))_\mu := b_s(u, v; \mu)$$

ein Skalarprodukt auf X und durch

$$\|u\|_\mu := \sqrt{((u, u))_\mu}$$

die **Energienorm** definiert. Diese ist äquivalent zur X -Norm und es gilt

$$\sqrt{\alpha(\mu)} \|u\|_X \leq \|u\|_\mu \leq \sqrt{\gamma(\mu)} \|u\|_X \quad \forall u \in X.$$

Beweis:

Skalarprodukt klar wegen Bilinearität, Stetigkeit und Koerzivität. Normäquivalenz folgt aus Stetigkeit und Koerzivität von b_s :

$$\alpha(\mu) \|v\|_X^2 \leq b_s(v, v; \mu) \leq \gamma(\mu) \|v\|_X^2.$$

3.5 Definition (Parametrische schwache Formulierung; Parametrisches Variationsproblem ($P(\mu)$))

Sei X HR, $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^p$ beschränkt, $b : x \times X \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ parametrische, stetige, koerzive Bilinearform, $f, l : X \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ parametrische stetige Linearform. Zu $\mu \in \mathcal{P}$ bezeichnet $u(\mu) \in X$ die eindeutige Lösung des parametrischen Variationsproblems

$$b(u(\mu), v; \mu) = f(v, \mu) \quad \forall v \in X, \quad (3.1)$$

mit Ausgabe $s(\mu) = l(u(\mu), \mu)$.

3.6 Bemerkung

Existenz und Eindeutigkeit der Lösung $u(\mu)$ folgen mit dem Satz von Lax Milgram.

3.7 Definition (schwache Formulierung der parametrischen, stationären Wärmeleitungsgleichung)

Seien $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ Lipschitz-Gebiet, $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^p$ beschränkt, $q(\mu) \in L^2(\Omega)$ und $\kappa(\mu) \in L^\infty(\Omega)$ mit $0 < \kappa_1 \leq \kappa(\mu)$ für alle $\mu \in \mathcal{P}$ und Konstante $\kappa_1 \in \mathbb{R}^+$. Dann heißt $u(\mu) \in H_0^1(\Omega)$ schwache Formulierung des RWP der parametrischen, stationären WLG aus 1.1, falls gilt

$$\int_{\Omega} \kappa(x; \mu) \nabla u(x; \mu) \nabla v(x) dx = \int_{\Omega} q(x, \mu) v(x) dx \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

3.8 Folgerung (Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen)

Unter den Voraussetzungen von Definition 3.7 gibt es für jedes $\mu \in \mathcal{P}$ genau eine schwache Lösung $u(\mu) \in H_0^1(\Omega)$ des RWP der parametrischen, stationären WLG aus 1.1.

Beweis:

Analog zum Beweis von Satz 2.31.

3.9 Definition ((lineares) FE Verfahren für parametrische Variationsprobleme ($P_h(\mu)$))

Sei X HR, $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^p$ beschränkt, $b : X \times X \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ parametrische, stetige, koerzive Bilinearform, $f, l : X \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ parametrische, stetige Linearform. Sei ferner \mathbb{T}_h eine zulässige Triangulierung des Rechengebietes $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und $X_h \subset X$ ein zugehöriger (linearer) Finite Elemente Raum, wobei X_h Unterraum von X . Zu $\mu \in \mathcal{P}$ heißt $u_h(\mu) \in X_h$ Lösung des (linearen) FE Verfahrens für das parametrische Variationsproblem, falls gilt

$$b(u_h(\mu), v_h; \mu) = f(v_h; \mu) \quad \forall v_h \in X_h, \quad s_h(\mu) = l(u_h(\mu); \mu).$$

3.10 Bemerkung

Das Verfahren aus Definition 3.9 ist nach Bemerkung 1.6 ein 'hochdimensionales, diskretes' Modell.

3.2 Reduzierte Basisverfahren

3.11 Definition (Reduzierte Basis, Reduzierte Basis Räume)

Sei $S_N := \{\mu^1, \dots, \mu^N\} \subset \mathcal{P}$ eine Menge von Parametern mit (oBdA) linear unabhängigen Lösungen $\{u(\mu^i)\}_{i=1}^N$ von ($P_h(\mu)$). Dann ist $X_N := \text{span} \{u(\mu^i)\}_{i=1}^N$ ein N -dimensionaler **Lagrange Reduzierte Basis-Raum**. Eine Basis $\Phi_N := \{\phi_1, \dots, \phi_N\} \subset X_h$ eines Reduzierten Basis-Raumes ist eine Reduzierte Basis (RB).

3.12 Bemerkung

Es existieren weitere Arten von RB-Räumen. Im weiteren Verlauf der Vorlesung werden wir z.B. noch **POD-Räume** kennenlernen. Auch die POD-Räume werden aus sogenannten Snapshots, d.h. Lösungen $u_h(\mu^i)$, $1 \leq i \leq k$ mit $k \gg N$, erzeugt.

3.13 Definition (RB-Modell $(P_N(\mu))$, symmetrischer Fall)

Sei ein Problem $P(\mu)$ und ein diskretes Modell $(P_h(\mu))$ gegeben und zusätzlich gelte b symmetrisch und $f = l$ ("compliant"). Sei $X_h \subset X$ ein RB-Raum. Zu $\mu \in \mathcal{P}$ ist die RB-Lösung $u_N(\mu) \in X_N$ und die RB-Ausgabe $s_N(\mu) \in \mathbb{R}$ gesucht, so dass

$$b(u_N(\mu), v; \mu) = f(v; \mu) \quad \forall v \in X_N$$

und

$$s_N(\mu) = l(u_N(\mu); \mu).$$

3.14 Bemerkung

Falls b nicht symmetrisch oder $f \neq l$ ist obiges immer noch sinnvoll, aber es bestehen bessere Möglichkeiten $s_N(\mu)$ mittels eines dualen Problems zu bestimmen.

3.15 Bemerkung

Da $X_N \subset X_h \subset X$, X_N Teilraum von X_h , ist das RB-Modell ein Ritz-Galerkin Verfahren.

3.16 Folgerung (Existenz, Eindeutigkeit, Stabilität, Wohlgestelltheit)

Zu $\mu \in \mathcal{P}$ existiert eine eindeutige RB-Lösung $u_N(\mu) \in X_N$ und RB-Ausgabe $s_N(\mu)$ von $(P_N(\mu))$. Diese sind beschränkt durch $\|u_N(\mu)\|_X \leq \frac{1}{\alpha(\mu)} \|f(\cdot; \mu)\|_X$ und $|s_N(\mu)| \leq \frac{1}{\alpha(\mu)} \|f(\cdot; \mu)\|_{X'} \|l(\cdot; \mu)\|_{X'}$.

Beweis:

Existenz und Eindeutigkeit von $u_N(\mu)$ folgt mit dem Satz von Lax-Milgram, wobei

$$\alpha_N(\mu) := \inf_{u \in X_N} \frac{b(u, u; \mu)}{\|u\|_X^2} \geq \inf_{u \in X} \frac{b(u, u; \mu)}{\|u\|_X^2} = \alpha(\mu) > 0.$$

Dann ist auch $s_N(\mu) = l(u_N(\mu); \mu)$ eindeutig und die Stabilität folgt mit

$$\|u_N(\mu)\|_X = \|B^{-1}(\mu) v_f(\mu)\|_X \leq \|B^{-1}(\mu)\|_X \|v_f(\mu)\|_X \leq \frac{1}{\alpha(\mu)} \|f(\cdot; \mu)\|_X.$$

Hierbei ist $B(\mu)$ der eindeutige invertierbare Operator aus dem Satz von Lax-Milgram und $v_f(\mu)$ der Riesz-Repräsentant von $f(\cdot; \mu) \in X'_N$.

$$|s_N(\mu)| = |l(u_N(\mu); \mu)| \leq \|l(\cdot; \mu)\|_{X'} \|u_N(\mu)\|_X \leq \frac{1}{\alpha(\mu)} \|f(\cdot; \mu)\|_{X'} \|l(\cdot; \mu)\|_{X'}$$

□

3.17 Folgerung (Galerkin-Projektion, Galerkin-Orthogonalität)

Zu $\mu \in \mathcal{P}$, X_h, X_N HR mit Energieskalarprodukt $((\cdot, \cdot))_\mu$, $P_\mu : X_h \rightarrow X_N$ die orthogonale Projektion aus Satz 2.7, $u_h(\mu), u_N(\mu)$ Lösungen von $(P_h(\mu))$ bzw. $(P_N(\mu))$ und der Fehler $e_N(\mu) = u_h(\mu) - u_N(\mu)$. Dann gilt

- (1) $u_N(\mu) = P_\mu(u_h(\mu))$ "Galerkin-Projektion"
- (2) $((e_N(\mu), v_N))_\mu = 0 \forall v_N \in X_N$ "Galerkin-Orthogonalität"

Beweis:

Lemma 3.4 impliziert $(X_h, ((\cdot, \cdot))_\mu)$ HR und $X_N = \text{span}\{\Phi_i\}_{i=1}^N$ endlichdimensional, also abgeschlossen ist. Daher ist P_μ nach Satz 2.7 wohldefiniert.
Mit Folgerung 2.8 folgt

$$\begin{aligned} & (((P_\mu(u_h(\mu)) - u_h(\mu), \Phi_i))_\mu = 0, \quad i = 1, \dots, N \\ & \Leftrightarrow b(P_\mu(u_h(\mu)) - u_h(\mu), \Phi_i; \mu) = 0, \quad i = 1, \dots, N \\ & \Leftrightarrow b(P_\mu(u_h(\mu)), \Phi_i; \mu) = b(u_h(\mu), \Phi_i; \mu), \quad i = 1, \dots, N \\ & \Leftrightarrow b(P_\mu(u_h(\mu)), \Phi_i; \mu) = f(\Phi_i; \mu), \quad i = 1, \dots, N \end{aligned}$$

Da $u_N(\mu)$ eindeutig folgt $P_\mu(u_h(\mu)) = u_N(\mu)$ daraus folgt (1). (2) folgt entweder aus 2.8 oder Satz 2.39.

3.18 Folgerung

Sei $\mu \in \mathcal{P}$, $u_h(\mu), u_N(\mu)$ Lösungen von $(P_h(\mu))$ bzw. $(P_N(\mu))$. Falls $u_h(\mu) \in X_N \Rightarrow u_N(\mu) = u_h(\mu)$.

Beweis:

Da $u_h(\mu), u_N(\mu) \in X_N \Rightarrow e_N(\mu) := u_h(\mu) - u_N(\mu) \in X_h$ und $((e_N(\mu), v_N))_\mu = 0 \forall v_N \in X_N$ nach Folgerung 3.17 (2). Damit gilt $((e_N(\mu), l_N(\mu)))_\mu = 0 \Rightarrow e_N(\mu) = 0 \Rightarrow u_N(\mu) = u_h(\mu)$. \square

3.19 Satz (abstrakte Fehlerabschätzung; Relation zur Bestapproximation)

Sei $\mu \in \mathcal{P}$ und $u_h(\mu), s_h(\mu)$ bzw. $u_N(\mu), s_N(\mu)$ Lösungen von $(P_h(\mu))$ bzw. $(P_N(\mu))$. Dann gilt:

- (1) Der Fehler der $(\mu$ -abhängigen Energienorm) erfüllt

$$|||u_h(\mu) - u_N(\mu)|||_\mu = \inf_{v \in X_N} |||u_h(\mu) - v|||_\mu.$$

- (2) Der Fehler in der $(\mu$ -unabhängigen) X -Norm erfüllt

$$\|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_X \leq \sqrt{\frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)}} \inf_{v \in X_N} \|u(\mu) - v\|_X.$$

mit $\gamma(\mu), \alpha(\mu)$ Stetigkeits- bzw. Koerzivitätskonstante.

- (3) Für den Ausgabefehler gilt (wegen $f = l$)

$$0 \leq s_h(\mu) - s_N(\mu) = |||u_h(\mu) - u_N(\mu)|||_\mu^2 = \inf_{v \in X_N} |||u_h(\mu) - v|||_\mu^2 \leq \gamma(\mu) \inf_{v \in X_N} \|u_h(\mu) - v\|_X^2.$$

Beweis:

- (1) Nach Folgerung 3.17 ist $u_N(\mu)$ orthogonale Projektion, also Bestapproximation

$$|||u_h(\mu) - u_N(\mu)|||_\mu \stackrel{3.17(1)}{=} |||u_h(\mu) - P_\mu(u_h(\mu))|||_\mu \stackrel{2.7}{=} \inf_{v \in X_h} |||u_h(\mu) - v|||_\mu.$$

(2) Mit der Normäquivalenz 3.4 folgt

$$\sqrt{\alpha_h(\mu)} \|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_X \stackrel{3.4}{\leq} \|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_\mu \stackrel{(1)}{=} \inf_{v \in X_N} \|u_h(\mu) - v\|_\mu \stackrel{3.4}{\leq} \sqrt{\gamma_h(\mu)} \inf_{v \in X_h} \|u_h(\mu) - v\|_X,$$

wobei $\alpha_h(\mu) := \inf_{v \in X_h} \frac{b(v, v; \mu)}{\|v\|_X^2}$ und $\gamma_h(\mu) := \sup_{u, v \in X_h} \frac{b(u, v; \mu)}{\|u\|_X \|v\|_X}$. Wie in Beweis von Folgerung 3.16 folgt $\alpha_h(\mu) \geq \alpha(\mu)$ und $\gamma_h(\mu) \leq \gamma(\mu) \forall \mu \in \mathcal{P}$ und damit die Behauptung.

(3)

$$\begin{aligned} s_h(\mu) - s_N(\mu) &\stackrel{Def}{=} l(u_h(\mu); \mu) - l(u_N(\mu); \mu) \stackrel{l=f}{=} f(u_h(\mu)) - f(u_N(\mu)) \\ &\stackrel{(P_h(\mu))}{=} b(u_h(\mu), u_h(\mu) - u_N(\mu); \mu) \\ &= b(u_h(\mu), u_h(\mu) - u_N(\mu); \mu) - b(u_h(\mu) - u_N(\mu), u_N(\mu); \mu) \\ &= b(u_h(\mu) - u_N(\mu), u_h(\mu) - u_N(\mu); \mu) \end{aligned}$$

Damit folgt

$$s_h(\mu) - s_N(\mu) = \|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_\mu^2 \stackrel{(1)}{=} \inf_{v \in X_h} \|u_h(\mu) - v\|_\mu^2 \stackrel{3.4}{\leq} \gamma(\mu) \inf_{v \in X_N} \|u_h(\mu) - v\|_X^2$$

Insbesondere gilt auch $s_h(\mu) - s_N(\mu) = \|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_\mu^2 \geq 0$.

□

3.20 Bemerkung

- (1) $s_N(\mu)$ ist also untere Schranke für $s_h(\mu)$.
- (2) Der Ausgabefehler ist im Allgemeinen sehr klein, da das Quadrat des RB-Fehlers eingeht.
- (3) Mit dem Lemma von Céa (Satz 2.39) erhalten wir für nicht notwendigerweise symmetrische Bilinearformen $\|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_X \leq \frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)} \inf_{v \in X_N} \|u_h(\mu) - v\|_X$. Damit ist Satz 3.19 eine Verschärfung für symmetrische Bilinearformen.

3.21 Korollar (Monotoner Fehlerabfall in der Energienorm)

Sei $(X_N)_{N=1}^{N_{\max}}$ Folge von RB-Räumen mit $X_N \subseteq X_{N'}$ für $N \leq N' \leq N_{\max}$ ("Hierarchische Räume") und $e_N(\mu) = u_h(\mu) - u_N(\mu)$ für $\mu \in \mathcal{P}$. Dann ist die Folge $(\|e_N(\mu)\|)_{N=1}^{N_{\max}}$ monoton fallend.

Beweis:

$$\|e_N(\mu)\|_\mu = \inf_{v \in X_N} \|u_h(\mu) - v\|_\mu \geq \inf_{v \in X_{N'}} \|u_h(\mu) - v\|_\mu = \|e_{N'}(\mu)\|_\mu.$$

□

3.22 Bemerkung

- (1) 'Worst Case' ist eine Stagnation des Fehlers (unrealistisch, da jeder neue Basisvektor orthogonal zu $e_N(\mu)$ sein müsste). In der Praxis ist bei geschickter Basiswahl exponentielle Konvergenz zu beobachten.

(2) Monotonie gilt nicht notwendigerweise für andere Normen trotz Normenäquivalenz:

$$c|||e_N(\mu)|||_\mu \leq \|e_N(\mu)\| \leq C|||e_N(\mu)|||_\mu$$

mit c, C Konstanten unabhängig von N . Fehlnorm $\|e_N(\mu)\|$ kann gelegentlich anwachsen, bleibt aber in einem 'Korridor' um $|||e_N(\mu)|||_\mu$.

"Beweis":

$$\|e_{N'}(\mu)\| \leq C|||e_{N'}(\mu)|||_\mu \leq C|||e_N(\mu)|||_\mu \leq \frac{C}{c} \|e_N(\mu)\|$$

3.23 Folgerung (Fehlerabschätzung für den Fehler zwischen exakter Lösung und RB-Lösung)

Sei $\mu \in \mathcal{P}$ und $u(\mu), s(\mu), u_h(\mu), s_h(\mu)$ bzw. $u_N(\mu), s_N(\mu)$ Lösung von $(P(\mu)), (P_h(\mu))$ bzw. $(P_N(\mu))$, wobei X_h linearer Finite Elemente Raum. Zusätzlich gelte b symmetrisch und $f = l$ ("compliant"). Liegt nun $u \in H^2(\Omega)$, so gibt es eine Konstante $c > 0$ die nur von d, σ und Ω abhängt, so dass gilt:

1. Der Fehler in der (μ -unabhängigen) X -Norm erfüllt

$$\|u(\mu) - u_h(\mu)\|_X \leq \sqrt{\frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)}} \left(ch |u(\mu)|_{H^2(\Omega)} + \inf_{v \in X_N} \|u_h(\mu) - v\|_X \right)$$

2. Für den Ausgabefehler gilt:

$$0 \leq s(\mu) - s_N(\mu) \leq \gamma(\mu) \left(c^2 h^2 |u(\mu)|_{H^2(\Omega)} + \inf_{v \in X_N} \|u_h(\mu) - v\|_X^2 \right)$$

Beweis: Analog zum Beweis von Satz 3.19 unter Verwendung von Satz 2.52.

3.24 Bemerkung

Den Fehleranteil $\|u(\mu) - u_h(\mu)\|_X$ nennt man **Diskretisierungsfehler** und den Anteil $\|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|$ nennt man **Modellfehler**. Um eine gute Approximation der exakten Lösung $u(\mu)$ und der Ausgabe $s(\mu)$ zu erhalten, müssen beide Fehleranteile klein sein.

3.25 Satz (Lipschitzstetigkeit)

Falls b und f gleichmäßig beschränkt und Lipschitz-stetig bzgl. μ und b gleichmäßig koerziv bzgl. μ , so sind auch die Lösungen $u_N(\mu)$ und $s_N(\mu)$ von $(P_N(\mu))$ Lipschitz-stetig bzgl. μ .

3.26 Satz (Gleichungssystem und numerische Stabilität)

Sei $\Phi_N = \{\phi_1, \dots, \phi_N\}$ eine reduzierte Basis von X_N . Für $\mu \in \mathcal{P}$ definieren wir $\mathbb{B}_N(\mu) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ und $\mathbb{F}_N(\mu) \in \mathbb{R}^N$ durch

$$(\mathbb{B}_N(\mu))_{nm} := b(\phi_m, \phi_n; \mu), \quad (\mathbb{F}_N(\mu))_n := f(\phi_n; \mu)$$

und

$$\mathbb{U}_N(\mu) = (U_1^N(\mu), \dots, U_N^N(\mu)) \in \mathbb{R}^N$$

als Lösung von

$$\mathbb{B}_N(\mu) \mathbb{U}_N(\mu) = \mathbb{F}_N(\mu). \quad (3.2)$$

- (1) Dann ist $u_N(\mu) = \sum_{n=1}^N U_n^N(\mu) \phi_n$ und $s_N(\mu) = \mathbb{F}_N^T(\mu) \mathbb{U}_N(\mu)$ Lösung von $(P_N(\mu))$.

(2) Falls Φ_N orthogonal, so ist die Kondition von (3.2) unabhängig von μ beschränkt durch

$$\text{cond}_2(\mathbb{B}_N(\mu)) = \|\mathbb{B}_N(\mu)\|_2 \|\mathbb{B}_N^{-1}(\mu)\|_2 \leq \frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)}.$$

Beweis:

(1) klar.

(2): Wegen Symmetrie von $\mathbb{B}_N(\mu)$ ist

$$\text{cond}_2(\mathbb{B}_N(\mu)) = \frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|} \quad (3.3)$$

mit betragsmäßig größten/kleinstem Eigenwert $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ von $\mathbb{B}_N(\mu)$. Sei $\mathbb{U}_{\max} = (\mathbb{U}_n)_{n=1}^N \in \mathbb{R}^N$ Eigenvektor zu λ_{\max} und $u_{\max} := \sum_{n=1}^N \mathbb{U}_n \phi_n$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \lambda_{\max} \|\mathbb{U}_{\max}\|_2^2 &= \lambda_{\max} \mathbb{U}_{\max}^T \cdot \mathbb{U}_{\max} = \mathbb{U}_{\max}^T \mathbb{B}_N(\mu) \mathbb{U}_{\max} \\ &= \sum_{n,m=1}^N \mathbb{U}_n \mathbb{U}_m b(\phi_n, \phi_m; \mu) = b\left(\sum_{n=1}^N \mathbb{U}_n \phi_n, \sum_{m=1}^N \mathbb{U}_m \phi_m; \mu\right) \\ &= b(u_{\max}, u_{\max}; \mu) \end{aligned}$$

Aus der Orthogonalität folgt

$$\|u_{\max}\|_X^2 =$$

3.27 Bemerkung

Im Gegensatz zu großen aber dünn besetzten Matrizen bei FEM ist (3.2) klein aber voll besetzt, weil ϕ_i im Allgemeinen keinen disjunkten Träger haben.

3.28 Folgerung

Sei $\bar{\varphi}_i$, $i = 1, \dots, \mathcal{N}_h$ die Knotenbasis von X_h wie in Def. 2.50 definiert. Für $\mu \in \mathcal{P}$ definieren wir $\mathbb{B}_h(\mu) \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}_h \times \mathcal{N}_h}$ und $\mathbb{F}_h(\mu) \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}_h}$ durch

$$(\mathbb{B}_h(\mu))_{ij} := b(\bar{\varphi}_i, \bar{\varphi}_j; \mu), \quad (\mathbb{F}_h(\mu))_i := f(\bar{\varphi}_i; \mu), \quad 1 \leq i, j \leq \mathcal{N}_h. \quad (3.4)$$

Indem wir nun die RB-Basisfunktionen in der Knotenbasis darstellen

$$\Phi_n = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_h} \phi_h^i \bar{\varphi}_i, \quad n = 1, \dots, N \quad (3.5)$$

können wir eine Transformationsmatrix $\mathbb{V} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}_h \times N}$ definieren deren Spalten die Koeffizienten der RB-Basisfunktionen in (3.5) enthalten:

$$\mathbb{V}_{in} := \phi_h^i, \quad 1 \leq i \leq \mathcal{N}_h, \quad 1 \leq n \leq N. \quad (3.6)$$

Dann gilt für $\mathbb{B}_N(\mu)$ und $\mathbb{F}_N(\mu)$ aus Satz 3.25:

$$\mathbb{B}_N(\mu) = \mathbb{V}^T \mathbb{B}_h(\mu) \mathbb{V} \quad \text{und} \quad \mathbb{F}_N(\mu) = \mathbb{V}^T \mathbb{F}_h(\mu).$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 (\mathbb{V}^T \mathbb{B}_h(\mu) \mathbb{V})_{mn} &= \sum_{r,s=1}^{\mathcal{N}_h} (\mathbb{V}^T)_{mr} (\mathbb{B}_h(\mu))_{rs} (\mathbb{V}_{sn}) \\
 &= \sum_{r,s=1}^{\mathcal{N}_h} \phi_m^r b(\bar{\varphi}_s, \bar{\varphi}_r; \mu) \phi_n^s \\
 &= b\left(\sum_{s=1}^{\mathcal{N}_h} \phi_n^s \bar{\varphi}_s, \sum_{r=1}^{\mathcal{N}_h} \phi_m^r \bar{\varphi}_r; \mu\right) \\
 &= b(\phi_n, \phi_m; \mu) = (\mathbb{B}_N(\mu))_{mn}.
 \end{aligned}$$

□

3.3 Offline/Online Zerlegung des RB-Modells

3.29 Bemerkung (Komplexitätsbetrachtungen)

Da $\mathbb{B}_h(\mu)$ aus (3.4) dünn besetzt ist, erfordert die Berechnung von $u_h(\mu)$ $\mathcal{O}(\mathcal{N}_h^2)$ Rechenschritte. Da $\mathbb{B}_N(\mu)$ vollbesetzt ist das lineare Gleichungssystem (LGS) (3.2) in $\mathcal{O}(N^3)$ Rechenschritten lösbar. Daher ist nur für $N \ll \mathcal{N}_h$ das RB-Modell ein Gewinn. Genauere Betrachtung der Berechnung einer reduzierten Lösung $u_N(\mu)$:

- (1) N Snapshots, also N Lösungen $u_h(\mu)$ von $(P_h(\mu))$ berechnen: $\mathcal{O}(N\mathcal{N}_h^2)$. ('Offline')
- (2) N^2 Auswertungen von $b(\phi_m, \phi_n; \mu)$: $\mathcal{O}(N^2\mathcal{N}_h)$.
- (3) N Auswertungen von $f(\phi_n; \mu)$: $\mathcal{O}(N\mathcal{N}_h)$.
- (4) Die Lösung des LGS (3.2): $\mathcal{O}(N^3)$. ('Online')

Damit lohnt sich das RB-Modell für ein einzelnes $\mu \in \mathcal{P}$ oder wenige $\mu \in \mathcal{P}$ nicht. Wenn wir $(P_N(\mu))$ aber für viele verschiedene Parameter $\mu \in \mathcal{P}$ lösen müssen, wie zum Beispiel in einem *many-query* Kontext lohnt sich das RB-Modell, wenn man eine sogenannte **Offline/Online Zerlegung** durchführt. In der einmalig durchgeführten **Offline-Phase** werden μ -unabhängige, hochdimensionale Größen in $\mathcal{O}(\mathcal{N}_h^m)$, $m \in \mathbb{N}$ Rechenschritten, typischerweise teuer vorberechnet. In der vielfach durchgeführten **Online-Phase** werden die Offline-Daten kombiniert um μ -abhängige Größen wie das reduzierte LGS (3.2) zu assemblieren. Die RB-Lösung $u_N(\mu)$ und $s_N(\mu)$ können dann schnell berechnet werden, wobei die Anzahl der Rechenschritte idealerweise $\mathcal{O}(N^k)$, $k \in \mathbb{N}$ ist, d.h. unabhängig von \mathcal{N}_h .

Vor diesem Hintergrund können wir Schritt 1 klar der Offline-Phase und Schritt 4 der Online-Phase zu ordnen. Schritt 2 und 3 lassen sich direkt keiner der beiden Phasen klar zu ordnen, da sie sowohl teure als auch Parameter-abhängige Operationen benötigen. Um eine klare Trennung auch von Schritt 2 und 3 zu erreichen benötigen wir eine spezielle Struktur der Bilinearform $b(\cdot, \cdot; \mu)$ und Linearform $f(\cdot; \mu)$.

3.30 Definition

Seien X, X_1, X_2 HR, \mathcal{P} beschränkte Parametermenge.

- (1) Eine Funktion $v : \mathcal{P} \rightarrow X$ nennen wir **affin parametrisch**, falls Funktionen $v^q \in X$ und Koeffizientenfunktionen $\theta_v^q : \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ für $q = 1, \dots, Q_v$ existieren, so dass

$$v(x; \mu) := \sum_{q=1}^{Q_v} \theta_v^q(\mu) v^q(x).$$

- (2) Eine parametrische stetige Linearform $f : X \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. stetige Bilinearform $b : X_1 \times X_2 \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ ist **affin parametrisch**, falls $f^q \in X'$ und $\theta_f^q : \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ für $q = 1, \dots, Q_f$ bzw. $b^q : X_1 \times X_2 \rightarrow \mathbb{R}$ und $\theta_b^q : \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ für $q = 1, \dots, Q_b$ existieren, so dass

$$f(v; \mu) = \sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) f^q(v) \quad \forall v \in X \text{ bzw.}$$

$$b(u, v; \mu) = \sum_{q=1}^{Q_b} \theta_b^q(\mu) b^q(u, v) \quad \forall u \in X_1, v \in X_2.$$

3.31 Folgerung (Offline/Online-Zerlegung von $(P_N(\mu))$)

Sei $(P_N(\mu))$ gegeben und b, f affin parametrisch. Dann erlaubt $(P_N(\mu))$ die folgende Offline/Online-Zerlegung:

Offline-Phase: Nach Berechnung einer reduzierten Basis $\Phi_N := \{\phi_1, \dots, \phi_N\}$ assemblieren wir die parameterunabhängige Matrizen und Vektoren $\mathbb{B}_N^q \in \mathbb{R}^{N \times N}$ und $\mathbb{F}_N^q \in \mathbb{R}^N$, definiert durch

$$(\mathbb{B}_N^q)_{nm} := b^q(\phi_m, \phi_n), \quad 1 \leq m, n \leq N, \quad 1 \leq q \leq Q_b,$$

$$(\mathbb{F}_N^q)_n := f^q(\phi_n), \quad 1 \leq n \leq N, \quad 1 \leq q \leq Q_f.$$

Online-Phase Für einen gegebenen Parametervektor $\mu \in \mathcal{P}$ werten wir die parameterabhängigen Koeffizientenfunktionen $\theta_b^q(\mu), \theta_f^q(\mu)$ für $1 \leq q \leq Q_b, Q_f$ aus und assemblieren die Matrix und den Vektor

$$\mathbb{B}_N(\mu) := \sum_{q=1}^{Q_b} \theta_b^q(\mu) \mathbb{B}_N^q \text{ bzw. } \mathbb{F}_N(\mu) := \sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) \mathbb{F}_N^q,$$

welche mit der Matrix und dem Vektor aus dem LGS (3.2) aus Satz 3.26 übereinstimmen. Dieses LGS kann dann nach $u_N(\mu)$ und $s_N(\mu)$ gelöst werden.

3.32 Bemerkung

Die Matrizen $\mathbb{B}_N^q \in \mathbb{R}^{N \times N}$ und die Vektoren $\mathbb{F}_N^q \in \mathbb{R}^N$ können mit dem in Folgerung 3.28 beschriebenen Verfahren einfach aus den entsprechenden FE-Matrizen und den FE-Vektoren mit der in (3.6) definierten Transformationsmatrix assembliert werden.

3.33 Bemerkung (Rechenaufwand/Laufzeit)

- (1) Für die Berechnung der Snapshots und der anschließenden Assemblierung von $\mathbb{B}_N^q, \mathbb{F}_N^q$ benötigen wir $\mathcal{O}(N\mathcal{N}_h^2 + N^2\mathcal{N}_hQ_b + N\mathcal{N}_hQ_f)$ Rechenschritte. In der Online-Phase kann dann die Assemblierung und das Lösen von LGS (3.2) in $\mathcal{O}(N^2Q_b + NQ_f + N^3)$ Rechenschritten erfolgen. Insbesondere hängt die Komplexität der Online-Phase nicht von \mathcal{N}_h ab.
- (2) Die Offline/Online Zerlegung lässt sich auch in einem Laufzeitdiagramm veranschaulichen. $t_{hoch}, t_{offline}, t_{online}$ bezeichnen die Laufzeit für eine Lösung des hochdimensionalen, diskreten Problems $(P_h(\mu))$, die Offline- und die Online-Phase von $(P_N(\mu))$. Wir nehmen an, dass diese Zeiten für unterschiedliche Parameter jeweils dieselben sind und erhalten dadurch einen linearen Zusammenhang zwischen der gesamten benötigten Laufzeit und der Anzahl k von Berechnungen der Lösungen $u_h(\mu), u_N(\mu)$. Die Gesamtlaufzeit für k hochdimensionale Lösungen ist $t_h(k) = k \cdot t_{hoch}$, während das reduzierte Modell eine Laufzeit von $t_N(k) = t_{offline} + k \cdot t_{online}$ benötigt. Wie bereits in 3.29 erwähnt lohnt sich ein RB-Modell bei mehr als $k^* := \frac{t_{offline}}{t_{hoch} - t_{online}}$ benötigten Approximationen von $u(\mu)$.

3.4 A posteriori Fehlerschätzer

3.4.1 A posteriori Fehlerschranken und Effektivität

3.34 Lemma (Fehler-Residuum Beziehung)

Für $\mu \in \mathcal{P}$ definieren wir mittels der RB-Lösung $u_N(\mu)$ das Residuum $r(\cdot; \mu) \in X_h'$ durch

$$r(v; \mu) := f(v; \mu) - b(u_N(\mu), v; \mu) \forall v \in X_h \quad (3.7)$$

und den zugehörigen Riesz-Repräsentanten $R(\mu) \in X_h$ als Lösung von

$$(R(\mu), v)_X = r(v; \mu) \quad \forall v \in X_h. \quad (3.8)$$

Dann erfüllt der Fehler $e_N(\mu) := u_h(\mu) - u_N(\mu)$

$$b(e_N(\mu), v; \mu) = r(v; \mu) \quad \forall v \in X_h. \quad (3.9)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} b(e_N(\mu), v; \mu) &= b(u_h(\mu) - u_N(\mu), v; \mu) \\ &= b(u_h(\mu), v; \mu) - b(u_N(\mu), v; \mu) \\ &= f(v; \mu) - b(u_N(\mu), v; \mu) = r(v; \mu) \end{aligned}$$

□

3.35 Satz (A posteriori Fehlerschätzer)

Für $\mu \in \mathcal{P}$ seien $u_h(\mu), s_h(\mu)$ Lösungen von $(P_h(\mu))$ und $u_N(\mu), s_N(\mu)$ Lösungen von $(P_N(\mu))$. Ferner sei $\alpha_{LB}(\mu) > 0$ eine berechenbare untere Schranke für die Koerzitivitätskonstante $\alpha_h(\mu)$ von $b(\cdot, \cdot; \mu)$ und $R(\mu)$ der Riesz-Repräsentant des Residuums aus Lemma 3.34. Dann erfüllen die A posteriori Fehlerschätzer, definiert durch

$$\Delta_N^{en}(\mu) := \frac{\|R(\mu)\|_X}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}} \quad \text{und} \quad \Delta_N^s(\mu) := \frac{\|R(\mu)\|_X^2}{\alpha_{LB}(\mu)}, \quad (3.10)$$

die folgenden Ungleichungen

$$|||u_h(\mu) - u_N(\mu)|||_\mu = |||e_N(\mu)|||_\mu \leq \Delta_N^{en}(\mu) \quad (3.11)$$

$$s_h(\mu) - s_N(\mu) \leq \Delta_N^s(\mu). \quad (3.12)$$

Beweis:

Testen von Gleichung (3.9) mit $e_N(\mu)$ ergibt:

$$\begin{aligned} |||e_N(\mu)|||_\mu &\stackrel{Def}{=} b(e_N(\mu), e_N(\mu); \mu) \stackrel{(3.9)}{=} r(e_N(\mu); \mu) \\ &\stackrel{(3.8)}{=} (R(\mu), e_N(\mu))_X \stackrel{C.S.}{\leq} \|R(\mu)\|_X \|e_N(\mu)\|_X \\ &\stackrel{3.4}{=} \frac{1}{\sqrt{\alpha_h(\mu)}} \|R(\mu)\|_X |||e_N(\mu)|||_\mu \leq \frac{1}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}} \|R(\mu)\|_X |||e_N(\mu)|||_\mu \\ &\Rightarrow |||e_N(\mu)|||_\mu \leq \Delta_N^{en}(\mu) \Rightarrow (3.11) \end{aligned}$$

Aus Satz 3.19 folgt

$$s_h(\mu) - s_N(\mu) = |||e_n(\mu)|||_\mu^2 \leq (\Delta_N^{en}(\mu))^2 = \Delta_N^s(\mu).$$

□

3.36 Folgerung

Durch $\hat{s}_N(\mu) := s_N(\mu) + \Delta_N^s(\mu)$ ist eine obere Schranke für $s_h(\mu)$ gegeben, das heißt es gilt

$$s_h(\mu) \leq \hat{s}_N(\mu).$$

Beweis:

Folgt direkt aus (3.12).

3.37 Bemerkung

Das Beschränken des Fehlers durch das Residuum ist eine Standardtechnik zum Herleiten von A posteriori Fehlerschätzern für FEM. Da in diesem Fall dein Schätzer für den Fehler $|||u(\mu) - u_h(\mu)|||_\mu$ gesucht wird, ist X unendlich-dimensional und die Norm $\|r(\cdot; \mu)\|_{X'}$ kann nicht berechnet werden. Im Fall von RB Methoden ist $\|r(\cdot; \mu)\|_{X'_h}$ mit Hilfe des Riesz-Repräsentanten berechenbar.

3.38 Bemerkung

Da $\Delta_N^{en}(\mu)$ und $\Delta_N^s(\mu)$ unter den Voraussetzungen von Satz 3.35 obere Schranken für die Fehler sind, werden sie auch als rigorose Fehlerschranken bezeichnet. Bei A posteriori Fehlerschätzern für FEM treten häufig Konstanten in den Abschätzungen auf, welche nicht entsprechend nach oben/unten durch berechenbare Konstanten beschränkt werden können, so dass in diesen Fällen die A posteriori Fehlerschätzer den Fehler auch unterschätzen können; sie also keine rigorose Fehlerschranken zu sein brauchen. Mit Hilfe des Fehlerschätzers können wir die Dimension des RB-Raumes so bestimmen, dass der Approximationsfehler kleiner als eine vorgegebene Toleranz ist. Um ein möglichst effizientes Verfahren zu erhalten ist es daher wünschenswert, dass der Quotient $\frac{\Delta_N^{en}(\mu)}{|||e_N(\mu)|||_\mu}$ möglichst nahe an 1 ist. Er ist ≥ 1 wegen Satz 3.35. Diesen Quotienten werden wir im Folgenden weiter untersuchen.

3.39 Satz (Effektivitäten der Fehlerschätzer)

Wir definieren die Effektivitäten $\eta_N^{en}(\mu)$ und $\eta_N^s(\mu)$ der Fehlerschätzer $\Delta_N^{en}(\mu)$ und $\Delta_N^s(\mu)$, definiert in (3.10), durch

$$\eta_N^{en}(\mu) := \frac{\Delta_N^{en}(\mu)}{|||u_h(\mu) - u_N(\mu)|||_\mu} \text{ und } \eta_N^s(\mu) := \frac{\Delta_N^s(\mu)}{s_h(\mu) - s_N(\mu)}. \quad (3.13)$$

Unter den Voraussetzungen von Satz 3.35 gilt dann

$$\eta_N^{en}(\mu) \leq \sqrt{\frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}} \text{ und} \quad (3.14)$$

$$\eta_N^s(\mu) \leq \frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}. \quad (3.15)$$

Beweis:

Zunächst folgt aus der Definition de Riesz-Repräsentanten und des Residuums in Lemma 3.34:

$$\begin{aligned} \|R(\mu)\|_X^2 &= (R(\mu), R(\mu))_X \stackrel{(3.8)}{=} r(R(\mu); \mu) \\ &\stackrel{(3.9)}{=} b(e_N(\mu), R(\mu); \mu) \stackrel{C.S.}{\leq} |||e_N(\mu)|||_\mu |||R(\mu)|||_\mu \\ &\stackrel{3.4}{\leq} |||e_N(\mu)|||_\mu \sqrt{\gamma(\mu)} \|R(\mu)\|_X. \\ \Rightarrow \|R(\mu)\|_X &\leq |||e_N(\mu)|||_\mu \sqrt{\gamma(\mu)} \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned}\eta_N^{en}(\mu) &= \frac{\Delta_N^{en}(\mu)}{|||e_N(\mu)|||_\mu} \stackrel{Def}{=} \frac{\|R(\mu)\|_X}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)} |||e_N(\mu)|||_\mu} \\ &\stackrel{(3.16)}{\leq} \sqrt{\frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}} \frac{|||e_N(\mu)|||_\mu}{|||e_N(\mu)|||_\mu} \\ &\Rightarrow (3.14)\end{aligned}$$

Aus Satz 3.19 folgt dann:

$$\eta_N^s(\mu) \stackrel{Def}{=} \frac{\Delta_N^s(\mu)}{s_h(\mu)s_N(\mu)} \stackrel{Def/3.19}{=} \frac{(\Delta_N^{en}(\mu))^2}{|||e_N(\mu)|||_\mu^2} \stackrel{(3.14)}{\leq} \frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)} \Rightarrow (3.15).$$

3.40 Folgerung

Falls $u_h(\mu) = u_N(\mu)$ dann gilt automatisch $\Delta_N^{en}(\mu) = \Delta_N^s(\mu) = 0$.

Beweis:

Folgt direkt aus Satz 3.39, kann aber auch unabhängig davon wie folgt eingesehen werden: Da $0 = b(0, v; \mu) = b(e_N(\mu), v; \mu) \stackrel{(3.9)}{=} r(v; \mu) \stackrel{(3.8)}{=} (R(\mu), v)_X$ für alle $v \in X$ gilt, folgt $\|R(\mu)\|_X = 0$ und damit $\Delta_N^{en}(\mu) = \Delta_N^s(\mu) = 0$.

3.41 Bemerkung

Folgerung 3.40 ist insbesondere dann relevant, wenn für einen Fehlerschätzer Schranken für die Effektivität (noch) nicht verfügbar sind.

3.42 Folgerung (Fehlerschätzer für die X -Norm)

Unter den Voraussetzungen von Satz 3.35 gilt für den Fehlerschätzer $\Delta_N(\mu) := \frac{\|R(\mu)\|_X}{\alpha_{LB}(\mu)}$, dass

$$\|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_X \leq \Delta_N(\mu).$$

Ferner gilt für die Effektivität des Fehlerschätzers $\eta_N(\mu) := \frac{\Delta_N(\mu)}{\|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_X}$ die folgende Schranke

$$\eta_N(\mu) \leq \frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}.$$

Beweis:

Analog zu den Beweisen von Satz 3.35/3.39 unter Verwendung von Lemma 3.4. □

Zusätzlich zu absoluten Fehlerschätzern wollen wir schließlich noch relative Fehlerschätzer herleiten und die zugehörigen Effektivitäten untersuchen.

3.34 Satz (Relative Fehlerschätzer)

Wir definieren die relativen Fehlerschätzer

$$\Delta_N^{en,rel}(\mu) := 2 \frac{\|R(\mu)\|_X}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}} \cdot \frac{1}{|||u_N(\mu)|||_\mu}$$

für den relativen Fehler in der Energienorm,

$$\Delta_N^{rel}(\mu) := 2 \frac{\|R(\mu)\|_X}{\alpha_{LB}(\mu)} \cdot \frac{1}{\|u_N(\mu)\|_X}$$

für den relativen Fehler in der X -Norm und

$$\Delta_N^{s,rel}(\mu) := \frac{\|R(\mu)\|_X^2}{\alpha_{LB}(\mu)s_N(\mu)}$$

für den relativen Ausgabefehler. Dann gilt unter den Voraussetzungen von Satz 3.35 und falls $\Delta_N^{en,rel}(\mu) \leq 1$, $\Delta_N^{rel}(\mu) \leq 1$

$$\frac{|||u_h(\mu) - u_N(\mu)|||_\mu}{|||u_h(\mu)|||_\mu} \leq \Delta_N^{en,rel}(\mu), \quad (3.17)$$

$$\frac{\|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_X}{\|u_h(\mu)\|_X} \leq \Delta_N^{rel}(\mu), \quad (3.18)$$

$$\frac{s_h(\mu) - s_N(\mu)}{s_h(\mu)} \leq \Delta_N^{s,rel}(\mu). \quad (3.19)$$

Beweis:

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

$$\left| \frac{|||u_h(\mu)|||_\mu - |||u_N(\mu)|||_\mu}{|||u_N(\mu)|||_\mu} \right| \leq \frac{|||u_h(\mu) - u_N(\mu)|||_\mu}{|||u_N(\mu)|||_\mu} \stackrel{(3.11)}{\leq} \frac{\|R(\mu)\|_X}{\alpha_{LB}(\mu)|||u_N(\mu)|||_\mu} = \frac{\Delta_N^{en,rel}(\mu)}{2} \leq \frac{1}{2}. \quad (3.20)$$

Aus (3.20) folgt:

$$\begin{aligned} |||u_N(\mu)|||_\mu - |||u_h(\mu)|||_\mu &\leq \frac{1}{2} |||u_N(\mu)|||_\mu \\ \Rightarrow \frac{1}{2} |||u_N(\mu)|||_\mu &\leq |||u_h(\mu)|||_\mu. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Damit gilt:

$$\frac{|||e_N(\mu)|||_\mu}{|||u_h(\mu)|||_\mu} \stackrel{(3.11)}{\leq} \frac{\|R(\mu)\|_X}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}|||u_h(\mu)|||_\mu} \stackrel{(3.21)}{\leq} \frac{\|R(\mu)\|_X}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)}|||u_N(\mu)|||_\mu} \cdot 2 = \Delta_N^{en,rel}(\mu).$$

Daraus folgt (3.17). Und (3.18) folgt analog zu (3.17). Schließlich gilt

$$\frac{s_h(\mu) - s_N(\mu)}{s_h(\mu)} \stackrel{(3.12)}{\leq} \frac{\Delta_N^s(\mu)}{s_h(\mu)} \stackrel{3.19}{\leq} \frac{\Delta_N^s(\mu)}{s_N(\mu)} = \Delta_N^{s,rel}(\mu).$$

□

3.44 Satz (Effektivitäten der relativen Fehlerschätzer)

Wir definieren die Effektivitäten der relativen Fehlerschätzer $\eta_N^{en,rel}(\mu)$, $\eta_N^{rel}(\mu)$, $\eta_N^{s,rel}(\mu)$ wie folgt:

$$\eta_N^{en,rel}(\mu) := \frac{\Delta_N^{en,rel}(\mu)}{|||e_N(\mu)|||_\mu / |||u_h(\mu)|||_\mu}, \quad \eta_N^{rel}(\mu) := \frac{\Delta_N^{rel}(\mu)}{\|e_N(\mu)\|_X / \|u_h(\mu)\|_X}, \quad \eta_N^{s,rel}(\mu) := \frac{\Delta_N^{s,rel}(\mu)}{(s_h(\mu) - s_N(\mu)) / s_h(\mu)}.$$

Dann gilt unter den Voraussetzungen von Satz 3.35, falls $\Delta_N^{en,rel}(\mu) \leq 1$, $\Delta_N^{rel}(\mu) \leq 1$, $\Delta_N^{s,rel}(\mu) \leq 1$:

$$\Delta_N^{en,rel}(\mu) \leq 3 \sqrt{\frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}}, \quad (3.21b)$$

$$\Delta_N^{rel}(\mu) \leq 3 \frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)} \quad (3.22)$$

$$\eta_N^{s,rel}(\mu) \leq 2 \frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}. \quad (3.23)$$

Beweis:

Wie in Beweis von Satz 3.43 impliziert $\Delta_N^{en,rel}(\mu) \leq 1$ dass

$$\left| \frac{|||u_h(\mu)|||_\mu - |||u_N(\mu)|||_\mu}{|||u_N(\mu)|||_\mu} \right| \leq \frac{1}{2}.$$

Damit gilt $|||u_h(\mu)|||_\mu - |||u_N(\mu)|||_\mu \leq \frac{1}{2} |||u_N(\mu)|||_\mu$ und damit

$$|||u_h(\mu)|||_\mu \leq \frac{3}{2} |||u_N(\mu)|||_\mu. \quad (3.24)$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} \eta_N^{en,rel}(\mu) &\stackrel{Def}{=} \frac{2 \|R(\mu)\|_X}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)} |||u_h(\mu)|||_\mu} \frac{|||u_h(\mu)|||_\mu}{|||e_N(\mu)|||_\mu} \\ &\stackrel{(3.16)}{\leq} 2 \frac{\sqrt{\gamma(\mu)} \|e_N(\mu)\|_X}{\sqrt{\alpha_{LB}(\mu)} |||u_h(\mu)|||_\mu} \frac{|||u_h(\mu)|||_\mu}{|||e_N(\mu)|||_\mu} \stackrel{(3.24)}{\leq} 3 \sqrt{\frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)}} \Rightarrow (3.21b). \end{aligned}$$

(3.22) folgt analog zu (3.21b). Schließlich gilt

$$\eta_N^{s,rel}(\mu) = \frac{\Delta_N^s(\mu)/s_N(\mu)}{(s_h(\mu) - s_N(\mu))/s_h(\mu)} = \eta_N^s(\mu) \frac{s_h(\mu)}{s_N(\mu)} \stackrel{(3.15)}{\leq} \frac{\gamma(\mu)}{\alpha_{LB}(\mu)} \frac{s_h(\mu)}{s_N(\mu)}.$$

Der letzte Faktor ist beschränkt, da

$$\frac{s_h(\mu)}{s_N(\mu)} = 1 + \frac{s_h(\mu) - s_N(\mu)}{s_N(\mu)} \stackrel{(3.19)}{\leq} 1 + \Delta_N^{s,rel}(\mu) \leq 2 \Rightarrow (3.23).$$

□

3.45 Bemerkung

Durch "Tauschen" des Skalarprodukts/der Norm auf X_h können die Fehlerschätzer und Effektivitäten verbessert werden, ohne die Ausgabe des reduzierten Modells oder die reduzierte Lösung zu verändern. Wähle $\bar{\mu} \in \mathcal{P}$ fest und betrachte auf X_h das Skalarprodukt $((\cdot, \cdot))_{\bar{\mu}}$ mit induzierter Norm $|||\cdot|||_{\bar{\mu}}$. Wegen Lemma 3.4 Normäquivalenz folgt aus der Stetigkeit und Koerzivität der Bilinearform b auf X_h bzgl. der X -Norm die Stetigkeit und Koerzivität auf X_h bzgl. der $|||\cdot|||_{\bar{\mu}}$ -Norm und umgekehrt. Gleiches gilt für die Stetigkeit von l und f . Dann gilt $\alpha_h(\bar{\mu}) := \inf_{v \in X_h} \frac{b(v, v; \bar{\mu})}{|||v|||_{\bar{\mu}}^2} = 1$ und $\gamma_h(\bar{\mu}) := \sup_{u, v \in X_h} \frac{b(u, v; \bar{\mu})}{|||u|||_{\bar{\mu}} |||v|||_{\bar{\mu}}} = \sup_{u, v \in X_h} \frac{((u, v))_{\bar{\mu}}}{|||u|||_{\bar{\mu}} |||v|||_{\bar{\mu}}} \leq 1$. Für einen Fehlerschätzer welcher auf der $|||\cdot|||_{\bar{\mu}}$ -Norm des Riesz-Repräsentanten $R(\mu)$ basiert gilt also $\eta(\bar{\mu}) = 1$. Er ist in diesem Sinne optimal. Nimmt man an, dass $\alpha_h(\mu)$ und $\gamma_h(\mu)$ stetig von Parameter μ abhängen, kann man erwarten auch in einer Umgebung von $\bar{\mu}$ sehr effektive Fehlerschätzer zu erhalten.

3.4.2 Offline/Online-Zerlegung des Fehlerschätzers

Damit wir in der Online-Phase verifizieren können, dass der Approximationsfehler unter einer vorgegeben Toleranz liegt, ist es wichtig, dass wir auch den Fehlerschätzer Offline/Online zerlegen können. Die Erkenntnis, dass sich die affine Parameterabhängigkeit der Bilinearform b und der Linearform f auf das

Residuum und die Norm des Riesz-Repräsentanten überträgt ist hierbei von zentraler Bedeutung. Mit Lemma 3.34 und der affinen Parameterabhängigkeit von b und f folgt:

$$\begin{aligned} (R(\mu), v) &= r(v; \mu) = f(v; \mu) - b(u_N(\mu), v; \mu) \\ &= \sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) f^q(v) - \sum_{q=1}^{Q_b} \sum_{n=1}^N \theta_b^q(\mu) U_n^N(\mu) b^q(\phi_n, v). \end{aligned}$$

Nach dem Riesz'schen Darstellungssatz 2.9 existieren $R_f^q \in X - h$ mit

$$(R_f^q, v)_X = f^q(v) \quad \forall v \in X_h, \quad 1 \leq q \leq Q_f \quad (3.25)$$

und $R_b^{q,n} \in X_h$ mit

$$(R_b^{q,n}, v)_X = b^q(\phi_n, v) \quad \forall v \in X_h, \quad 1 \leq q \leq Q_b, \quad 1 \leq n \leq N. \quad (3.26)$$

Daher können wir weiter umformen:

$$\begin{aligned} (R(\mu), v)_X &= \sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) (R_f^q, v)_X - \sum_{q=1}^{Q_b} \sum_{n=1}^N \theta_b^q(\mu) U_n^N(\mu) (R_b^{q,n}, v)_X \\ &= \left(\sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) R_f^q - \sum_{q=1}^{Q_b} \sum_{n=1}^N \theta_b^q(\mu) U_n^N(\mu) R_b^{q,n}, v \right)_X \quad \forall v \in X_h \\ &\Rightarrow R(\mu) = \sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) R_f^q - \sum_{q=1}^{Q_b} \sum_{n=1}^N \theta_b^q(\mu) U_n^N(\mu) R_b^{q,n}. \end{aligned}$$

Wir fassen dieses Resultat im folgenden Lemma zusammen.

3.46 Lemma (Affine Parameterabhängigkeit von $R(\mu)$)

Seien b, f affin parametrisch und $R_f^q, R_b^{q,n} \in X_h$ definiert wie in (3.25)/(3.26). Sei $Q_R := Q_f + N \cdot Q_b$ und R_R^q für $1 \leq q \leq Q_R$ eine Aufzählung von $R_f^q, R_b^{q,n}$:

$$(R_R^1, \dots, R_R^{Q_R}) := (R_f^1, \dots, R_f^{Q_f}, R_b^{1,1}, \dots, R_b^{Q_b,1}, R_b^{1,2}, \dots, R_b^{Q_b,2}, \dots, R_b^{1,N}, \dots, R_b^{Q_b,N}).$$

Für $\mu \in \mathcal{P}$ sei $u_N(\mu) = \sum_{n=1}^N U_n^N(\mu) \phi_n$ die Lösung von $(P_N(\mu))$. Dann definieren wir $\theta_R^q : \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$, $1 \leq q \leq Q_R$ durch

$$(\theta_R^1(\mu), \dots, \theta_R^{Q_R}(\mu)) := (\theta_f^1(\mu), \dots, \theta_f^{Q_f}(\mu), -\theta_b^1(\mu) U_1^N(\mu), \dots, -\theta_b^{Q_b}(\mu), \dots, -\theta_b^{Q_b}(\mu) U_N^N(\mu)).$$

Dann ist der Riesz-Repräsentant $R(\mu) \in X_h$ des Residuums affin parametrisch:

$$R(\mu) = \sum_{q=1}^{Q_R} \theta_R^q(\mu) R_R^q.$$

3.47 Lemma

Sei $g \in X_h'$ und $\bar{\varphi}_i$, $1 = 1, \dots, N_h$ die Knotenbasis von X_h wie in Def 2.50 definiert. Dann definieren wir die (Skalarprodukt-)Matrix $\mathbb{X}_h \in \mathbb{R}^{N_h \times N_h}$ durch

$$(\mathbb{X})_{ij} := (\bar{\varphi}_j, \bar{\varphi}_i)_X, \quad 1 \leq i, j \leq N_h.$$

Indem wir den Riesz-Repräsentanten $v_g \in X_h$ zu $g \in X'_h$ in der Knotenbasis darstellen:

$$v_g = \sum_{i=1}^{N_h} V_g^i \bar{\varphi}_i$$

erhalten wir den Koeffizientenvektor $\mathbb{V}_g = (V_g^1, \dots, V_g^{N_h}) \in \mathbb{R}^{N_h}$ und damit v_g durch Lösen des linearen Gleichungssystems

$$\mathbb{X}_h \mathbb{V}_g = \mathbb{G}, \text{ wobei } \mathbb{G} := (g(\bar{\varphi}_1), \dots, g(\bar{\varphi}_{N_h})) \in \mathbb{R}^{N_h}.$$

Beweis:

Betrachte dazu eine beliebige Testfunktion $w = \sum_{i=1}^{N_h} W_i \bar{\varphi}_i \in X_h$ mit Koeffizientenvektor $\mathbb{W} = (W_1, \dots, W_{N_h})$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} g(w) &= \sum_{i=1}^{N_h} W_i g(\bar{\varphi}_i) = \mathbb{W}^T \mathbb{G} = \mathbb{W}^T \mathbb{X}_h \mathbb{V}_g \\ &= \left(\sum_{i=1}^{N_h} V_g^i \bar{\varphi}_i, \sum_{j=1}^{N_h} W_j \bar{\varphi}_j \right)_X = (v_g, w)_X. \end{aligned}$$

□

Da $R(\mu)$ affin parametrisch ist, können wir die Berechnung der entsprechenden Norm in eine Offline- und eine Online-Phase zerlegen.

3.48 Satz (Offline/Online-Zerlegung von $\|R(\mu)\|$)

Offline-Phase: Nach der Offline-Phase des RB-Modells wie in Folgerung 3.31 beschrieben, assemblieren wir die Matrix $\mathbb{K} \in \mathbb{R}^{Q_R \times Q_R}$ definiert durch

$$\mathbb{K}_{ij} := (R_R^j, R_R^i)_X, \quad 1 \leq i, j \leq Q_R$$

unter der Verwendung der Matrix \mathbb{X}_h .

Online-Phase: Für gegebenes μ und berechnete RB-Lösung $u_N(\mu)$ bestimmen wir den Koeffizientenvektor $\hat{\theta}_R(\mu) := (\theta_R^1(\mu), \dots, \theta_R^{Q_R}(\mu))^T \in \mathbb{R}^{Q_R}$ und erhalten

$$\|R(\mu)\|_X = \sqrt{\hat{\theta}_R(\mu)^T \mathbb{K} \hat{\theta}_R(\mu)}.$$

Beweis:

$$\|R(\mu)\|_X^2 = \left(\sum_{q=1}^{Q_R} \theta_R^q(\mu) R_R^q, \sum_{q'=1}^{Q_R} \theta_R^{q'}(\mu) R_R^{q'} \right)_X = \hat{\theta}_R^T(\mu) \mathbb{K} \hat{\theta}_R(\mu).$$

Ferner benötigen wir für die relativen Fehlerschätzer die Norm von $u_N(\mu)$.

3.49 Satz (Offline/Online Zerlegung der Norm von $U_N(\mu)$)

Offline-Phase: Im Fall von $\Delta_N^{rel}(\mu)$ assemblieren wir nach der in Folgerung 3.31 beschriebenen Offline-Phase des RB-Modells die reduzierte (Skalarprodukt-)Matrix $\mathbb{X}_N \in \mathbb{R}^{N \times N}$ definiert durch

$$(\mathbb{X}_N)_{nm} := (\phi_m, \phi_n)_X.$$

Online-Phase: Für gegebenes μ und wie in Folgerung 3.31 beschrieben berechnetes $u_N(\mu) = \sum_{n=1}^N U_n^N(\mu) \phi_n$ mit Koeffizientenvektor $\mathbb{U}_N(\mu) = (U_1^N(\mu), \dots, U_N^N(\mu))$ berechnen wir $\|u_N(\mu)\|_X = \sqrt{\mathbb{U}_N^T(\mu) \mathbb{X}_N \mathbb{U}_N(\mu)}$ für $\Delta_N^{rel}(\mu)$ oder $\|u_N(\mu)\|_\mu = \sqrt{\mathbb{U}_N^T(\mu) \mathbb{B}_N(\mu) \mathbb{U}_N(\mu)}$ für $\Delta_N^{en,rel}(\mu)$, wobei $\mathbb{B}_N(\mu)$ definiert wie in Satz 3.26.

Beweis:

$$\|u_N(\mu)\|_\mu^2 = b(u_N(\mu), u_N(\mu); \mu) = \sum_{n,m=1}^N U_n^N(\mu) U_m^N(\mu) b(\phi_n(\mu), \phi_m(\mu); \mu) = \mathbb{U}_N^T(\mu) \mathbb{B}_N(\mu) \mathbb{U}_N(\mu).$$

Wie in Folgerung 3.28 können wir mit Hilfe der Transformationsmatrix $\mathbb{V} \in \mathbb{R}^{N_h \times N}$, definiert durch

$$\mathbb{V}_{in} := \phi_n^i, \quad 1 \leq i \leq N_h, \quad 1 \leq n \leq N,$$

$\mathbb{X}_N = \mathbb{V}^T \mathbb{X}_N \mathbb{V}$ folgern. Der Beweis für $\|u_N(\mu)\|_X$ geht dann analog.

Schließlich benötigen wir noch eine untere Schranke für die Koerzitivitätskonstante $\alpha_{LB}(\mu)$. Falls b gleichmäßig koerziv bzgl. μ mit $\inf_{\mu \in \mathcal{P}} \alpha_h(\mu) \geq \alpha_0$ und α_0 analytisch bestimmbar oder berechenbar, kann α_0 gewählt werden. Für manche Randwertprobleme können wir sogar $\alpha(\mu)$ analytisch bestimmen und dann $\alpha_{LB}(\mu) = \alpha(\mu)$ wählen.

Im allgemeinen Fall lässt sich unter bestimmten Voraussetzungen die sogenannte **Min-Theta-Methode** anwenden.

3.50 Satz (Min-Theta-Methode zur Berechnung von $\alpha_{LB}(\mu)$)

Sei b koerziv und affin parametrisch mit $b^q(v, v) \geq 0 \quad \forall v \in X_h$ und $\theta_b^q(\mu) > 0 \quad \forall \mu \in \mathcal{P}, \quad q = 1, \dots, Q_b$. Sei $\mu \in \mathcal{P}$ fest und $\alpha_h(\mu)$ bekannt. Dann gilt

$$0 < \alpha_{LB}(\mu) \leq \alpha_h(\mu) \quad \forall \mu \in \mathcal{P}$$

mit der unteren Schranke

$$\alpha_{LB}(\mu) := \alpha_h(\bar{\mu}) \cdot \min_{q=1, \dots, Q_b} \frac{\theta_b^q(\mu)}{\theta_b^q(\bar{\mu})}.$$

Beweis:

Da $\alpha_h(\mu) > 0$ und $0 < c(\mu) := \min_{q=1, \dots, Q_b} \frac{\theta_b^q(\mu)}{\theta_b^q(\bar{\mu})}$, gilt

$$0 < \alpha_h(\mu) c(\mu) = \alpha_{LB}(\mu).$$

Für alle $v \in X_h$ gilt dann:

$$\begin{aligned} b(v, v; \mu) &= \sum_{q=1}^{Q_b} \theta_b^q(\mu) b^q(v, v) = \sum_{q=1}^{Q_b} \frac{\theta_b^q(\mu)}{\theta_b^q(\bar{\mu})} \theta_b^q(\bar{\mu}) b^q(v, v) \\ &\geq \sum_{q=1}^{Q_b} \left(\min_{q=1, \dots, Q_b} \frac{\theta_b^q(\mu)}{\theta_b^q(\bar{\mu})} \right) \theta_b^q(\bar{\mu}) b^q(v, v) \\ &= c(\mu) b(v, v; \bar{\mu}) \geq c(\mu) \alpha_h(\bar{\mu}) \|v\|_X^2 = \alpha_{LB}(\mu) \|v\|_X^2. \end{aligned}$$

Also insbesondere:

$$\alpha_h(\mu) := \min_{v \in X_h} \frac{b(v, v; \mu)}{\|v\|_X^2} \geq \alpha_{LB}(\mu).$$

□

Fpr die Min-Theta-Methode benötigen wir eine Auswertung von $\alpha_h(\mu)$ für $\mu = \bar{\mu}$ in der Offline-Phase. Dazu ist es im Allgemeinen notwendig ein hochdimensionales Eigenwertproblem zu lösen.

3.51 Satz (Berechnung von $\alpha_h(\mu)$ für das hochdimensionale, diskrete Modell)

Sei $\mathbb{B}_h(\mu)$ definiert wie in (3.4) und \mathbb{X}_h definiert wie in Lemma 3.47. Dann ist

$$\alpha_h(\mu) = \lambda_{\min}(\mathbb{X}_h^{-1}\mathbb{B}_h(\mu)), \quad (3.27)$$

wobei λ_{\min} der kleinste Eigenwert der Matrix $\mathbb{X}_h^{-1}\mathbb{B}_h(\mu)$ bezeichnet.

Beweis:

Da \mathbb{X}_h symmetrisch und positiv definit, lässt sich \mathbb{X}_h mittels Cholesky-Zerlegung als $\mathbb{X}_h = \mathbb{L}\mathbb{L}^T$ darstellen. Mittels Substitution erhalten wir ($y \neq 0$):

$$\alpha_h(\mu) = \inf_{y \in X_h} \frac{b(y, y; \mu)}{\|y\|_X^2} = \inf_{Y \in \mathbb{R}^{N_h}} \frac{Y^T \mathbb{B}_h(\mu) Y}{Y^T \mathbb{X}_h Y}$$

mit $W := \mathbb{L}^T Y = \inf_W \in \mathbb{R}^{N_h} \frac{(\mathbb{L}^{-T} W)^T \mathbb{B}_h(\mu) (\mathbb{L}^{-T} W)}{(\mathbb{L}^{-T} W)^T \mathbb{L} \mathbb{L}^T (\mathbb{L}^{-T} W)} = \inf_W \in \mathbb{R}^{N_h} \frac{W^T \mathbb{L}^{-1} \mathbb{B}_h(\mu) \mathbb{L}^{-T} W}{W^T W}.$

Damit minimiert $\alpha_h(\mu)$ den Rayleigh-Quotienten zur symmetrischen Matrix $\tilde{\mathbb{B}}_h(\mu) := \mathbb{L}^{-1} \mathbb{B}_h(\mu) \mathbb{L}^{-T}$.

Satz von Courant-Fischer (Minimum-Maximums Prinzip)

Ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch mit aufsteigend sortierten Eigenwerten $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ und bezeichnet X_i die Menge der i -dimensionalen Untervektorräume von \mathbb{R}^n , $i = 1, \dots, n$, dann hat der i -te Eigenwert von A die Darstellung:

$$\lambda_i = \min_{X \in X_i} \max_{x \in X, x \neq 0} \frac{(x, Ax)_2}{(x, x)} = \max_{X \in X_{n-i+1}} \min_{x \in X, x \neq 0} \frac{(x, Ax)_2}{(x, x)}.$$

Nach diesem Prinzip ist $\alpha_h(\mu)$ damit der kleinste Eigenwert von $\tilde{\mathbb{B}}_h(\mu)$. Da die Matrizen $\tilde{\mathbb{B}}_h(\mu)$ und $\mathbb{X}_h^{-1}\mathbb{B}_h(\mu)$ ähnlich sind, wegen

$$\mathbb{L}^T (\mathbb{X}_h^{-1} \mathbb{B}_h(\mu)) \mathbb{L}^{-T} = \mathbb{L}^T \mathbb{L}^{-T} \mathbb{L}^{-1} \mathbb{B}_h(\mu) \mathbb{L}^{-T} = \tilde{\mathbb{B}}_h(\mu)$$

und daher identische Eigenwerte haben, folgt damit die Behauptung.

3.52 Bemerkung

Da insbesondere die großen Matrizen \mathbb{X}_h nicht invertiert werden sollte, verwendet man in der Praxis entweder einen Eigenwertlöser, welcher nur mittels Matrix-Vektor Produkten operiert: Sobald das Produkt $Y = \mathbb{X}_h^{-1} \mathbb{B}_h(\mu) W$ berechnet werden muss, löst man stattdessen $\mathbb{X}_h Y = \mathbb{B}_h(\mu) W$. Alternativ können auch Löser für generalisierte Eigenwertprobleme der Form $\mathbb{B}_h(\mu) Y = \lambda \mathbb{X}_h Y$ verwendet werden.

5.53 Bemerkung

Auch im kontinuierlichen Fall kann man ein Eigenwertproblem betrachten und lösen um $\alpha(\mu)$ zu bestimmen. Siehe dazu das Buch von Haardonk.

3.54 Bemerkung

Für Probleme in denen man die Min-Theta-Methode nicht anwenden kann, kann man stattdessen die **Successive Constraint Methode** verwenden, siehe Buch von Huynh, Rozza, Sen und Patera.

3.55 Bemerkung

Damit können wir die Offline/Online Zerlegung des Fehlers wie folgt zusammenfassen: **Offline:** Berechnung des Riesz-Repräsentanten und Assemblierung der Matrix \mathbb{K} aus Satz 3.48 in

$$\mathcal{O}((Q_f + NQ_b)N_h^2 + (Q_f + NQ_b)^2 N_h) \text{ Rechenschritten.}$$

Für relativen Fehlerschätzer möglicherweise Assemblierung von X_N aus Satz 3.49. Falls die Min-Theta Methode verwendet wird, muss noch $\alpha_h(\bar{\mu})$ in $\mathcal{O}(N_h\sigma)$ mit $\sigma \geq 2$ einmalig berechnet werden, wie in Satz 3.51 beschrieben.

Online:

Wie in Satz 3.48 beschrieben bestimmen wir $\|R(\mu)\|_X$ in $\mathcal{O}((Q_f + NQ_b)^2)$ Rechenschritten. Für den rel. Fehlerschätzer berechnen wir zusätzlich entweder $\|u_N(\mu)\|_\mu$ in $\mathcal{O}(N^2)$ Rechenschritten oder $\|u_N(\mu)\|_X$ in $\mathcal{O}(N^2)$ Rechenschritten. Schließlich können wir für die Min-Theta Methode $\alpha_{LB}(\mu)$ in $\mathcal{O}(Q_b)$ Rechenschritten bestimmen.

Die Online Phase zur Bestimmung des Fehlerschätzers ist damit unabhängig von N_h . Da die reduzierte Lösung in $\mathcal{O}(N^3)$ Rechenschritten berechnet werden kann, ist für große Q_b die Berechnung des Fehlerschätzers aber möglicherweise der Teil, der Online Phase, welcher die meiste Zeit benötigt.

3.56 Bemerkung (Relevanz des Fehlerschätzers)

Fehlerschätzer werden in den RB Methoden sowohl in der Online Phase zur 'Certification' der Approximation, als auch in der Offline Phase zur Basisgenerierung eingesetzt, wie wir im nächsten Kapitel sehen werden.

4 Basiskonstruktion

Ziel:

- (1) Bestimmung eines 'möglichst guten' RB-Raumes $X_N = \text{span}\{u_h(\mu)\} \subset X_h$ mit Basis ϕ_N , welche $M := \{u_h(\mu) \mid \mu \in \mathcal{P}\}$ global approximiert.
- (2) Optimales X_N : formalisierbar durch Minimierung eines Funktional, z.B. minimiere den maximalen Energiefehler:

$$\min_{Y \subset X_h, \dim Y = N} \left(\max_{\mu \in \mathcal{P}} \|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_\mu \right) \quad (4.1)$$

oder Minimierung der mittleren Projektionsfehlers

$$\min_{Y \subset X_h, \dim Y = N} \int_{\mathcal{P}} \|u_h(\mu) - P_Y u_h(\mu)\|_X^2 d\mu, \quad (4.2)$$

wobei P_Y die orthogonale Projektion auf Y bezeichnet.

- (3) Gute Basis ϕ_N : orthogonal für numerische Stabilität; Hierarchie, so dass Basisvektoren nach Relevanz geordnet sind, d.h.

$$X_N := \text{span}\{\varphi_1, \dots, \varphi_{N'}\} \text{ Sequenz von optimalen Räumen,}$$

für $1 \leq N' \leq N$, damit N' Variation einer Fehlerkontrolle erlaubt.

Was wir formal unter einem optimalen Unterraum verstehen wollen, können wir mit Hilfe der sogenannten Kolmogorov- n -Weite beschreiben.

4.1 Definition (Kolmogorov- n -Weite, optimaler Unterraum)

Sei A eine kompakte Teilmenge in einem HR X . Zu einem abgeschlossenen Unterraum $X_n \subset X$ mit $\dim X_n = n$ nennen wir

$$\begin{aligned} E(X_n, A) &= \sup_{v \in A} \inf_{w \in X_n} \|v - w\|_X \\ &= \sup_{v \in A} \|v - P_{X_n} v\|_X \end{aligned}$$

Abstand von X_n zu A . Für $n \in \mathbb{N}$ nennen wir

$$d_n(A, X) := \inf_{X_n \subset X, \dim X_n = n} E(X_n, A) \quad (4.3)$$

die **Kolmogorov- n -Weite** der Menge A . Ein Unterraum $X_n \subset X$ mit $\dim X_n = n$, welcher die Kolmogorov- n -Weite minimiert heißt optimaler Unterraum für $d_n(A, X)$.

4.2 Bemerkung

- (1) Die Kolmogorov- n -Weite ist also ein Maß für die Bestapproximation durch lineare Unterräume.
- (2) Es gilt trivialerweise $d_0(A, X) = \sup \|v\|_X$ und falls $n_0 := \dim \text{span}(A) < \infty$, so gilt $d_n(A, X) = 0 \forall n \geq n_0$.

(3) Für $A = M \subset X_h$ mit $u_h(\mu)$ Lösung von $(P_h(\mu))$ und $u_N(\mu)$ Lösung von $(P_N(\mu))$ gilt also

$$\begin{aligned} \|u_N(\mu) - u_h(\mu)\|_X &\leq \sqrt{\frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)}} \inf_{v \in X_N} \|u_N(\mu) - v\| \\ &\leq E(X_n, M) \sup_{\mu \in P} \sqrt{\frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)}}. \end{aligned}$$

Falls also $E(X_n, M)$ und $\frac{\gamma(\mu)}{\alpha(\mu)}$ beschränkt, so ist der RB-Fehler klein.

(4) Präzise Werte für d_n sind selten bekannt. Für endliche Mengen der Einheitskugeln können aber exakte Werte der Schranken für d_n angegeben werden [Pinkus, 85].

(5) **Beispiel:** $A := \{v \in X \mid \|v\| \leq 1\}$ erfüllt $d_n(A, x) = 1$ für alle $n \leq \dim X$ und $d_n(A, X) = 0$ für $n \geq \dim X$.

(6) **Beispiel:** $A := [-1, 1]^m \subset X := \mathbb{R}^m$ erfüllt $d_n(A, X) = \sqrt{m - n}$ für alle $n \leq m$ und $d_n(A, X) = 0$ für $n \geq m$. Da die am Anfang des Kapitels genannten Optimierungsprobleme sehr komplex sind, treffen wir Vereinfachungen:

(i) **Diskretisierung des Parameterraums:**

Wähle endliche TM $S_{\text{train}} := \{\mu^i\}_{i=1}^{n_{\text{train}}} \subset P$ von Trainingsparametern, welche Trainingssnapshots $M_{\text{train}} := \{u_h(\mu) \mid \mu \in S_{\text{train}}\} \subset M$ definieren.

(ii) Schränke Optimierungsproblem auf S_{train} ein. Problem (4.2) wird dann in

$$\min_{Y \subset X_h, \dim Y = N} \frac{1}{n_{\text{train}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{train}}} \|u_h(\mu_i) - P_Y u_h(\mu_i)\|_X^2 \quad (4.4)$$

überführt.

Wir werden in Abschnitt 4.2 sehen, dass die sogenannten POD-Räume Optimierungsproblem (4.4) lösen. Zunächst beschäftigen wir uns jedoch mit dem Greedy-Algorithmus, welcher auf einer weiteren Approximation des Optimierungsproblems

$$\min_{Y \subset X_h, \dim Y = N} \max_{\mu \in S_{\text{train}}} \|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_\mu \quad (4.5)$$

beruht.

4.1 Greedy-Algorithmus

Da die Optimierung in (4.5) über die Unterräume immer noch ein sehr komplexes Optimierungsproblem ist, geht man stattdessen iterativ vor:

Wir konstruieren einen Approximationsraum, indem wir iterativ neue Basisfunktionen hinzufügen. Hierbei wird die neue Basisfunktion gerade so gewählt, dass sie den Ausdruck

$$\max_{\mu \in S_{\text{train}}} \|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_\mu$$

minimiert. Dies ist das Grundprinzip des **Greedy-Algorithmus**, welcher Schrittweise sowohl die Sample-Menge S_N als auch die Basis Φ_N erweitert. Ein wichtiger Bestandteil ist ein Fehlerindikator $\Delta(Y, \mu) \in \mathbb{R}^+$, welcher den zu erwartenden Approximationsfehler für den Parameter μ schätzt, wenn man $Y = X_N$ als den Approximationsraum wählt. Schließlich ist N_{max} eine vorgegebene maximale Dimension des Raumes X_N .

4.3 Definition (Greedy-Algorithmus)

Sei $S_{\text{train}} \subset P$ eine gegebene Trainingsmenge von Parametern und $\varepsilon_{\text{tol}} > 0$ eine gegebene Fehlertoleranz. Setze $X_0 := 0, S_0 := \emptyset, \Phi_0 := \emptyset$ und definiere iterativ:

```

1 for n in range(1, N_max):
2     Finde
3      $\mu^{(n)} := \operatorname{argmax}_{\mu \in S_{\text{train}}} \Delta(X_{n-1}, \mu)$ 
4      $S_n := S_{n-1} \cup \{\mu^{(n)}\}, \phi_n = u_h(\mu^{(n)}), \Phi_n := \Phi_{n-1} \cup \{\phi_n\}, X_n := \operatorname{span}\{\Phi_n\}$ 
5     if  $\max_{\mu \in S_{\text{train}}} \Delta(X_n, \mu) \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ :
6         break
7 N := n
return  $S_N, \Phi_N$ 

```

4.4 Bemerkung

Angenommen $N_{\text{max}} = |S_{\text{train}}|$. Wenn für alle $\mu \in P$ und Unterräume $Y \subset X_n$ gilt, dass

$$u_h(\mu) \in Y \Rightarrow \Delta(Y, \mu) = 0, \quad (4.6)$$

dann endet der Greedy-Algorithmus nach höchstens $N \leq |S_{\text{train}}|$. Dies liegt daran, dass (4.6) sicher stellt, dass kein Parameterwert in S_{train} zweimal gewählt wird.

4.5 Bemerkung

- (1) Der Greedy-Alg. erzeugt eine hierarchische Basis.
- (2) Φ_N erzeugt vom Greedy-Alg. ist eine Lagrange-RB Basis zur Samplmenge S_N , im Allgemeinen also nicht orthogonal. Um ein numerisch möglichst stabiles Verfahren zu erhalten, orthonomalisiert man die Basis mit Gram-Schmidt.

4.6 Bemerkung (Wahl des Fehlerindikators)

Es gibt verschiedene Möglichkeiten für die Wahl des Fehlerindikators $\Delta(Y, \mu)$ im Greedy-Alg.

- (1) **Projektionsfehler:** In manchen Fällen ist es sinnvoll im Greedy-Alg. den Bestapproximationsfehler zu verwenden:

$$\Delta(Y, \mu) := \inf_{v \in Y} \|u_h(\mu) - v\|_\mu = \|u_h(\mu) - P_Y u_h(\mu)\|_\mu.$$

Dieser Fehlerindikator ist teuer, da seine Auswertung Operationen erfordert, welche mit N_h skalieren. Daher kann S_{train} im Allgemeinen nur relativ klein gewählt werden. Ferner müssen alle Snapshots $u_h(\mu)$ verfügbar sein, was aus Speichergründen zusätzlich die Größe von S_{train} begrenzt. Der Vorteil dieser Fehlerindikatoren ist allerdings, dass weder ein RB Modell, noch ein a posteriori Fehlerschätzer für die Basisergänzung notwendig sind, was insbesondere für komplexe Probleme von Relevanz ist. Ferner schließen wir aus dem Céa-Lemma, dass der so konstruierte RB-Raum gute Approximationseigenschaften hat. Wir bezeichnen diese Version des Greedy-Alg. als 'strong greedy'.

- (2) **RB-Fehler zwischen $u_h(\mu)$ und $u_N(\mu)$:** Falls wir ein RB-Modell, aber kein Fehlerschätzer zur Verfügung haben, können wir als Fehlerindikator

$$\Delta(Y, \mu) = \|u_h(\mu) - u_N(\mu)\|_\mu$$

verwenden. Auch dieser Fehlerindikator ist teuer zu berechnen und benötigt alle Snapshots $u_h(\mu)$, was beides die Größe der Trainingsmenge S_{train} limitiert. Der Vorteil dieses Indikators ist, dass wir das Fehlermaß aus dem Optimierungsproblem in (4.5) betrachten.

- (3) **A posteriori Fehlerschätzer:** Falls ein Fehlerschätzer zur Verfügung steht verwendet man im Allgemeinen

$$\Delta(Y, \mu) = \Delta_N^{en}(\mu)$$

oder ein (relativen) Fehlerschätzer (für eine andere Norm). Da Aufgrund der Offline/Online Zerlegung die Auswertung von $\Delta(Y, \mu) = \Delta_N^{en}(\mu)$ sehr billig ist und wir während dieses Greedy-Alg. nur N -mal das hochdimensionale diskrete Modell $(P_h(\mu))$ lösen müssen, kann S_{train} sehr groß gewählt werden. Daher erwarten wir unter gewissen Voraussetzungen an den Fehlerschätzer $\Delta_N^{en}(\mu)$, dass wir mit diesem Fehlerindikator die Lösung des Optimierungsproblems, über den konstanten Parameterraum P , (4.1) besser approximieren können. Diese Version des Greedy-Alg. bezeichnen wir mit 'weak greedy'.

Alle drei Fehlerindikatoren erfüllen (4.6). Dies gilt trivialerweise für den Projektionsfehler, folgt aus der Reproduzierbarkeit von Lösungen in Folgerung 3.18 für den RB-Fehler und schließlich aus Folgerung 3.40 für den Fehlerschätzer.

4.7 Bemerkung

Alternativ kann man auch Fehlerindikatoren für die Ausgabe wie $|s_h(\mu) - s_N(\mu)|$ oder $\Delta_N^s(\mu)$ im Greedy-Alg. verwenden. Diese werden häufig auch als 'goal-oriented error indicators' bezeichnet. Letztere führen im Allgemeinen zu einem RB-Raum von niedriger Dimension, als die Indikatoren in Bemerkung 4.6, welcher $s_h(\mu)$, aber nicht notwendigerweise $u_h(\mu)$, gut approximiert. Im Gegensatz dazu resultieren die Indikatoren aus Bemerkung 4.6 in einer größeren Basis, welche sowohl $u_h(\mu)$, als auch $s_h(\mu)$ gut approximiert.

4.1.1 Konvergenzraten des Greedy-Algorithmus

Bis vor einigen Jahren wurde der Greedy-Alg. als heuristischer Algorithmus angesehen, welcher in der Praxis in vielen Fällen zwar ausgezeichnet funktioniert, dem aber die theoretische Grundlage fehlt. Dann wurden aber sehr nützliche exponentielle [Buffer, Meday, Pattera et al] und dann für algebraische Konvergenz [Biniv, Cohen et al] in HR und schließlich in [DeVore, Petrova et al] für Banachräume.

4.8 Satz (Konvergenzraten für Greedy-Alg.[BCDDPW,11])

Sei $M_e := \{u(\mu) \mid \mu \in P\}$, P kompakt und der Fehlerindikator $\Delta(Y, \mu)$ so gewählt, dass für ein geeignetes $\tau \in (0, 1]$ gilt:

$$\left\| u(\mu^{(n+1)}) - P_{X_n} u(\mu^{(n+1)}) \right\|_{\mu} \geq \tau \cdot \max_{u \in M_e} \|u - P_{X_n} u\|_{\mu}. \quad (4.7)$$

Sei ferner $\sigma_n := \max_{u \in M_e} \|u - P_{X_n} u\|_{\mu}$. Dann gilt:

(i) **Algebraische Konvergenz:**

Falls $d_n(M_e, X) \leq M n^{-\beta}$ für Konstanten $M, \beta \in \mathbb{R}^+$ unabhängig von τ und für alle $n \in \mathbb{N}$ und $d_0(M_e, X) \leq M$, dann gilt:

$$\sigma_n \leq C \cdot M n^{-\beta}$$

mit geeigneter (berechenbarer) Konstante $C > 0$.

(ii) **Exponentielle Konvergenz:**

Falls $d_n(M_e, X) \leq M e^{-an^\beta}$ für $n \geq 0$ und für Konstanten $M, \beta, a \in \mathbb{R}^+$, dann gilt:

$$\sigma_n \leq C \cdot M e^{-cn^\rho}, n \geq 0$$

mit $\rho := \frac{\beta}{\beta+1}$ mit geeignetem (berechenbarem) Konstanten $c, C > 0$.

Beweis: siehe Paper.

4.9 Bemerkung

- (1) Lässt sich M_e gut durch einen linearen Unterraum approximieren, so liefert der Greedy-Alg. einen Approximationsraum, welcher nur leicht schlechter ist, als der optimale Unterraum.
- (2) In der Praxis verwenden wir im Greedy-Alg. die Menge $M := \{u_h(\mu) \mid \mu \in P\}$. In [BCDPW,11] wurde gezeigt, dass sich in diesem Fall die Konvergenzraten für kleine Diskretisierungsfehler nicht verschlechtern.

4.10 (strong/weak greedy)

Für $\tau = 1$ heißt der Algorithmus strong greedy und für $\tau < 1$ weak greedy. Für $\Delta(Y, \mu) = \Delta_n^{en}(\mu)$ gilt (4.7) im Diskreten; wegen

$$\begin{aligned}
 \left\| u_h(\mu^{(n+1)}) - P_{X_h} u_h(\mu^{(n+1)}) \right\|_\mu &= \inf_{v \in X_h} \left\| u_h(\mu^{(n+1)}) - v \right\|_\mu \\
 &\stackrel{3.17/3.19}{=} \left\| u_h(\mu^{(n+1)}) - u_n(\mu^{(n+1)}) \right\|_\mu \stackrel{3.39}{=} \frac{\Delta_n^{en}(\mu^{(n+1)})}{\eta_n^{en}(\mu^{(n+1)})} \\
 &\stackrel{Def Greedy}{=} \frac{1}{\eta_n^{en}(\mu^{(n+1)})} \cdot \max_{\mu \in P} \Delta_n^{en}(\mu) \\
 &\stackrel{3.35}{\geq} \frac{1}{\eta_n^{en}(\mu^{(n+1)})} \cdot \max_{\mu \in P} \|u_h(\mu) - u_n(\mu)\|_\mu \\
 &\geq \frac{1}{\eta_n^{en}(\mu^{(n+1)})} \cdot \max_{\mu \in P} \|u_h(\mu) - P_{X_h} u_h(\mu)\|_\mu \\
 &\stackrel{3.39}{\geq} \sqrt{\frac{\alpha_{LB}(\mu^{(n+1)})}{\gamma(\mu^{(n+1)})}} \cdot \max_{\mu \in P} \|u_h(\mu) - P_{X_h} u_h(\mu)\|_\mu.
 \end{aligned}$$

Für glm. beschränkte und koerzive Bilinearformen $b(\cdot, \cdot; \mu)$ erhalten wir dann einen weak greedy, mit $\tau = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\gamma_0}} \in (0, 1)$, wobei α_0, γ_0 definiert in Definition 3.3.

4.1.2 Praktische Realisierung

4.11 Bemerkung (Wahl von S_{train})

Für niedrig dimensionale Parameterräume, d.h. $|P| \leq 5$, wird S_{train} häufig zufällig gewählt.

4.12 Bemerkung (Overfitting)

Die Folge von Fehlern $e_n := \max_{\mu \in S_{\text{train}}} \Delta(X_n, \mu)$, welche durch den Greedy-Alg. produziert wird, kann sehr stark von S_{train} abhängen. Wir können aufgrund von möglichem 'Overfitting' nicht notwendigerweise vom Approximationsverhalten des RB-Modells auf S_{train} auf das Approximationsverhalten auf P schließen; es kann sogar

$$\sup_{\mu \in P} \Delta(X_n, \mu) \gg e_n$$

gelten. Daher sollte die Approximationsgüte des RB-Modells immer auf einer unabhängigen Testmenge $S_{\text{test}} \subset P$ validiert werden.

4.13 Bemerkung (adaptive Verfeinerung der Trainingsmenge)

Um sowohl eine große Trainingsmenge (hoher Rechenaufwand), als auch eine zu klein/schlecht gewählte Trainingsmenge (Overfitting) zu vermeiden, bietet es sich an die Trainingsmenge adaptiv zu verfeinern

(siehe [Haasdonk, Dihlmann, Ohlberger, 2012]). Hierbei wird die Trainingsmenge einem Gitter zu geordnet, wobei die Punkte der Trainingsmenge entweder als die Knoten [HO, 07] oder zufällig innerhalb der Gitterelemente gewählt werden [Eftang, Patera, 10]. Wie bei adaptiven FEM wird dann ein (lokaler) Fehlerschätzer auf den Gitterelementen ausgewertet und die Elemente mit dem größten Fehler zur Verfeinerung markiert. Durch Verfeinerung der markierten Elemente werden neue Punkte zur Trainingsmenge hinzugenommen. Auf diese Weise kann die Trainingsmenge an das betrachtete Problem angepasst und 'schwierige' Bereiche der Parametermenge, z.B. kleine Werte der Diffusionskonstanten, können identifiziert werden. So kann die Trainingsmenge entsprechend verfeinert werden. Außerdem besteht die Möglichkeit Overfitting vorzubeugen.

4.14 Bemerkung (Zerlegung des Parameterraums)

Im Greedy-Alg. aus Definition 4.3 wählt man im Allgemeinen N_{\max} sehr groß, so dass die gewünschte Toleranz erreicht werden kann. Es wäre wünschenswert, wenn man sowohl N_{\max} und damit die Online-Laufzeit, als auch die Toleranz kontrollieren könnte. Dies kann mit einer Zerlegung des Parameterraums, dem sogenannten hp-RB-Ansatz [Eftang, Patera, 10] erreicht werden. Zunächst wird der Parameterraum adaptiv in Teilgebiete zerlegt (h-Adaptivität). Anschließend werden für jedes Teilgebiet lokale reduzierte Basen generiert. Falls auf einem Teilgebiet nicht die Toleranz und $N \leq N_{\max}$ erreicht werden kann, wird dieses Teilgebiet erneut verfeinert/zerlegt und es werden neue lokale Basen generiert (p-Adaptivität). In der Online Phase muss dann lediglich für einen Parameterwert μ das zugehörige Teilgebiet und (lokale) RB-Modell identifiziert werden. Die da durch erzielte Kontrolle über Genauigkeit und Online-Laufzeit führt allerdings zu einer teureren und speicherintensiven Offline Phase.

4.2 Proper Orthogonal Decomposition (POD)

4.2.1 Exkurs Spektraltheorie/Motivation

4.15 Lemma (Adjungierter Operator im HR-Sinne)

Seien X, Y HR. Zu $A \in L(X, Y)$ existiert ein eindeutiger Operator $A^* \in L(Y, X)$ mit

$$(Ax, y)_Y = (x, A^*y)_X \quad \forall x \in X, y \in Y,$$

der sogenannte **adjungierte Operator**.

Beweis:

Für jedes feste $y \in Y$ ist $x \mapsto (Ax, y)_Y$ stetig und linear. Nach dem Riesz'schen Darstellungssatz existiert ein eindeutiges $z \in X$ mit $(Ax, y)_Y = (x, z)_X \quad \forall x \in X$. Setze nun $A^*y = z$. Die Linearität ist klar und die Stetigkeit von A^* folgt aus der Stetigkeit von A , wegen

$$\begin{aligned} \|A^*y\|_X &= \|z\|_X = \sup_{x \in X \setminus \{0\}} \frac{(Ax, y)_Y}{\|x\|_X} \\ &\stackrel{C.S.}{\leq} \|y\|_Y \sup_{x \in X \setminus \{0\}} \frac{\|Ax\|_X}{\|x\|_X} = \|y\|_Y \|A\|. \end{aligned}$$

Eindeutigkeit folgt aus der Eindeutigkeit des Riesz-Repräsentanten.

4.16 Definition (selbstadjungiert)

Sei $A \in L(X)$, A heißt **selbstadjungiert**, falls $A = A^*$.

4.17 Beispiele

(a) Sei $X = \mathbb{R}^n$. Wird $A \in L(X)$ durch die Matrix $(a_{ij})_{ij}$ dargestellt, so wird A^* durch $(a_{ji})_{ij}$ dargestellt. Definition 4.16 ist also eine Verallgemeinerung des Begriffes der selbstadjungierten (symmetrischen) Matrix aus der Linearen Algebra.

(b) Sei $X = L^2((0, 1))$, $u \in L^2((0, 1)^2)$ und $A_u \in L(X)$ der Integraloperator

$$(A_u v)(x) = \int_0^1 u(x, \mu) v(\mu) d\mu.$$

Dann ist $A_u^* = A_{u^*}$ mit $u^*(x, \mu) = u(\mu, x)$. Dies kann als kontinuierliches Analogon von (a) aufgefasst werden.

(c) A^*A und AA^* sind stets selbstadjungiert.

Beweis:

(b)

$$\begin{aligned} (A_u v, w)_X &= \int_0^1 (A_u v)(x) v(x) dx = \int_0^1 \int_0^1 u(x, \mu) v(\mu) w(x) d\mu dx \\ &= \int_0^1 v(\mu) \int_0^1 u(x, \mu) w(x) dx d\mu = \int_0^1 v(\mu) (A_u^* w)(\mu) d\mu. \end{aligned}$$

(b)

$$(A^* A v, w)_X = (A v, A w)_Y = (v, A^* A w)_X, \quad A A^* \text{ analog.}$$

□

Erinnerung:

Ziel: Approximiere $u(x, \mu)$ durch $\sum_{n=1}^N U_n^N(\mu) \phi_n(x)$, $X_N = \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_N\}$. Als Minimierer von

$$\min_{Y \subset X, \dim Y = N} \int_0^1 \int_0^1 \left| u(x, \mu) - \sum_{n=1}^N U_n^N(\mu) \phi_n(x) \right|^2 dx d\mu.$$

Ein solches Problem wurde erstmals von Schmidt 1907 betrachtet. Zur Lösung nutzte er aus, dass der Integraloperator A_u aus 4.17 (b) kompakt ist (s. Alt, Satz 8.15, S.353f) und damit auch die Operatoren $A_u^* A_u$ und $A_u A_u^*$ kompakt sind, denn:

4.18 Satz

Seien X, Y, Z Banachräume. Sind $T \in L(X, Y)$ und $S \in L(Y, Z)$ und ist T oder S kompakt, so ist ST kompakt.

Beweis:

Ein Operator $T \in L(X, Y)$ ist genau dann kompakt, wenn für jede beschränkte Folge $(x_n)_{\mathbb{N}} \subset X$, die Folge $(T(x_n))_{\mathbb{N}} \subset Y$ eine konvergente Teilfolge enthält. Sei also $(x_n)_{\mathbb{N}}$ eine beschränkte Folge, sei ferner zunächst S kompakt. Da $T \in L(X, Y)$ ist auch $(Tx_n)_{\mathbb{N}}$ beschränkt und $(STx_n)_{\mathbb{N}}$ besitzt eine konvergente Teilfolge. Ist S stetig, T kompakt und damit $(Tx_n)_{\mathbb{N}}$ konvergent, so ist auch $(STx_n)_{\mathbb{N}}$ konvergent. □

4.19 Satz (Hilbert-Schmidt Theorem)

Sei X reeller, separabler HR und $A \in K(X)$ selbstadjungiert. Dann existiert eine vollständige Orthonormalbasis $\{\psi_k\}_{k=1}^{\infty}$ von X , so dass

$$A\psi_k = \lambda_k \psi_k$$

und $\lambda_k \rightarrow 0, k \rightarrow \infty$.

Beweis: Werner, Theorem VI 3.2, S. 209f. □

Da $A_u^* A$ (und analog $A_u A_u^*$) nicht negativ, weil $(A_u^* A_u v)_X \geq 0 \forall v \in L^2((0,1))$, erhalten wir das folgende Resultat:

4.20 Satz

Sei A_u wie in 4.17 (b) definiert. Der Operator $R_u := A_u A_u^*$ mit

$$R_u v = \int_0^1 (v, u(\mu))_{L^2((0,1))} u(\mu) d\mu$$

ist nicht negativ, selbstadjungiert und kompakt. Ferner existiert eine vollständige Orthonormalbasis $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ für $L^2((0,1))$ und eine Folge $\{\lambda_k\}_{k=1}^{\infty}$ nicht-negativer reeller Zahlen, so dass

$$R_u \phi_k = \lambda_k \phi_k, \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq 0$$

und $\lambda_k \rightarrow 0$ für $k \rightarrow \infty$.

Beweis:

Folgt aus Satz 4.19. □

Definiere nun

$$\psi_k(\mu) := (A_u^* \phi_k)(\mu) = \int_0^1 u(x, \mu) \phi_k(x) dx,$$

mit ϕ_k aus Satz 4.20. Es lässt sich zeigen, dass $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ Eigenfunktionen von $A_u^* A_u$. Die sogenannte 'Hilbert-Schmidt Zerlegung' von $u(x, \mu)$ ist dann gegeben durch:

$$u(x, \mu) = \sum_{k=1}^{\infty} \psi_k(\mu) \phi_k(x) \text{ fast überall.}$$

Schmidt zeigte weiterhin, dass

$$\begin{aligned} & \min \left\{ \int_0^1 \int_0^1 \left| u(x, \mu) - \sum_{n=1}^N U_n^N(\mu) \phi_n(x) \right|^2 dx d\mu \mid U_n^N(\mu), \phi_n(x) \in L^2((0,1)) \right\} \\ &= \int_0^1 \int_0^1 \left| u(x, \mu) - \sum_{n=1}^N \psi_n(\mu) \phi_n(x) \right|^2 dx d\mu = \sum_{k=N+1}^{\infty} \lambda_k. \end{aligned}$$

4.2.2 Kontinuierliche POD

4.21 Satz (POD Basis)

Sei X ein HR mit $H_0^1(\Omega) \subset X \subset H^1(\Omega)$, $P = [a_i, b_i]^p, i = 1, \dots, p$, wir definieren den Operator

$$Rv := \int_P (v, u(\mu))_X u(\mu) d\mu \text{ für } v \in X, u(\mu) \in X.$$

Ferner nehmen wir an, dass die betrachtete parameterabhängige Differentialgleichung erlaubt zu zeigen, dass R kompakt (dazu reicht z.B. dass $u(\mu)$ stetig von μ abhängt). Dann existiert eine vollständige Orthonormalbasis $\{\varphi_i\}_{i=1}^{\infty}$ von X und eine Folge $\{\lambda_i\}_{i=1}^{\infty}$ nicht-negativer reeller Zahlen, so dass

$$R\varphi_i = \lambda_i \varphi_i, \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq 0 \text{ und } \lambda_i \xrightarrow{i \rightarrow \infty} 0. \quad (4.8)$$

Sei N' , so dass $\lambda_{N'} > 0$. Für $1 \leq N \leq N'$ definieren wir $\Phi_N := \{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ als POD-Basis und $X_N := \text{span}\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ als POD-Raum.

Beweis:

Wie oben zeigt man, dass R nicht-negativ und selbstadjungiert. Aufgrund der angenommenen Kompaktheit folgt die Aussage, dann aus dem Hilbert-Schmidt Theorem. \square

Es lässt sich nun zeigen, dass der POD-Raum den mittleren Projektionsfehler minimiert, also Minimierer des Minimierungsproblems (4.2) ist.

4.22 Satz (Optimalität der POD-Basis)

Für $l \in \mathbb{N}$ definieren wir die Abbildung $J : \underbrace{X \times \dots \times X}_{l\text{-mal}} \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$J(\phi_1, \dots, \phi_l) = \int_P \left\| u(\mu) - \sum_{i=1}^l (u(\mu), \phi_i)_X \phi_i \right\|_X^2 d\mu. \quad (4.9)$$

Seien $\{\lambda_i\}_{i=1}^{\infty}$ und $\{\phi_i\}_{i=1}^{\infty}$ die Eigenwerte und Eigenfunktionen von R . Dann lösen für alle $l \in \mathbb{N}$ die ersten l Eigenfunktionen $\phi_1, \dots, \phi_l \in X$ das Minimierungsproblem

$$\min J(\psi_1, \dots, \psi_l) \text{ so dass } (\psi_j, \psi_i) = \delta_{ij}, \quad 1 \leq i, j \leq l. \quad (4.10)$$

Ferner gilt:

$$J(\phi_1, \dots, \phi_l) = \sum_{i=l+1}^{\infty} \lambda_i \text{ für jedes } l \in \mathbb{N}. \quad (4.11)$$

Beweis:

Der Beweis zu Teil 1 der Aussage beruht darauf, dass das Eigenwert-Problem (4.8) die notwendige Optimalitätsbedingung erster Ordnung (nOb1) für (4.10) ist. Den Beweis findet man zum Beispiel in [Holmes, L.B., 1996]. Für (4.11): Da $\{\phi_i\}_{i=1}^{\infty}$ Orthonormalbasis (ONB) von X gilt

$$u(\mu) = \sum_{i=1}^{\infty} (u(\mu), \phi_i)_X \phi_i. \quad (\text{s. Alt, Satz 7.7})$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned}
 \int_P \left\| u(\mu) - \sum_{i=1}^{\infty} (u(\mu), \phi_i)_X \phi_i \right\|_X^2 d\mu &= \int_P \left\| \sum_{i=1}^{\infty} (u(\mu), \phi_i) \phi_i - \sum_{i=1}^{\infty} (u(\mu), \phi_i)_X \phi_i \right\|_X^2 d\mu \\
 &= \int_P \left\| \sum_{i=l+1}^{\infty} (u(\mu), \phi_i)_X \phi_i \right\|_X^2 d\mu \\
 &= \int_P \sum_{i,j=l+1}^{\infty} (u(\mu), \phi_i)_X (u(\mu), \phi_j)_X \underbrace{(\phi_i, \phi_j)_X}_{\text{ONB, } = \delta_{ij}} d\mu \\
 &= \int_P \sum_{i=l+1}^{\infty} (u(\mu), \phi_i)_X^2 d\mu \\
 &= \int_P \sum_{i=l+1}^{\infty} ((u(\mu), \phi_i)_X u(\mu), \phi_i)_X d\mu = \sum_{i=l+1}^{\infty} (R\phi_i, \phi_i)_X \\
 &= \sum_{i=l+1}^{\infty} (\lambda_i \phi_i, \phi_i)_X = \sum_{i=l+1}^{\infty} \lambda_i.
 \end{aligned}$$

□

4.23 Folgerung

Seien $\{\lambda_i\}_{i=1}^{\infty}$ und $\{\phi_i\}_{i=1}^{\infty}$ die Eigenwerte und Eigenfunktionen von R . Dann gilt:

- (1) $(R\phi_i, \phi_i)_X = \int_P (u(\mu), \phi_i)_X (u(\mu), \phi_j)_X d\mu = \delta_{ij} \lambda_i$ für alle $i, j \in \mathbb{N}$, dass heißt die POD-Koeffizienten sind unkorreliert.
- (2) Sei $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$ beliebige Orthonormalbasis von X . Für jedes $l \in \mathbb{N}$ gilt

$$\sum_{i=1}^l \int_P |(u(\mu), \phi_i)_X|^2 d\mu \geq \sum_{i=1}^l \int_P |(u(\mu), X_i)_X|^2 d\mu.$$

Daher erfassen die ersten l POD-Basisfunktionen mehr Energie als die ersten l Funktionen jeder anderen Basis von X .

Beweis:

- (1) Zunächst gilt:

$$(R\phi_i, \phi_j)_X = \left(\int_P (u(\mu), \phi_i)_X u(\mu) d\mu, \phi_j \right)_X = \int_P (u(\mu), \phi_i)_X (u(\mu), \phi_j)_X d\mu.$$

Außerdem gilt:

$$(R\phi_i, \phi_j)_X = (\lambda_i \phi_i, \phi_j)_X = \lambda_i \delta_{ij}.$$

- (2) siehe [Holmes, LB, 1996].

4.2.3 POD im Diskreten Setting

4.24 Satz (POD Basis)

Sei X_N HR von Dimension N und $\{u_i^N\}_{i=1}^n \subset X_N$. Dann definieren wir den empirischen Korrelationsoperator

$$R_N : X_N \rightarrow X_N \text{ durch } R_N u^N := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (u_i, v)_{X_N} u_i, \quad v \in X_N.$$

Es ist $R_N \in K(X_N)$ und es existieren orthonormale Funktionen $\{\phi_i\}_{i=1}^{n'}$, $n' \leq n$ und reelle Zahlen $\{\lambda_i\}_{i=1}^{n'}$ mit $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{n'} > 0$, so dass

$$R_N \phi_i = \lambda_i \phi_i, \quad i = 1, \dots, n'.$$

Für $1 \leq M \leq n'$ definieren wir die POD Basis $\Phi_M := \{\phi_1, \dots, \phi_M\}$ und den POD-Raum $X_M := \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_M\}$.

Beweis:

Analog zu oben zeigt man, dass R_N linear, beschränkt, selbstadjungiert und nicht-negativ. Da R_N endlich dimensionales Bild hat, ist R_N ferner kompakt. Damit folgt aus dem Hilbert-Schmidt Theorem die Behauptung, wobei das Orthonormalsystem aus den ϕ_i nicht unendlich sein kann, da R_N endliches Bild hat.

4.25 Beispiel (POD-Basis zur Modellreduktion parameter abhängiger PDgl)

Betrachte dazu den HR X_n , die Snapshotmenge $M_{\text{train}} = \{u_h/\mu_i \mid \mu_i \in S_{\text{train}}\}$ und $R_n v = \frac{1}{n_{\text{train}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{train}}} (u_h(\mu_i), v)_{\mathbb{R}} u_h(\mu_i)$. Die POD-Basis wird dann über das entsprechende Eigenwertproblem wie in Satz 4.24 bestimmt.

Weiß nicht ob das korrekt ist.

4.26 Beispiel (POD in der statistischen Datenanalyse)

Die Projektion auf den POD-Raum wird in der statistischen Datenanalyse auch Hotelling-Transformation, Principal Component Analysis (PCA) oder Karkunov-Loewe Transformation genannt. Hierbei betrachtet man einen Datensatz, welcher als Menge von n Punkten in N -dimensionalen Raum veranschaulicht werden kann, dass heißt $X_N = \mathbb{R}^N$ und

Keine Ahnung ob die Namen so geschrieben werden..

$$R_N v = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, v)_{\mathbb{R}^N}| u_j^N \text{ für } v \in \mathbb{R}^N.$$

4.27 Bemerkung (Eigenschaften der POD-Basis)

- (1) $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ ist orthonormale Basis, aber nicht eindeutig.
- (2) Die POD-Basen sind hierarchisch, dass heißt $X_{N'} \subset X_N$ für $N' \leq N$.
- (3) Die POD hängt nicht von der Reihenfolge der Daten ab (im Gegensatz zu einer Basis welche aus einer Gram-Schmidt Orthogonalisierung hervorgeht).
- (4) Maximierung der Varianz: ϕ_1 ist die Richtung höchster Varianz von $\{u_i^N\}_{i=1}^n$, ϕ_2 ist die Richtung höchster Varianz von $\{P_{X_1} u_i^N\}_{i=1}^n$, usw.
- (5) Die Koordinaten der Daten bzgl. der POD-Basis sind unkorreliert. Wir wollen nun exemplarisch für $X_N = \mathbb{R}^N$ die Optimalität der POD-Basis nachweisen, dass heißt wir wollen zeigen, dass die POD-Basis das folgende nichtlineare Optimierungsproblem löst:

$$\min_{\psi_1, \dots, \psi_l \in \mathbb{R}^N} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left\| u_j^N - \sum_{i=1}^l (u_j^N, \psi_i)_{\mathbb{R}^N} \psi_i \right\|_{\mathbb{R}^N}^2, \quad (4.12)$$

so dass $(\psi_i, \psi_j)_{\mathbb{R}^N} = \delta_{ij}$ für $1 \leq i, j \leq l$. Dazu benötigen wir einige Definitionen und Resultate aus der nichtlinearen Optimierung. Problem (4.12) ist ein Optimierungsproblem der folgenden allgemeinen Form:

$$\min J(x), \text{ so dass } g(x) = 0, \quad (\text{Op})$$

wobei $J : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ das Zielfunktional und $g : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^m$, $m \leq k$ der Nebenbedingung.

4.28 Definition (zulässige Lösung)

Ein Punkt $x \in \mathbb{R}^n$ heißt zulässig, falls $g(x) = 0$ gilt. Die Menge zulässiger Lösungen ist definiert als

$$E(\text{Op}) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) = 0\}.$$

4.29 Definition (lokale Lösung)

Der Punkt \bar{x} heißt **lokale Lösung** von (Op), falls $\bar{x} \in E(\text{Op})$ gilt und $J(\bar{x}) \leq J(x) \forall U(\bar{x}) \cap E(\text{Op})$, wobei $U(\bar{x}) \subset \mathbb{R}^N$ offene nichtleere Umgebung von \bar{x} .

4.30 Definition (regulärer Punkt)

Ein Punkt $\bar{x} \in E(\text{Op})$ heißt **regulärer Punkt** bzgl. der Nebenbedingung $g(x) = 0$, falls die Gradienten $\{\nabla g(\bar{x})\}_{i=1}^n \subset \mathbb{R}^N$ linear unabhängig sind.

4.31 Satz (Notwendige Optimalitätsbedingung 1. Ordnung)

Seien J und g stetig differenzierbar. Sei ferner \bar{x} eine lokale Lösung von (Op) und ein regulärer Punkt für $g(x) = 0$. Dann existiert ein eindeutiger Lagrange-Multiplikator $\bar{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m$, welcher

$$\nabla J(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g(\bar{x}) = \nabla J(\bar{x}) + \nabla g(\bar{x})^T \bar{\lambda} = 0 \quad (4.13)$$

löst.

Beweis: [Nocedal, Wright, 2006]

□

Nun haben wir alle Hilfsmittel zusammen um den folgenden Satz zu zeigen:

4.32 Satz

Sei $U = [u_1^N, \dots, u_n^N] \in \mathbb{R}^N$ und $\Phi_N = \{\phi_1, \dots, \phi_N\}$ POD-Basis definiert in 4.24. Dann löst die POD-Basis das folgende Optimierungsproblem:

$$\max_{\psi_1, \dots, \psi_l \in \mathbb{R}^N} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \psi_i)_{\mathbb{R}^N}|^2 \text{ s.d. } (\psi_i, \psi_j)_{\mathbb{R}^N} = \delta_{ij} \forall 1 \leq i, j \leq l. \quad (\text{Op}^l)$$

Ferner gilt

$$\text{argmax}(\text{Op}^l) = \sum_{i=1}^l \lambda_i,$$

wobei λ_i die Eigenwerte aus Satz 4.24 sind.

Beweis:

Zunächst betrachten wir das Optimierungsproblem für $l = 1$

$$\max_{\psi \in \mathbb{R}^N} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \psi)_{\mathbb{R}^N}|^2 \text{ s.d. } \|\psi\|_{\mathbb{R}^N}^2 = 1. \quad (\text{Op}^1)$$

Um die Lösung von (Op^1) zu bestimmen, betrachten wir die notwendige Optimalitätsbedingung 1. Ordnung (nOB1). Dazu führen wir zunächst die Funktion $g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ ein, welche durch $g(\psi) = 1 - \|\psi\|_{\mathbb{R}^N}^2$ für $\psi \in \mathbb{R}^N$ definiert ist. Die Nebenbedingung in (Op^1) kann dann als $g(\psi) = 0$ formuliert werden:

$$\nabla g(\psi) = 2\psi^T \text{ ist linear unabhängig, falls } \psi \neq 0.$$

Aufgrund der Nebenbedingung $\|\psi\|_{\mathbb{R}^N}^2 = 1$ gilt für eine Lösung von (Op^1) , dass $\psi \neq 0$. Damit ist jede Lösung von (Op^1) ein regulärer Punkt. Sei $\mathcal{L} : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ das Lagrange-Funktional zu (Op^1) , das heißt

$$\mathcal{L}(\psi, \lambda) := \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \psi)_{\mathbb{R}^N}|^2 + \lambda(1 - \|\psi\|_{\mathbb{R}^N}^2),$$

für $(\psi, \lambda) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}$. Angenommen $\psi \in \mathbb{R}^N$ ist eine Lösung von (Op^1) . Da ψ regulärer Punkt existiert nach Satz 4.31 ein eindeutiger Lagrange-Multiplikator $\lambda \in \mathbb{R}$, welcher die nOB1 erfüllt:

$$\nabla \mathcal{L}(\psi, \lambda) \stackrel{!}{=} 0 \text{ in } \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}.$$

Wir berechnen den Gradienten von \mathcal{L} bezüglich ψ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i}(\psi, \lambda) &= \frac{\partial}{\partial \psi_i} \left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left| \sum_{k=1}^N (u_{kj} \psi_k) \right|^2 + \lambda \left(1 - \sum_{k=1}^N \psi_k^2 \right) \right) \\ &= 2 \cdot \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(\sum_{k=1}^N u_{kj} \psi_k \right) u_{ij} - 2\lambda \psi_i \\ &= \frac{2}{n} \sum_{j=1}^N \left(\underbrace{\sum_{k=1}^n u_{ij} u_{jk}^T \psi_k}_{=(uu^T)_{ik}} \right) - 2\lambda \psi_i. \end{aligned}$$

Daher folgt:

$$\nabla_{\psi} \mathcal{L}(\psi, \lambda) = 2 \left(\frac{1}{n} uu^T \psi - \lambda \psi \right) = 2(R_N \psi - \lambda \psi) \stackrel{!}{=} 0 \text{ in } \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}. \quad (4.14)$$

Gleichung (4.14) ergibt das folgende Eigenwertproblem

$$\frac{1}{n} uu^T \psi = \lambda \psi \text{ in } \mathbb{R}^N, \quad (4.15)$$

welches gerade mit dem Eigenwertproblem aus Satz 4.24 übereinstimmt. Aus $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda}(\mathcal{L}, \lambda) \stackrel{!}{=} 0$ in \mathbb{R} schließen wir die Nebenbedingung

$$\|\psi\| = 1. \quad (4.15b)$$

Der erste POD-Vektor ϕ , definiert in Satz 4.24 löst damit (4.15). Ferner gilt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \phi_1)_{\mathbb{R}^N}|^2 &= \left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \phi_1)_{\mathbb{R}^N} u_j^N, \phi_1 \right)_{\mathbb{R}^N} \\ &= (R_N \phi_1, \phi_1) = \lambda_1 \|\phi_1\|_{\mathbb{R}^N}^2 = \lambda_1. \end{aligned}$$

Schließlich zeigen wir, dass ϕ_1 (Op^1) löst. Sei dazu $\xi \in \mathbb{R}^N$ ein beliebiger Vektor mit $\|\xi\|_{\mathbb{R}^N} = 1$. Da die Eigenvektoren $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ von (4.15) eine ONB für \mathbb{R}^N sind, gilt

$$\xi = \sum_{i=1}^N (\xi, \phi_i)_{\mathbb{R}^N} \phi_i.$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \xi)_{\mathbb{R}^N}|^2 &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left| \left(u_j^N, \sum_{i=1}^N (\xi, \phi_i)_{\mathbb{R}^N} \phi_i \right)_{\mathbb{R}^N} \right|^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{i,k=1}^N (u_j^N, (\xi, \phi_i) \phi_i) (u_j^N, (\xi, \phi_k) \phi_k) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{i,k=1}^N \left((u_j^N, \phi_i) (u_j^N, \phi_k) (\xi, \phi_i) (\xi, \phi_k) \right) \\ &= \sum_{i,k=1}^N \left(\left(\underbrace{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \phi_i) u_j^N, \phi_k}_{= R_N \phi_i} \right) (\xi, \phi_i) (\xi, \phi_k) \right) \\ &= \sum_{i,k=1}^N \underbrace{(\lambda_i \phi_i, \phi_k)}_{=\lambda_i \delta_{ik}} (\xi, \phi_k) (\xi, \phi_k) \\ &= \sum_{i=1}^N \lambda_i |(\xi, \phi_i)|^2 \\ &\leq \lambda_1 \sum_{i=1}^N |(\xi, \phi_i)|^2 = \lambda_1 \|\xi\|^2 = \lambda_1 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \phi_1)_{\mathbb{R}^N}|^2. \end{aligned}$$

Damit löst ϕ_1 (Op^1) und $\arg\max(Op^1) = \lambda_1$.

Suchen wir nach einem zweiten Vektor, welcher orthogonal auf ϕ_1 steht, normiert ist und die Daten $\{u_i^N\}_{i=1}^n$ so gut wie möglich beschreibt, so müssen wir das folgende Optimierungsproblem lösen:

$$\max_{\psi \in \mathbb{R}^N} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \psi)|^2, \text{ so dass } \|\psi\| = 1 \text{ und } (\psi, \phi_1) = 0,$$

wobei $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{\mathbb{R}^N}$ und $(\cdot, \cdot) = (\cdot, \cdot)_{\mathbb{R}^N}$. Die Definition der POD-Basis zeigt, dass ϕ_2 eine Lösung von (Op^2) ist und $\arg\max(Op^2) = \lambda_2$ gilt. Im Detail löst ϕ_2 die nOB1 (4.15) und für

$$\tilde{\psi} \sum_{i=2}^N (\tilde{\psi}, \phi_i) \phi_i \in \text{span}\{\phi_1\}^\perp$$

gilt:

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \tilde{\psi})|^2 \leq \lambda_2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \phi_2)|^2.$$

Schließlich zeigen wir mittels vollständiger Induktion, dass die in 4.24 definierte POD-Basis das Optimierungsproblem (Op^l) löst. Für allgemeine l betrachten wir dazu das Lagrange-Funktional: $\mathcal{L} : \underbrace{\mathbb{R}^N \times \dots \times \mathbb{R}^N}_{l\text{-mal}} \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^l \rightarrow \mathbb{R}$ definiert durch

$$\mathcal{L}(\psi_1, \dots, \psi_l, \Lambda) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \psi_i)|^2 + \sum_{i,j=1}^l \lambda_{ij} (\delta_{ij} - (\psi_i, \psi_j)),$$

für $\psi_1, \dots, \psi_l \in \mathbb{R}^N$ und $\Lambda = ((\lambda_{ij})) \in \mathbb{R}^{l \times l}$. Die nOB1 für (Op^l) lauten dann

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_k}(\psi_1, \dots, \psi_l, \Lambda) \delta \psi_k = 0 \quad \forall \delta \psi_k \in \mathbb{R}^N, \quad k \in \{1, \dots, l\}. \quad (4.16)$$

Aus

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_k}(\psi_1, \dots, \psi_l, \Lambda) \delta \psi_k &= 2 \cdot \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_k) (u_j^N, \delta \psi_k) - \sum_{i=1}^l \delta_{ik} (\psi_i, \psi_k) - \sum_{i=1}^l \lambda_{ki} (\delta \psi_k, \psi_i) \\ &= 2 \cdot \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_k) (u_j^N, \delta \psi_k) - \sum_{i=1}^l (\lambda_{ik} + \lambda_{ki}) (\psi_i, \delta \psi_k) \\ &= \left(2 \cdot \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_k) u_j^N - \sum_{i=1}^l (\lambda_{ik} + \lambda_{ki}) \psi_i, \delta \psi_k \right) \end{aligned}$$

und (4.16) schließen wir

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_k) u_j^N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l (\lambda_{ik} + \lambda_{ki}) \psi_i \quad \text{in } \mathbb{R}^N \quad \forall k \in \{1, \dots, l\}, \quad (4.17)$$

oder bzw.

$$\frac{1}{n} U U^T \psi_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l (\lambda_{ik} + \lambda_{ki}) \psi_i \quad \text{in } \mathbb{R}^N \quad \forall k \in \{1, \dots, l\}. \quad (4.18)$$

Wir zeigen nun mittels vollständiger Induktion, dass das Eigenwert-Problem aus 4.24 gerade den nOB1 für (Op^l) entspricht. Für $l = 1$ gilt: $k = 1$. Dann folgt aus (4.17):

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_1) u_j^N = \lambda_1 \psi_1 \quad \text{in } \mathbb{R}^N \quad \text{mit } \lambda_1 = \lambda_{11}.$$

Wir nehmen nun an, dass für $l \geq 1$ die nOB1 durch

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_k) u_j^N = \lambda_k \psi_k \quad \text{in } \mathbb{R}^N \quad \forall k \in \{1, \dots, l\} \quad (4.19)$$

gegeben sind. Wir wollen nun zeigen, dass die nOB1 für $l + 1$ durch

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_k) u_j^N = \lambda_k \psi_k \quad \text{in } \mathbb{R}^N \quad \forall k \in \{1, \dots, l + 1\} \quad (4.20)$$

gegeben sind. Aus (4.17) schließen wir

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_{l+1}) u_j^N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l+1} (\lambda_{i,l+1} + \lambda_{l+1,i}) \psi_i \text{ in } \mathbb{R}^N. \quad (4.21)$$

Da $\{\psi_i\}_{i=1}^{l+1}$ POD-Basis (orthonormal als Lösung von (4.19)) und da R_N selbstadjungiert folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \lambda_j (\psi_{l+1}, \psi_j) = (\psi_{l+1}, R_N \psi_j) = (R_N \psi_{l+1}, \psi_j) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l+1} (\lambda_{i,l+1} + \lambda_{l+1,i}) (\psi_i, \psi_j) = \frac{1}{2} (\lambda_{j,l+1} + \lambda_{l+1,j}). \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\lambda_{i,l+1} = \lambda_{l+1,i} \text{ für jedes } i \in \{1, \dots, l\}. \quad (4.22)$$

Einsetzen von (4.22) in (4.21) ergibt

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (u_j^N, \psi_{l+1}) u_j^N &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \underbrace{(\lambda_{i,l+1} + \lambda_{l+1,i})}_{=0} \psi_i + \lambda_{l+1,l+1} \psi_{l+1} \\ &= \lambda_{l+1,l+1} \psi_{l+1}. \end{aligned}$$

Mit $\lambda_{l+1} = \lambda_{l+1,l+1}$ folgt dann (4.20). Zusammengefasst sind die nOB1 für (Op^l) durch das Eigenwert-Problem

$$R_N \psi_i = \lambda_i \psi_i \text{ für } i = 1, \dots, l \quad (4.23)$$

gegeben. Die in 4.24 definierte POD-Basis $\Phi_l = \{\phi_1, \dots, \phi_l\}$ löst (4.23). Der Beweis dass $\{\phi_i\}_{i=1}^l$ eine Lösung von (Op^l) ist und dass $\arg\max(Op^l) = \sum_{i=1}^l \lambda_i$ mit den Eigenwerten aus Satz 4.24 gilt, folgt analog zum Beweis für (Op^1) . \square

4.33 Folgerung (Optimalität der OPD-Basis)

Seien die Voraussetzungen von Satz 4.32 erfüllt und gilt $\text{rg}(U) = d$, wobei $U = [u_1^N, \dots, u_n^N]$. Sei $\hat{\Psi}_d = [\psi_1, \dots, \psi_d] \in \mathbb{R}^{N,d}$ Matrix mit paarweise orthonormalen Spalten und die Darstellung der Spalten von U in der Basis $\{\psi_i\}_{i=1}^d$ sei gegeben durch

$$U = \hat{\Psi}_d \cdot C_d, \text{ wobei } (C_d)_{ij} := (\psi_i, u_j^N) \quad 1 \leq i \leq d, \quad 1 \leq j \leq n.$$

Dann gilt für jedes $l \in \{1, \dots, d\}$:

$$\|U - \hat{\Phi}_l B_l\|_F \leq \|U - \hat{\Psi}_l C_l\|_F, \quad (4.24)$$

wobei $\hat{\Phi}_l = [\phi_1, \dots, \phi_d]$ mit ϕ_i POD-Basis aus 4.24 und $(B_l)_{ij} = (\phi_i, u_j^N)$. Hierbei bezeichnet $\|\cdot\|_F$ in (4.24) die **Frobeniusnorm**, welche durch

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n |A_{ij}|^2} = \sqrt{\text{spur}(A^T A)} \text{ für } A \in \mathbb{R}^{N \times n}$$

gegeben ist. Ferner bezeichnet die Matrix $\hat{\Psi}_d$ die $l \leq d$ ersten Spalten von $\hat{\Psi}$, B_l die ersten l -Zeilen von B und analog für $\hat{\Phi}_l$ und C_l .

Beweis:

Da die Spalten von $\hat{\Psi}_d$ orthonormal sind, folgt

$$\begin{aligned} \|u - \hat{\Psi}_l C_l\|_F^2 &= \|\hat{\Psi}_d(C_d - C_l^0)\|_F^2 \\ &\stackrel{\Psi^T \Psi = \text{id}}{=} \|C_d - C_l^0\|_F^2 \\ &= \sum_{i=l+1}^d \sum_{j=1}^n |(C_l)_{ij}|^2, \end{aligned}$$

wobei $C_l^0 \in \mathbb{R}^{d \times n}$ aus $C \in \mathbb{R}^{d \times n}$ durch Ersetzen der letzten $d-l$ Reihen durch 0 hervor geht. Da wegen

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} u u^T v &= R_N v = R_N \left(\sum_{i=1}^N (v, \phi_i) \phi_i \right) \\ &= \sum_{i=1}^N (v, \phi_i) R_N \phi_i = \sum_{i=1}^N \lambda_i (v, \phi_i) \phi_i \\ &= \sum_{i=1}^d \lambda_i (v, \phi_i) \phi_i, \end{aligned}$$

folgt, dass $u_j^N \in \text{bild}(R_N) = \text{span}\{\phi_i\}_{i=1}^d$. Daher gilt $U = \hat{\Phi}_d B_d$ und damit

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \|U - \hat{\Phi}_l B_l\|_F^2 &= \frac{1}{n} \|\hat{\Phi}_d(B_d - B_l^0)\|_F^2 = \|B_d - B_l^0\|_F^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=l+1}^d \sum_{j=1}^n |(B_d)_{ij}|^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=l+1}^d \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \phi_i)|^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=l+1}^d \sum_{j=1}^n \left((u_j^N, \phi_i) u_j^N, \phi_i \right) \\ &= \sum_{i=l+1}^d (R_N \phi_i, \phi_i) = \sum_{i=l+1}^d \lambda_i. \end{aligned} \tag{4.25}$$

Damit gilt:

$$\frac{1}{n} \|U\|_F^2 = \frac{1}{n} \|\hat{\Psi}_d C_d\|_F^2 = \frac{1}{n} \|C_d\|_F^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^n |(C_d)_{ij}|^2$$

und

$$\frac{1}{n} \|U\|_F^2 = \frac{1}{n} \|\hat{\Phi}_d B_d\|_F^2 = \frac{1}{n} \|B_d\|_F^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^n |(B_d)_{ij}|^2 = \sum_{i=1}^d \lambda_i.$$

Da die Vektoren ϕ_1, \dots, ϕ_l aus Satz 4.32 des Optimierungsproblems (Op^l) lösen, folgt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \|U - \hat{\Phi}_l B_l\|_F^2 &= \sum_{i=l+1}^d \lambda_i = \sum_{i=1}^d \lambda_i - \sum_{i=1}^l \lambda_i \stackrel{(4.13)}{=} \frac{1}{n} \|U\|_F^2 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \phi_i)|^2 \\ &\stackrel{\phi_i \text{ lösen } (Op^l)}{\leq} \frac{1}{n} \|U\|_F^2 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^n |(u_j^N, \psi_i)|^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^n |(C_d)_{ij}|^2 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^n |(C_d)_{ij}|^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=l+1}^d \sum_{j=1}^n |(C_d)_{ij}|^2 = \frac{1}{n} \|U - \hat{\Psi}_l C_l\|_F^2. \end{aligned}$$

□

4.34 Bemerkung

Folgerung 4.33 liefert direkt, dass

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left\| u_j^N - \sum_{k=1}^l (u_j^N, \phi_k) \phi_k \right\|^2 \leq \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left\| u_j^N - \sum_{k=1}^l (u_j^N, \psi_k) \psi_k \right\|^2$$

für jede andere Menge $\{\psi_i\}_{i=1}^l$ paarweise orthonormalen Vektoren. Damit folgt aus Folgerung 4.33, dass die in 4.24 definierte POD-Basis auch das folgende Optimierungsproblem löst:

$$\min_{\psi_1, \dots, \psi_l \in \mathbb{R}^N} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left\| u_j^N - \sum_{k=1}^l (u_j^N, \psi_k) \psi_k \right\|^2, \text{ so dass } (\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij} \text{ für } 1 \leq i, j \leq l.$$

Die nOB1 sind identisch mit denen von (Op^l) .

4.35 Satz (Berechnung der POD-Basis über die Gram-Matrix)

Sei X_N HR von Dimension N und $\{u_i^N\}_{i=1}^n \subset X_N$. Die Matrix $\mathbb{K} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definiert durch

$$\mathbb{K}_{ij} := (u_i^N, u_j^N) \quad (4.26)$$

heißt **Gram-Matrix**. Dann sind äquivalent:

- (1) $\phi \in X_N$ ist Eigenvektor zu R_N aus Satz 4.24 zum Eigenwert $\lambda > 0$ mit Norm1 und einer Darstellung

$$\phi = \sum_{i=1}^n a_i u_i^N \text{ mit } a \in \ker(\mathbb{K})^\perp.$$

- (2) $a = (a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{R}^n$ ist Eigenvektor von $\frac{1}{n} \mathbb{K}$ zu $\lambda > 0$, mit Norm $\frac{1}{\sqrt{n\lambda}}$.

Beweis: [Haasdonk, Satz 5.7, S.53f].

□

4.36 Bemerkung

Die POD kann daher entweder als teures EW-Problem für R_N in X_N (Komplexität $\mathcal{O}(N^3)$) oder, meist günstiger, als EW-Problem für \mathbb{K} (Komplexität $\mathcal{O}(n^3)$) ermittelt werden. Letzteres wird auch **'Method of snapshots'** genannt.

4.37 Lemma (Berechnung der POD-Basis mittels der Singulärwertzerlegung für $X_N = \mathbb{R}^N$)

Sei $X_N \in \mathbb{R}^{N \times n}$, $[u_1^N, \dots, u_n^N] = U \in \mathbb{R}^{N \times n}$ Snapshot-Matrix mit Rang d und $U = \Psi D V^T$ eine Singulärwertzerlegung mit $\Psi \in \mathbb{R}^{N \times d}$ mit orthonormalen Spalten, $D = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_d) \in \mathbb{R}^{d \times d}$ und $V \in \mathbb{R}^{n \times d}$ mit orthonormalen Spalten. Falls $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > 0$ echt fallend, so ist $\Psi = \Phi$ bis auf Vorzeichen.

Beweis:

Sei $\Psi = [\psi_1, \dots, \psi_d]$, ψ_i Eigenvektor von R_N wegen

$$R_N \psi_i = \frac{1}{n} U U^T \psi_i = \frac{1}{n} \Psi D \underbrace{V^T V}_{=\text{id}} D \underbrace{\Psi^T \psi_i}_{=e_i} = \frac{1}{n} \Psi D D e_i = \frac{1}{n} \sigma_i^2 \psi_i.$$

Die Eigenwerte $\frac{1}{n} \sigma_i^2$ sind monoton fallend, also identisch sortiert wie Spektralzerlegung von R_N , das heißt $\frac{1}{n} \sigma_i^2 = \lambda_i$ und $\psi_i = \phi_i$ oder $\psi_i = -\phi_i$.

