

Bachelorarbeit

Randwertprobleme mit gewichteter Kernkollokation

Der Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart

von

Daniel Koch

aus Leonberg

Entwurf

Prüfer: Prof. Dr. Bernard Haasdonk

Betreuer: Prof. Dr. Bernard Haasdonk

Immatrikulationsnummer: 2948791

Eingereicht am: 30. September 2018

Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation der Universität
Stuttgart.

IANS

September 2018

Bachelor's Thesis

Boundary Value Problems with Weighted Kernel Collocation

A Bachelor's Thesis presented to the faculty Math and Physics, University of
Stuttgart

by

Daniel Koch

from Leonberg

Draft

First Examiner:	Prof. Dr. Bernard Haasdonk
Second Examiner:	Prof. Dr. Bernard Haasdonk
Student ID:	2948791
Submitted on:	30th September 2018

Institute of Applied Analysis and Numerical Simulations at University of Stuttgart.
IANS

September 2018

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Stellen sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit ist weder in vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen. Das elektronische Exemplar stimmt mit den anderen Exemplaren überein.

Zusammenfassung

In dieser Bachelorarbeit erweitern wir die Kernkollokation, ein Verfahren zur numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen (PDEs). Dafür nutzt die Kernkollokation einen interpolativen Ansatz, indem sie Ansatzfunktionen an verschiedenen Punkten im Inneren und auf dem Rand des Definitionsgebietes der PDE ansetzt. Aufgrund des diskreten Ansatzes werden die Randwerte der numerischen Lösung PDE nur an manchen Stellen exakt angenommen. Um zu erreichen, dass dies über den ganzen Rand der Fall ist, multiplizieren wir die Ansatzfunktionen mit einer Gewichtsfunktion und damit werden die Randbedingungen der PDE automatisch erfüllt. Zusätzlich können wir dadurch die Ansatzpunkte auf dem Rand weglassen. Experimentell zeigt sich, dass die gewichtete Kernkollokation aber nur bedingt vernünftige Ergebnisse liefert, da es bei der Konstruktion der Gewichtsfunktionen für ein beliebiges Gebiet leicht passieren kann, dass in deren Ableitung Singularitäten entstehen, die zu schlechten Ergebnissen führen.

Stichwörter: partielle Differentialgleichung, Kern, gewichtete Kernkollokation, reproduzierende Kern Hilberträume

Abstract

In this bachelor's thesis, we extend the kernel collocation, a method to solve partial differential equations (PDEs) numerically. The kernel collocation uses an interpolating approach by applying functions at different points on the boundary and the interior of the domain of a PDE. Because of this discrete approach, the boundary values of the numerical solution are only exact in some places. To achieve an exact solution on the entire boundary, we multiply the interpolating functions by a weight function, which automatically fulfills the boundary conditions given by the PDE. Additionally, we can omit the points on the boundary and don't need to apply any functions there. Experiments show that we only get reasonable results in some cases when using the weighted kernel collocation. When constructing the weight function for an arbitrary domain, it can easily happen that we get singularities in their derivatives, which causes bad results.

Keywords: partial differential equation, kernel, weighted kernel collocation, reproducing kernel hilbertspace

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	iii
Abstract	v
Akronyme	ix
Abbildungsverzeichnis	xi
Tabellenverzeichnis	xiii
1 Einleitung	1
2 Kerne und reproduzierende Kern Hilberträume	3
3 Standardkollokation	15
3.1 Symmetrische Kollokation	15
3.2 Nicht-Symmetrische Kollokation	17
4 Gewichtete Kollokation	19
4.1 Motivation für die gewichtete Kollokation	19
4.2 Gewichtsfunktionen	21
4.3 Symmetrische Kollokation	24
4.4 Nicht-Symmetrische Kollokation	27
5 Implementierung	29
6 Numerische Tests	33
6.1 Fehler	36
6.1.1 Fehler im Inneren	36
6.1.2 Fehler bei einer anderen Gewichtsfunktion	44
6.1.3 Fehler auf dem Rand	46
6.1.4 Validationspunkte	47
6.2 Parameterwahl und Kondition	49
6.3 Laufzeit	52
6.4 Vergleich mit finite Elemente Methode (FEM)	54

7 Zusammenfassung und Ausblick	55
8 Anhang	57
Literatur	61

Akronyme

LGS lineares Gleichungssystem 16–18, 26, 27

oBdA ohne Beschränkung der Allgemeinheit 22, 23

PD positiv definit 5, 7, 8, 11, 24, 25

PDE partielle Differentialgleichung 1, 4, 19, 20, 25, 30, 31

RKHS reproduzierender Kern Hilbertraum 7–11, 24, 26

SPD strikt positiv definit 5, 7, 10–12, 15

Abbildungsverzeichnis

4.1	Plot eines Interpolanten über den Rand des Gebietes	20
5.1	Plots verschiedener Kerne	30
6.1	Lösung der ersten PDE	34
6.2	Lösung der zweiten PDE	35
6.3	Kollokations- und Validationspunkte	37
6.4	Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter	38
6.5	Testfehler auf Ω	39
6.6	Negativer Laplace der Gewichtsfunktion	40
6.7	Testfehler bei zufällig verteilten Kollokationspunkten	41
6.8	Fehler beim Greedy-Verfahren	42
6.9	Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei partielle Differentialgleichung (PDE) 1	43
6.10	Lösung der PDE 1 bei gewichtetem Greedy-Verfahren	44
6.11	Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 2	45
6.12	Testfehler der ersten PDE bei anderer Gewichtsfunktion	45
6.13	Plot über den Rand	46
6.14	Fehler und γ -Werte bei unterschiedlicher Anzahl an Validationspunkten .	47
6.15	Lösung bei Überanpassung	48
6.16	Gewählter Parameter γ	49
6.17	Fehler bei verschiedenen Parametern γ	50
6.18	Kondition bei verschiedenen Parametern γ	51
6.19	Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren	52
6.20	Laufzeit bei Greedy-Punktwahl	53
8.1	Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter beim Wendland Kern	57
8.2	Testfehler bei Kollokationspunkten mit einer Greedy-Punktwahl beim Wendland Kern	58
8.3	Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter bei absolutem Fehlerschätzer	59
8.4	Testfehler bei Kollokationspunkten mit einer Greedy-Punktwahl bei absolutem Fehlerschätzer	60

Tabellenverzeichnis

6.1	Vergleich FEM mit Kernkollokation	54
-----	---	----

Liste der noch zu erledigenden Punkte

KAPITEL 1

Einleitung

Einleitung

In dieser Bachelorarbeit stellen wir ein Verfahren zur numerischen Lösung von PDEs vor, die gewichtete Kernkollokation. Dazu schauen wir uns zunächst die gewöhnliche Kernkollokation an und erweitern diese dann auf die gewichtete.

Ziel dieser Arbeit ist es somit ein neues numerisches Verfahren zur Lösung von PDEs zu entwickeln und dieses am Ende zu testen und mit anderen Verfahren zu vergleichen.

Die hierfür zugrunde liegende Theorie stellen wir in Kapitel 2 vor. Die Kernkollokation ist ein Verfahren, welches auf der Idee der Interpolation beruht. Deswegen werden wir diese zunächst verallgemeinern und geeignete Ansatzfunktionen suchen, die sogenannten Kerne. Außerdem benötigen wir noch einen Funktionenraum, in dem unser Verfahren "funktionieren" wird, einen sogenannten reproduzierenden Kern Hilbertraum (RKHS). Dann werden wir verschiedene Eigenschaften der Kerne und der RKHS herleiten.

In Kapitel 3 werden wir die Theorie aus Kapitel 2 anwenden und das Standardverfahren der Kernkollokation herleiten. Dafür verfolgen wir zwei verschiedene Wege, zum einen die symmetrische Kollokation in Kapitel 3.1, die theoretisch gut motiviert ist, aber komplexer als die wesentlich simplere nicht-symmetrische Kollokation in Kapitel 3.2, welche aber theoretisch nicht so schön motiviert ist.

In Kapitel 4 kommen wir zur gewichteten Kollokation. Wir machen uns in Kapitel 4.1 zunächst die Motivation dafür klar. Wir stellen bei der Standardkollokation fest, dass die numerische Lösung auf dem Rand des Gebietes nicht genau ist. Dieses Problem

wollen wir mit der gewichteten Kollokation beheben. Dafür führen wir in Kapitel 4.2 die namensgebenden Gewichtsfunktionen ein. Daraus bauen wir Ansatzfunktionen, die auf dem Rand des Gebietes eine genaue Lösung liefern. Damit leiten wir wie in Kapitel 3 ein symmetrisches und ein nicht-symmetrisches Verfahren her.

In Kapitel 5 gehen wir auf die Implementierung aller Verfahren ein. Dabei stellen wir den grundlegenden Algorithmus vor und gehen auf die Parameterwahl und die Wahl der Kollokationspunkte ein.

In Kapitel 6 testen wir alle vorgestellten Verfahren. Dafür lösen wir eine PDE mithilfe unserer Verfahren und vergleichen die Ergebnisse bezüglich dem entstandenen Fehler, Laufzeit und Kondition.

Im letzten Kapitel fassen wir die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen und geben einen Ausblick, wie man unsere Verfahren noch verbessern könnte.

Kerne und reproduzierende Kern Hilbert- räume

Grundlagen

Die Kernkollokation ist ein Verfahren, welches auf der Idee der Interpolation beruht. Da wir bei partielle Differentialgleichungen (PDEs) auch Ableitungen betrachten müssen, reicht die einfache Punktauswertung für unsere Problemstellung nicht mehr aus, weswegen wir eine verallgemeinerte Form der Interpolation benötigen.

Definition 2.1. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ eine nicht leere Menge, \mathcal{H} ein Hilbertraum bestehend aus Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, \mathcal{H}' der dazugehörige Dualraum, $u \in \mathcal{H}$ und $\Lambda_N := \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} \subset \mathcal{H}'$ eine Menge von linearen, stetigen und linear unabhängigen Funktionalen. Dann ist eine Funktion $s_u \in \mathcal{H}$ ein verallgemeinerter Interpolant von u , wenn gilt, dass

$$\langle \lambda_i, u \rangle = \langle \lambda_i, s_u \rangle, 1 \leq i \leq N,$$

wobei wir $\langle \lambda_i, u \rangle := \lambda_i(u)$ für die Anwendung des Funktionalen schreiben.

Beispiel 2.2.

- Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $X_N := \{x_1, \dots, x_N\} \subset \Omega$ eine Menge von Punkten, \mathcal{H} ein Hilbertraum bestehend aus Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, für den die Punktauswertungsfunktionale

$\delta_{x_i}(f) := f(x_i), 1 \leq i \leq N$ stetig sind und $u \in \mathcal{H}$. Dann bekommen wir die Standardinterpolation mit $\Lambda_N := \{\delta_{x_1}, \dots, \delta_{x_N}\} \subset \mathcal{H}'$:

$$s(x_i) = \langle \delta_{x_i}, u \rangle = \langle \delta_{x_i}, s_u \rangle = s_u(x_i), 1 \leq i \leq N$$

- Für einen Multiindex $a \in \mathbb{N}_0^d$ sei D^a ein linearer partieller Differentialoperator. Dann erhält man mit $\lambda_i := \delta_{x_i} \circ D^a$ die Auswertungsfunktionale der Ableitung, mit welchen wir interpolieren können.
- Sei eine PDE mit Lösung $u \in C^k(\Omega) \cap C^l(\bar{\Omega})$ gegeben:

$$\begin{aligned} Lu(x) &= f(x), x \in \Omega \\ Bu(x) &= g(x), x \in \partial\Omega, \end{aligned} \tag{2.1} \quad \boxed{\text{eq:PDE}}$$

wobei L ein linearer Differentialoperator der Ordnung k und B ein linearer Randwertoperator der Ordnung l ist. Sei $X_N \subset \Omega$ eine Menge an Punkten, genant Kollokationspunkte. Dann möchten wir, dass s_u die PDE in den Punkten X_N erfüllt, also:

$$\begin{aligned} Ls_u(x_i) &= Lu(x_i) = f(x_i), x_i \in \Omega \\ Bs_u(x_i) &= Bu(x_i) = g(x_i), x_i \in \partial\Omega \end{aligned}$$

Wir müssen einen geeigneten diskreten Ansatz wählen um das Interpolationsproblem numerisch zu lösen. Hierfür wählen wir einen N -dimensionalen Unterraum $V_N := \text{span}\{\nu_1, \dots, \nu_N\} \subset \mathcal{H}$ und fordern, dass $s_u \in V_N$, also

$$s_u(x) := \sum_{j=1}^N \alpha_j \nu_j(x), x \in \Omega, \alpha \in \mathbb{R}^N.$$

Damit können wir die Interpolationsbedingungen schreiben als:

$$\langle \lambda_i, u \rangle = \langle \lambda_i, s_u \rangle = \sum_{j=1}^N \alpha_j \langle \lambda_i, \nu_j \rangle$$

Diese lassen sich auch als lineares Gleichungssystem $A_\Lambda \alpha = b$ schreiben mit $(A_\Lambda)_{i,j} := \langle \lambda_i, \nu_j \rangle, b_i := \langle \lambda_i, u \rangle$.

Wir suchen jetzt nach geeigneten Ansatzfunktionen und einem Hilbertraum, für den die Auswertungs- und Differentialfunktionale stetig sind. Dies führt uns zur Definition von Kern Funktionen, mit denen wir einen Hilbertraum konstruieren werden, der das Geforderte liefern wird.

Kern

Definition 2.3 (Kern). Sei Ω eine beliebige nicht leere Menge. Ein reeller Kern auf Ω ist eine symmetrische Funktion $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$.

Für alle $N \in \mathbb{N}$ und für eine Menge $X_N = \{x_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$ ist die Kernmatrix (oder Gram'sche Matrix) $A := A_{K,X_N} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ definiert als $A := [K(x_i, x_j)]_{i,j=1}^N$.

Ein Kern K heißt positiv definit (PD) auf Ω , wenn für alle $N \in \mathbb{N}$ und alle Mengen X_N mit paarweise verschiedenen Elementen $\{x_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$ gilt, dass die Kernmatrix positiv semidefinit ist. Der Kern K heißt strikt positiv definit (SPD), falls die Kernmatrix für alle solche N und X_N positiv definit ist.

thm:Kombi

Satz 2.4. Sei Ω eine beliebige nicht leere Menge, $K_1, K_2 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ zwei PD Kerne auf Ω und $a \geq 0$. Dann sind folgende Funktionen wieder PD Kerne auf Ω :

1. $K(x, y) := K_1(x, y) + K_2(x, y)$
2. $K(x, y) := aK_1(x, y)$
3. $K(x, y) := K_1(x, y)K_2(x, y)$

Beweis. Die Symmetrie ist in allen Fällen offensichtlich. Wir betrachten daher nur die positive Definitheit.

Sei $X_N \subset \Omega$ eine Menge mit paarweise verschiedenen Punkten $\{x_i\}_{i=1}^N$.

1. Für die Kernmatrix von K gilt:

$$\begin{aligned}
 A_K &= \begin{pmatrix} K(x_1, x_1) & \cdots & K(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(x_N, x_1) & \cdots & K(x_N, x_N) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} K_1(x_1, x_1) & \cdots & K_1(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_1(x_N, x_1) & \cdots & K_1(x_N, x_N) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} K_2(x_1, x_1) & \cdots & K_2(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_2(x_N, x_1) & \cdots & K_2(x_N, x_N) \end{pmatrix} \\
 &= A_{K_1} + A_{K_2}
 \end{aligned}$$

Wir erhalten also für ein beliebiges $\alpha \neq 0$

$$\begin{aligned}
 \alpha^T A_K \alpha &= \alpha^T (A_{K_1} + A_{K_2}) \alpha \\
 &= \underbrace{\alpha^T A_{K_1} \alpha}_{\geq 0} + \underbrace{\alpha^T A_{K_2} \alpha}_{\geq 0} \geq 0
 \end{aligned}$$

2. Für ein beliebiges $\alpha \neq 0$ gilt

$$\alpha^T A_K \alpha = \alpha^T a A_{K_1} \alpha = a \alpha^T A_{K_1} \alpha \geq 0$$

3. Wir betrachten wieder die Kernmatrix.

$$\begin{aligned}
 A_K &= \begin{pmatrix} K_1(x_1, x_1)K_2(x_1, x_1) & \cdots & K_1(x_1, x_N)K_2(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_1(x_N, x_1)K_2(x_N, x_1) & \cdots & K_1(x_N, x_N)K_2(x_N, x_N) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} K_1(x_1, x_1) & \cdots & K_1(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_1(x_N, x_1) & \cdots & K_1(x_N, x_N) \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} K_2(x_1, x_1) & \cdots & K_2(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_2(x_N, x_1) & \cdots & K_2(x_N, x_N) \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

wobei \circ das Hadamard-Produkt der beiden Matrizen bezeichnet. Die beiden letzten Matrizen sind positiv semidefinit und damit nach dem Satz von Schur [1, Theorem 7.5.3] auch das Produkt der beiden.

□

ex:Kern

Beispiel 2.5. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und $\gamma \in \mathbb{R}^+$. Dann sind folgende Funktionen PD Kerne auf Ω :

1. Skalarprodukt: $K(x, y) := \gamma^{-1}(x, y)$
2. Gauß Kern: $K(x, y) := \exp(-\gamma\|x - y\|^2)$ ist sogar SPD
3. Wendland Kern in zwei Dimensionen: $K(x, y) := (1 - \|x - y\|)_+^4(4\|x - y\| + 1)$, wobei $(1 - \|x - y\|)_+$ definiert ist, als

$$(1 - \|x - y\|)_+ = \begin{cases} 1 - \|x - y\| & , \text{für } \|x - y\| \leq 1 \\ 0 & , \text{für } \|x - y\| > 1 \end{cases},$$

ist SPD.

Beweis.

1. Die Symmetrie folgt aus der Symmetrie des Skalarprodukts. Die Kernmatrix entspricht der Gram Matrix des Skalarprodukts. Diese ist aufgrund der positiven Definitheit des Skalarprodukt positiv definit.
2. Einen Beweis dafür findet man in Wendland [2, Theorem 6.10].
3. Auch hierfür findet man einen Beweis in Wendland [2, Theorem 9.13]. Außerdem findet man dort eine Verallgemeinerung auf alle Dimensionen.

□

Die Definition der Kerne führt uns direkt zu den gesuchten Hilberträumen. Diese sind zunächst ohne Bezug auf Kerne definiert, wir werden aber feststellen, dass sie eng miteinander verknüpft sind.

Definition 2.6 (Reproduzierender Kern Hilbertraum). Sei Ω eine beliebige nicht leere Menge und \mathcal{H} ein Hilbertraum bestehend aus Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ und Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}}$. Dann nennt man \mathcal{H} einen reproduzierenden Kern Hilbertraum (RKHS) auf Ω , wenn eine Funktion $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ existiert, sodass

1. $K(\cdot, x) \in \mathcal{H}$ für alle $x \in \Omega$
2. $(f, K(\cdot, x))_{\mathcal{H}} = f(x)$ für alle $x \in \Omega, f \in \mathcal{H}$ (Reproduzierbarkeit)

Man nennt K den reproduzierenden Kern von \mathcal{H} .

Dass K tatsächlich ein Kern nach Definition 2.3 ist, zeigt folgender Satz.

EindeutigkeitKern

Satz 2.7. Sei \mathcal{H} ein RKHS auf einer beliebigen nicht leeren Menge Ω mit reproduzierendem Kern K . Dann ist K ein Kern, eindeutig und PD.

Beweis. Wir folgen dem Beweis in Santin [3, Theorem 3.6].

Wir zeigen zunächst, dass K tatsächlich ein Kern ist.

$$\begin{aligned}
 K(x, y) &= (K(\cdot, y), K(x, \cdot))_{\mathcal{H}} && \text{(Reproduzierbarkeit)} \\
 &= (K(x, \cdot), K(\cdot, y))_{\mathcal{H}} \\
 &= K(y, x) && \text{(Reproduzierbarkeit)}
 \end{aligned}$$

Sei $X_N := \{x_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$ eine Menge von N paarweise verschiedenen Punkten und $\alpha \in \mathbb{R}^N, \alpha \neq 0$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}
 \alpha^T A \alpha &= \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) \\
 &= \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j (K(\cdot, x_i), K(\cdot, x_j))_{\mathcal{H}} && \text{(Reproduzierbarkeit)} \\
 &= \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i K(\cdot, x_i), \sum_{j=1}^N \alpha_j K(\cdot, x_j) \right)_{\mathcal{H}} \\
 &= \left\| \sum_{i=1}^N \alpha_i K(\cdot, x_i) \right\|_{\mathcal{H}}^2 \geq 0
 \end{aligned}$$

K ist somit PD.

Seien jetzt K_1, K_2 zwei reproduzierende Kerne in \mathcal{H} . Dann gilt für alle $x, y \in \Omega$:

$$K_1(x, y) = (K_1(\cdot, y), K_2(x, \cdot))_{\mathcal{H}} \quad (\text{Reproduzierbarkeit von } K_1)$$

$$= K_2(x, y) \quad (\text{Reproduzierbarkeit von } K_2)$$

Also ist K eindeutig. □

Bei Interpolationsproblemen kommen wir jedoch aus der anderen Richtung und haben Ansatzfunktionen, also einen Kern K , gegeben und wollen damit eine Funktion approximieren. Demnach stellt sich die Frage ob zu jedem Kern K ein RKHS existiert. Diese wird durch folgenden Satz beantwortet:

Satz 2.8. *Sei Ω eine beliebige nicht leere Menge und $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein positiv definiten Kern. Dann existiert genau ein RKHS $\mathcal{H}_K(\Omega)$ mit reproduzierendem Kern K .*

Beweis. Einen Beweis findet man in Wendland [2, Kap. 10.2].

Man betrachtet dort zunächst den $\text{span}\{K(\cdot, y), y \in \Omega\}$ und stellt fest, dass dieser mit einem geeigneten Innenprodukt ein Prähilbertraum ist. Aus diesem kann man den gesuchten RKHS konstruieren. □

Wir wollen an einen Satz aus der Funktionalanalysis erinnern, den wir noch oft benötigen werden.

Satz 2.9 (Fréchet-Riesz). *Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum und $\lambda \in \mathcal{H}'$ ein beschränktes lineares Funktional. Dann existiert ein eindeutig bestimmtes Element $\nu_\lambda \in \mathcal{H}$, so dass für alle $x \in \mathcal{H}$ gilt:*

$$\langle \lambda, x \rangle = (x, \nu_\lambda)_{\mathcal{H}}$$

Wir nennen ν_λ den Riesz-Repräsentanten von λ .

Beweis. Einen Beweis findet man in den meisten Einführungen in die Funktionalanalysis, beispielsweise in Kaballo [4, Satz 7.3]. □

Zur Wohldefiniertheit unserer Interpolation benötigen wir die Stetigkeit aller verwendeten Funktionale. Zunächst betrachten wir die Punktauswertungsfunktionale.

stetig

Satz 2.10. Sei Ω eine beliebige nicht leere Menge und \mathcal{H} ein Hilbertraum bestehend aus Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Dann gilt:

stetig1

1. \mathcal{H} ist genau dann ein RKHS, wenn die Auswertungsfunktionale stetig sind.

stetig2

2. Wenn \mathcal{H} ein RKHS mit reproduzierendem Kern K ist, dann ist $K(\cdot, x)$ der Riesz-Repräsentant des Funktionals $\delta_x \in \mathcal{H}'$.

Beweis. Wir folgen dem Beweis in Santin [3, Proposition 3.8].

1. Sei \mathcal{H} ein RKHS. Für alle $f \in \mathcal{H}$ und alle $x \in \Omega$ gilt:

$$\begin{aligned}
 |\langle \delta_x, f \rangle| &= |f(x)| \\
 &= |(f, K(\cdot, x))_{\mathcal{H}}| && \text{(Reproduzierbarkeit)} \\
 &\leq \|f\|_{\mathcal{H}} \|K(\cdot, x)\|_{\mathcal{H}} && \text{(Cauchy Schwarz)} \\
 &= \|f\|_{\mathcal{H}} \sqrt{(K(\cdot, x), K(\cdot, x))_{\mathcal{H}}} \\
 &= \|f\|_{\mathcal{H}} \sqrt{K(x, x)} && \text{(Reproduzierbarkeit)} \\
 \Leftrightarrow \frac{|\langle \delta_x, f \rangle|}{\|f\|_{\mathcal{H}}} &\leq \sqrt{K(x, x)}
 \end{aligned}$$

Also ist δ_x beschränkt und damit stetig.

Für die andere Richtung nehmen wir an, dass $\delta_x \in \mathcal{H}'$ für alle $x \in \Omega$. Also existiert ein Riesz-Repräsentant $\nu_{\delta_x} \in \mathcal{H}$. Definieren wir $K(\cdot, x) := \nu_{\delta_x}$, dann ist K ein reproduzierender Kern. Es ist klar, dass $K(\cdot, x) \in \mathcal{H}$ und nach der Definition des Riesz-Repräsentanten gilt:

$$(f, K(\cdot, x))_{\mathcal{H}} = (f, \nu_{\delta_x})_{\mathcal{H}} = \langle \delta_x, f \rangle = f(x)$$

2. Die Behauptung folgt sofort aus der Reproduzierbarkeit von K , da $(f, K(\cdot, x))_{\mathcal{H}} = f(x)$ für alle $x \in \Omega$ und alle $f \in \mathcal{H}$ gilt.

□

Wir haben gesehen, dass in einem RKHS \mathcal{H}_K die Auswertungsfunktionale stetig sind. Da wir uns mit Differentialgleichungen beschäftigen, wollen wir auch Ableitungen auswerten. Dafür ist es nötig, dass diese ebenfalls in \mathcal{H}_K liegen.

Satz 2.11. Sei $k \in \mathbb{N}$. Angenommen $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ist offen, K ein SPD Kern auf Ω und $K \in C^{2k}(\Omega \times \Omega)$. Dann gilt für alle Multiindizes $a \in \mathbb{N}_0^d$ mit $|a| \leq k$ und alle $x \in \Omega$, dass $D_2^a K(\cdot, x) \in \mathcal{H}_K(\Omega)$, wobei der tiefgestellte Index bedeutet, dass der Operator auf das zweite Argument angewandt wird.

Außerdem gilt für alle $f \in \mathcal{H}_K(\Omega)$:

$$D^a f(x) = (f, D_2^a K(\cdot, x))_{\mathcal{H}_K(\Omega)}$$

und damit dass $\lambda := \delta_x \circ D^a$ stetig ist.

Beweis. Einen Beweis des ersten Teils findet man im Vorlesungsskript von Santin [3, Proposition 7.13] und einen Beweis des zweiten Teils in Santin [3, Proposition 3.14]. Der Beweis der Stetigkeit von $\lambda := \delta_x \circ D^a$ verläuft komplett analog zum Beweis von 2.10.1. \square

In Satz 2.10 haben wir gesehen, wie der Riesz-Repräsentant des Auswertungsfunktionals aussieht. Dies wollen wir jetzt auf alle Funktionale verallgemeinern.

Riesz

Satz 2.12. Sei K ein PD Kern auf $\Omega \neq \emptyset$ und $\lambda \in \mathcal{H}_K(\Omega)'$. Dann ist $\lambda^y K(\cdot, y) \in \mathcal{H}_K(\Omega)$ und es gilt $\langle \lambda, f \rangle = (f, \lambda^y K(\cdot, y))_{\mathcal{H}_K(\Omega)}$ für alle $f \in \mathcal{H}_K(\Omega)$, wobei der hochgestellte Index bedeutet, dass das Funktional auf die zweite Komponente angewandt wird. Es ist also $\lambda^y K(\cdot, y)$ der Riesz-Repräsentant von λ .

Beweis. Wir folgen dem Beweis in Santin [3, Proposition 7.8].

Da $\lambda \in \mathcal{H}_K(\Omega)$, existiert ein Riesz-Repräsentant $\nu_\lambda \in \mathcal{H}_K(\Omega)$ mit $\langle \lambda, f \rangle = (f, \nu_\lambda)_{\mathcal{H}_K(\Omega)}$. Außerdem ist $f_x(y) := K(x, y)$ für alle $x \in \Omega$ eine Funktion in $\mathcal{H}_K(\Omega)$. Damit bekommen wir:

$$\begin{aligned} \langle \lambda, K(x, \cdot) \rangle &= \langle \lambda, f_x \rangle \\ &= (f_x, \nu_\lambda)_{\mathcal{H}_K(\Omega)} && \text{(Riesz-Repräsentant)} \\ &= (K(\cdot, x), \nu_\lambda)_{\mathcal{H}_K(\Omega)} \\ &= \nu_\lambda(x) && \text{(Reproduzierbarkeit)} \end{aligned}$$

Damit gilt $\nu_\lambda(\cdot) = \lambda^y K(\cdot, y)$ und damit ist $\lambda^y K(\cdot, y)$ der Riesz-Repräsentant von λ . Da $\nu_\lambda \in \mathcal{H}_K(\Omega)$ gilt auch $\lambda^y K(\cdot, y) \in \mathcal{H}_K(\Omega)$. \square

Jetzt fehlt nur noch die lineare Unabhängigkeit aller verwendeten Funktionale. Zunächst betrachten wir die der Auswertungsfunktionale:

Satz 2.13. *Sei Ω eine beliebige nicht leere Menge und \mathcal{H} ein RKHS mit Kern K . Dann sind $\{\delta_x, x \in \Omega\}$ genau dann linear unabhängig, wenn K SPD ist.*

Beweis. Wir folgen dem Beweis in Santin [3, Proposition 3.8].

Seien $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathcal{H}'$ und $\nu_{\lambda_1}, \dots, \nu_{\lambda_n} \in \mathcal{H}$ die dazugehörigen Riesz Repräsentanten. Diese sind linear abhängig, wenn ein $\alpha \in \mathbb{R}^n$ und $\alpha \neq 0$ existiert mit $\lambda := \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i = 0$, also dass $\langle \lambda, f \rangle = 0$ für alle $f \in \mathcal{H}$. Das gilt genau dann, wenn die Riesz Repräsentanten linear abhängig sind, da

$$0 = \langle \lambda, f \rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i \langle \lambda_i, f \rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i (\nu_{\lambda_i}, f)_{\mathcal{H}} = \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \nu_{\lambda_i}, f \right)_{\mathcal{H}}$$

Also gilt nach 2.10.2, dass $\{\delta_x, x \in \Omega\}$ genau dann linear unabhängig sind, wenn $\{K(\cdot, x), x \in \Omega\}$ linear unabhängig sind.

Um die strikte positive Definitheit nachzuweisen, betrachten wir die Matrix $A = [K(x_i, x_j)]_{i,j=1}^N$ für paarweise verschiedene Punkte $x_i, 1 \leq i \leq N$. Sei also $\beta \in \mathbb{R}^n, \beta \neq 0$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \beta^T A \beta &= \sum_{i,j=1}^n \beta_i \beta_j K(x_i, x_j) \\ &= \sum_{i,j=1}^n \beta_i \beta_j (K(\cdot, x_i), K(\cdot, x_j))_{\mathcal{H}} \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \beta_i K(\cdot, x_i), \sum_{j=1}^n \beta_j K(\cdot, x_j) \right)_{\mathcal{H}} \\ &= \left\| \sum_{i=1}^n \beta_i K(\cdot, x_i) \right\|_{\mathcal{H}}^2 > 0 \end{aligned}$$

Für die strikte Ungleichung benötigen wir die lineare Unabhängigkeit. Also gilt, dass K SPD ist, wenn $\{\delta_x, x \in \Omega\}$ linear unabhängig sind.

Die andere Richtung folgt genauso aus der strikten Ungleichung. □

Jetzt betrachten wir die lineare Unabhängigkeit der Auswertungen der Ableitungen:

linUn

Satz 2.14. *Sei K ein translationsinvarianter Kern auf \mathbb{R}^d , das heißt $K(x, y) = \Phi(x - y)$ für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$. Sei $k \in \mathbb{N}$ und angenommen, dass $\Phi \in L_1(\mathbb{R}^d) \cap C^{2k}(\mathbb{R}^d)$. Sei $a_1, \dots, a_N \in \mathbb{N}_0^d$ mit $|a_i| \leq k$ und sei $X_N \subset \mathbb{R}^d$. Angenommen, dass $a_i \neq a_j$, wenn $x_i = x_j$, dann sind die Funktionale $\Lambda_N := \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$, $\lambda_i := \delta_{x_i} \circ D^{a_i}$ linear unabhängig in $\mathcal{H}_K(\mathbb{R}^d)'$.*

Beweis. Den Beweis findet man in Santin [3, Theorem 7.15]. □

Damit haben wir alle nötigen Werkzeuge, um die Interpolation durchzuführen zu können. Wir haben einen Kern K , den dazugehörigen Hilbertraum $\mathcal{H}_K(\Omega)$, sowie die Stetigkeit und lineare Unabhängigkeit aller benötigten Operatoren. Jetzt müssen wir nur noch einen geeigneten Ansatz wählen.

Standardkollokation

kollokation

3.1 Symmetrische Kollokation

sec:SymKol

Sei wieder $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen und beschränkt, L und B lineare Differentialoperatoren der Ordnung k und l , $K \in C^{2 \max\{l,k\}}(\Omega \times \Omega)$ ein SPD Kern und eine PDE wie in (2.1) gegeben. Für ein $N \in \mathbb{N}$ betrachten wir die Menge $X_N = \{x_i\}_{i=1}^N \subset \bar{\Omega}$, die wir in $N_{in} > 0$ Punkte im Inneren und $N_{bd} > 0$ Punkte auf dem Rand aufteilen. Also haben wir die beiden Mengen

$$\begin{aligned} X_{in} &= X_N \cap \Omega \\ X_{bd} &= X_N \cap \partial\Omega \end{aligned}$$

Wir definieren die Menge $\Lambda_N = \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ an linearen Funktionalen mit

$$\lambda_i = \begin{cases} \delta_{x_i} \circ L & x_i \in X_{in} \\ \delta_{x_i} \circ B & x_i \in X_{bd} \end{cases}$$

Wir wissen aus Satz 2.10, dass in $\mathcal{H}_K(\Omega)$ alle λ_i stetig und aus Satz 2.14, dass sie linear unabhängig sind. Als Ansatzfunktionen, also den Unterraum $V_N \subset \mathcal{H}_K(\Omega)$, wählen wir die Riesz Repräsentanten der λ_i :

$$\begin{aligned} V_N &= \text{span}\{\lambda_1^y K(x, y), \dots, \lambda_N^y K(x, y)\} \\ &= \text{span}\{(\delta_{x_1} \circ L)^y K(x, y), \dots, (\delta_{x_{N_{in}}} \circ L)^y K(x, y)\} \\ &\quad \cup \{(\delta_{x_{N_{in}+1}} \circ B)^y K(x, y), \dots, (\delta_{x_N} \circ B)^y K(x, y)\} \\ &=: \text{span}\{\nu_1, \dots, \nu_N\} \end{aligned}$$

Damit bekommen wir folgenden Interpolanten:

$$\begin{aligned} s_u(x) &= \sum_{j=1}^N \alpha_j \lambda_j^y K(x, y) \\ &= \sum_{j=1}^{N_{in}} \alpha_j (\delta_{x_j} \circ L)^y K(x, y) + \sum_{j=N_{in}+1}^N \alpha_j (\delta_{x_j} \circ B)^y K(x, y) \end{aligned}$$

Die α_j erhält man als Lösung des lineares Gleichungssystem (LGS) $A\alpha = b$ mit $A_{i,j} := (\nu_i, \nu_j)_{\mathcal{H}_K}$, da

$$\langle \lambda_i, s_u \rangle = \langle \lambda_i, \sum_{j=1}^N \alpha_j \nu_j \rangle = \sum_{j=1}^N \alpha_j \langle \lambda_i, \nu_j \rangle \stackrel{2.12}{=} \sum_{j=1}^N \alpha_j (\nu_j, \nu_i),$$

also

$$\begin{pmatrix} A_{L,L} & A_{L,B} \\ A_{L,B}^T & A_{B,B} \end{pmatrix} \alpha = \begin{pmatrix} b_L \\ b_B \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} (A_{L,L})_{i,j} &= (\delta_{x_i} \circ L)^x (\delta_{x_j} \circ L)^y K(x, y), x_i, x_j \in X_{in} \\ (A_{L,B})_{i,j} &= (\delta_{x_i} \circ L)^x (\delta_{x_j} \circ B)^y K(x, y), x_i \in X_{in}, x_j \in X_{bd} \\ (A_{B,B})_{i,j} &= (\delta_{x_i} \circ B)^x (\delta_{x_j} \circ B)^y K(x, y), x_i, x_j \in X_{bd} \end{aligned}$$

und

$$(b_L)_i = f(x_i), x_i \in X_{in}$$

$$(b_B)_i = g(x_i), x_i \in X_{bd}$$

Das LGS ist lösbar, da A offensichtlich symmetrisch und positiv definit ist, da:

$$\alpha^T A \alpha = \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j (\nu_i, \nu_j)_{\mathcal{H}_K} = \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \nu_i, \sum_{j=1}^N \alpha_j \nu_j \right)_{\mathcal{H}_K} = \left\| \sum_{i=1}^N \alpha_i \nu_i \right\|_{\mathcal{H}_K}^2 > 0$$

Für die letzte Abschätzung benutzen wir die lineare Unabhängigkeit der Funktionale aus Satz 2.14.

3.2 Nicht-Symmetrische Kollokation

sec:NSymKol

Sei die gleiche Problemstellung wie im vorherigen Kapitel gegeben. Wir wählen jedoch einen anderen Unterraum V_N für die Ansatzfunktionen:

$$V_N := \text{span}\{K(x, x_1), \dots, K(x, x_N)\}$$

Damit bekommen wir folgenden Interpolanten:

$$s_u(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j K(x, x_j)$$

Die α_i erhält man wieder als Lösung des LGS $A\alpha = b$ mit

$$A := \begin{pmatrix} A_L \\ A_B \end{pmatrix}$$

mit

$$(A_L)_{i,j} = (\delta_{x_i} \circ L)^x K(x, x_j), x_i \in X_{in}, x_j \in X_N$$

$$(A_B)_{i,j} = (\delta_{x_i} \circ B)^x K(x, x_j), x_i \in X_{bd}, x_j \in X_N$$

und b wie im vorherigen Abschnitt.

Bei diesem Ansatz kann jedoch nicht garantiert werden, dass die Matrix A invertierbar ist und damit, dass das LGS auch lösbar ist. Allerdings ist die Konstruktion eines Gegenbeispiels aufwendig und es ist in der Praxis unwahrscheinlich, dass man auf einen solchen Fall trifft. Man findet ein Beispiel in Hon u. a. [5].

Gewichtete Kollokation

a:Gewichtet

4.1 Motivation für die gewichtete Kollokation

motivation

Die Standardkollokation hat, egal ob symmetrisch oder nicht-symmetrisch, das Problem, dass wir Punkte im Inneren und auf dem Rand unseres Definitionsbereichs benötigen. Dies macht zum einen die Implementierung etwas komplexer, da man dabei beide Mengen beachten muss, zum anderen werden die Werte auf dem Rand nicht zwingend genau angenommen. In Abbildung 4.1 ist die approximierte Lösung einer PDE mit Nullrandwerten über den Rand geplottet. Man erkennt deutlich, wo die Stützstellen der Ansatzfunktionen liegen und auch die Schwankungen zwischen den Stützstellen.

Wir stellen zur Vereinfachung zunächst fest, dass es bei einer PDE mit Dirichlet-Randwerten genügt, konstante Nullrandwerte zu betrachten. Dafür sei eine PDE wie in (2.1) mit $B = I$, wobei I die Identität bezeichnet, gegeben. Wir nehmen an, dass eine Funktion $\bar{g} \in C^k(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega})$ existiert mit $\bar{g}|_{\partial\Omega} = g$. Damit gilt $u = \bar{u} + \bar{g}$ für eine Funktion \bar{u} . Eingesetzt erhalten wir

$$\begin{aligned} L\bar{u}(x) + L\bar{g}(x) &= f(x), x \in \Omega \\ \bar{u}(x) + \bar{g}(x) &= g(x), x \in \partial\Omega, \end{aligned}$$

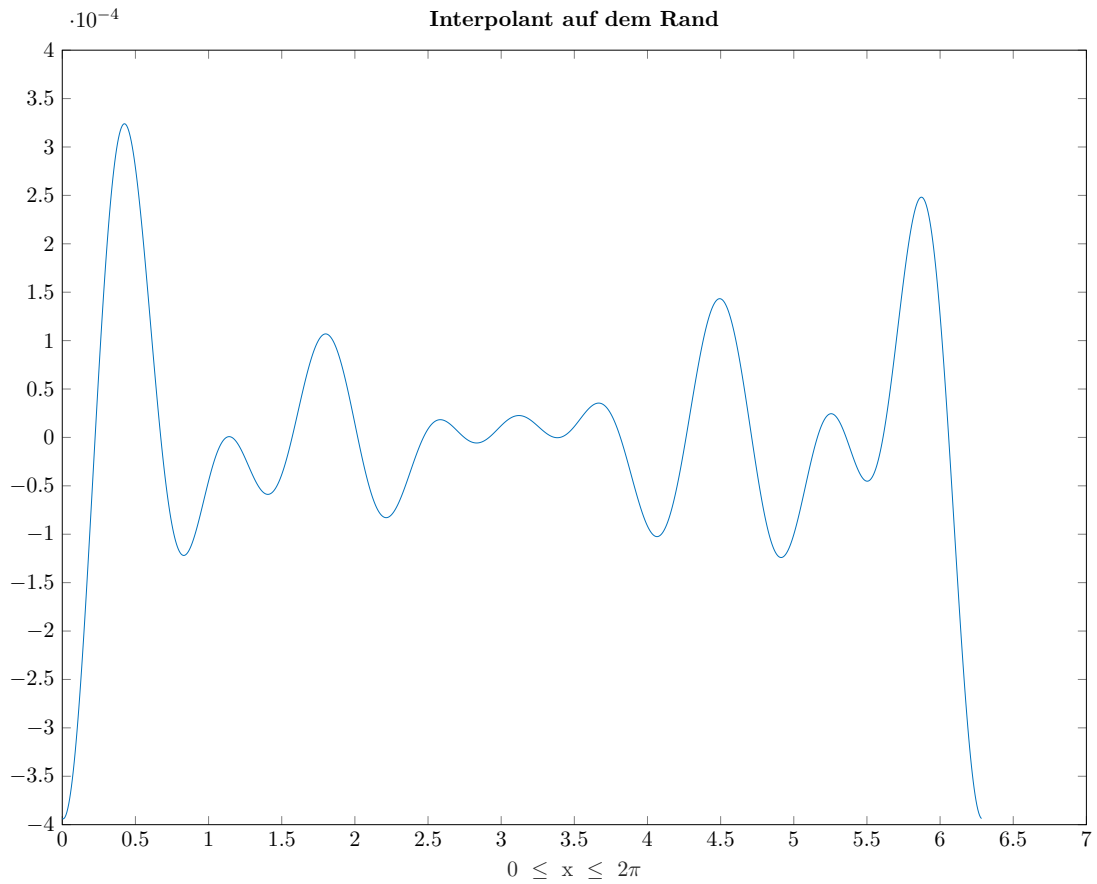


fig:rand

Abbildung 4.1: Plot eines Interpolanten über den Rand des Gebietes

was äquivalent dazu ist, dass wir folgende PDE nach \bar{u} lösen:

$$\begin{aligned} L\bar{u}(x) &= f(x) + L\bar{g}(x), x \in \Omega \\ \bar{u}(x) &= 0, x \in \partial\Omega. \end{aligned}$$

Die Idee ist jetzt, einen Kern, beziehungsweise Ansatzfunktionen zu konstruieren, welche auf dem Rand von Ω Null ist. Der Interpolant ist eine Linearkombination aus diesen Funktionen und wird demnach auf dem Rand auch Null sein. Dafür führen wir Gewichtsfunktionen ein, die dann in Verbindung mit einem gegebenen Kern das Geforderte erfüllen werden. Inspiriert ist dieses Vorgehen von Höllig u. a. [6]. Dort findet man auch weitere Theorie der hier sehr einfach eingeführten Gewichtsfunktionen.

4.2 Gewichtsfunktionen

sec:gewicht

def:gewicht

Definition 4.1. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen und beschränkt. Eine Funktion $w : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ heißt Gewichtsfunktion auf Ω , wenn sie folgende Eigenschaften erfüllt:

1. $w(x) > 0$ für alle $x \in \Omega$
2. $w(x) = 0$ für alle $x \in \partial\Omega$
3. $w(x) < 0$ für alle $x \in \mathbb{R}^n \setminus \bar{\Omega}$

thm:Gewicht

Satz 4.2. Seien $\Omega_1, \Omega_2 \subset \mathbb{R}^d$ zwei offene und beschränkte Mengen und w_1, w_2 dazugehörige Gewichtsfunktionen. Dann gilt:

1. Für das Komplement $\Omega = \mathbb{R}^n \setminus \bar{\Omega}_1$ ist $w = -w_1$ eine Gewichtsfunktion.
2. Für die Vereinigung $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ ist $w = w_1 + w_2 + \sqrt{w_1^2 + w_2^2}$ eine Gewichtsfunktion.
3. Für den Schnitt $\Omega = \Omega_1 \cap \Omega_2$ ist $w = w_1 + w_2 - \sqrt{w_1^2 + w_2^2}$ eine Gewichtsfunktion.

Beweis.

1. ▪ Sei $x \in \Omega = \mathbb{R}^d \setminus \bar{\Omega}_1$.

$$w(x) = -w_1(x) > 0$$

- Sei $x \in \partial\Omega = \partial(\mathbb{R}^d \setminus \bar{\Omega}_1) = \partial\Omega_1$

$$w(x) = -w_1(x) = 0$$

- Sei $x \in \mathbb{R}^d \setminus \bar{\Omega} = \Omega_1$

$$w(x) = -w_1(x) < 0$$

2. ▪ Sei $x \in \Omega_1, x \in \Omega_2. \Rightarrow w_1(x) > 0, w_2(x) > 0$

$$w(x) = w_1(x) + w_2(x) + \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} > 0$$

- Sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit (oBdA) $x \in \Omega_1, x \notin \overline{\Omega_2} \Rightarrow w_1(x) > 0, w_2(x) < 0$

$$\begin{aligned}
 w(x) &= w_1(x) + w_2(x) + \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\
 &> w_1(x) + w_2(x) + \underbrace{\sqrt{w_2(x)^2}}_{=|w_2(x)|=-w_2(x)} \\
 &= w_1(x) + w_2(x) - w_2(x) \\
 &= w_1(x) > 0
 \end{aligned}$$

- Sei $x \notin \overline{\Omega_1}, x \notin \overline{\Omega_2} \Rightarrow w_1(x) < 0, w_2(x) < 0$

$$\begin{aligned}
 w(x) &= w_1(x) + w_2(x) + \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \stackrel{!}{<} 0 \\
 &\Leftrightarrow -w_1(x) - w_2(x) > \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\
 &\Leftrightarrow w_1(x)^2 + \underbrace{2w_1(x)w_2(x)}_{>0} + w_2(x)^2 > w_1(x)^2 + w_2(x)^2
 \end{aligned}$$

- Sei oBdA $x \in \partial\Omega_1, x \notin \Omega_2 \Rightarrow w_1(x) = 0, w_2(x) \leq 0$

$$\begin{aligned}
 w(x) &= w_1(x) + w_2(x) + \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\
 &= w_2(x) + \sqrt{w_2(x)^2} \\
 &= w_2(x) - w_2(x) = 0
 \end{aligned}$$

- Sei oBdA $x \in \partial\Omega_1, x \in \Omega_2 \Rightarrow w_1(x) = 0, w_2(x) > 0$

$$\begin{aligned}
 w(x) &= w_1(x) + w_2(x) + \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\
 &= w_2(x) + \sqrt{w_2(x)^2} > 0
 \end{aligned}$$

3. ▪ Sei $x \in \Omega_1, x \in \Omega_2. \Rightarrow w_1(x) > 0, w_2(x) > 0$

$$\begin{aligned} w(x) &= w_1(x) + w_2(x) - \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \stackrel{!}{>} 0 \\ &\Leftrightarrow w_1(x) + w_2(x) > \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\ &\Leftrightarrow (w_1(x) + w_2(x))^2 > w_1(x)^2 + w_2(x)^2 \\ &\Leftrightarrow w_1(x)^2 + 2w_1(x)w_2(x) + w_2(x)^2 > w_1(x)^2 + w_2(x)^2 \\ &\Leftrightarrow 2w_1(x)w_2(x) > 0 \end{aligned}$$

- Sei oBdA $x \in \Omega_1, x \notin \overline{\Omega_2}. \Rightarrow w_1(x) > 0, w_2(x) < 0$

$$\begin{aligned} w(x) &= w_1(x) + w_2(x) - \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\ &< w_1(x) + w_2(x) - \sqrt{w_1(x)^2} \\ &= w_1(x) + w_2(x) - w_1(x) \\ &= w_2(x) < 0 \end{aligned}$$

- Sei oBdA $x \in \partial\Omega_1, x \in \Omega_2. w_1(x) = 0, w_2(x) > 0$

$$\begin{aligned} w(x) &= w_1(x) + w_2(x) - \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\ &= w_2(x) - \sqrt{w_2(x)^2} = 0 \end{aligned}$$

- Sei oBdA $x \in \partial\Omega_1, x \notin \overline{\Omega_2}. w_1(x) = 0, w_2(x) < 0$

$$\begin{aligned} w(x) &= w_1(x) + w_2(x) - \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\ &= w_2(x) - \sqrt{w_2(x)^2} \\ &= 2w_2(x) < 0 \end{aligned}$$

- Sei $x \notin \overline{\Omega_1}, x \notin \overline{\Omega_2}. \Rightarrow w_1(x) < 0, w_2(x) < 0$

$$w(x) = w_1(x) + w_2(x) - \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} < 0$$

- Sei $x \in \partial\Omega_1, x \in \partial\Omega_2. \Rightarrow w_1(x) = 0, w_2(x) = 0$

$$w(x) = w_1(x) + w_2(x) - \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} = 0$$

□

ex:Gewicht

Beispiel 4.3. Sei $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1)$. Dann können wir Ω schreiben als $\Omega = \Omega_1 \cap \Omega_2$ mit $\Omega_1 = (-1, 1) \times (-\infty, \infty), \Omega_2 = (-\infty, \infty) \times (-1, 1)$. Dann sind

$$w_1(x, y) = -x^2 + 1$$

$$w_2(x, y) = -y^2 + 1$$

Gewichtsfunktionen auf Ω_1 bzw. Ω_2 . Nach Satz 4.2 ist dann die Gewichtsfunktion für Ω gegeben durch:

$$\begin{aligned} w(x, y) &= w_1(x, y) + w_2(x, y) - \sqrt{w_1(x, y)^2 + w_2(x, y)^2} \\ &= -x^2 + 1 - y^2 + 1 - \sqrt{(-x^2 + 1)^2 + (-y^2 + 1)^2} \\ &= -x^2 - y^2 + 2 - \sqrt{x^4 - 2x^2 + y^4 - 2y^2 + 2} \end{aligned}$$

Wir wollen jetzt einen Kern und eine Gewichtsfunktion verknüpfen und bekommen damit eine neue Funktion, die auf dem Rand unseres Definitionsgebiets konstant Null ist. Dazu betrachten wir wieder zwei verschiedene Ansätze.

4.3 Symmetrische Kollokation

thm:gewichtKern

Satz 4.4. Sei Ω eine Menge, $K' : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein SPD Kern und $g : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \setminus \{0\}$ eine Funktion. Dann ist

$$K(x, y) := g(x)K'(x, y)g(y)$$

ein SPD Kern und es gilt für den entsprechenden RKHS:

$$\mathcal{H}_K(\Omega) = g\mathcal{H}_{K'}(\Omega) := \{gf | f \in \mathcal{H}_{K'}(\Omega)\}$$

Beweis. Wir zeigen zunächst, dass $K(x, y)$ ein SPD Kern ist.

Die Symmetrie erhalten wir mit

$$K(x, y) = g(x)K'(x, y)g(y) = g(y)K'(y, x)g(x) = K(y, x).$$

Für die strikte positive Definitheit betrachten wir eine Punktmenge $X_N := \{x_i \in \Omega | 1 \leq i \leq N\} \subset \Omega$. Wir erhalten für die Kernmatrix:

$$\begin{aligned} A_K &= \begin{pmatrix} g(x_1)K'(x_1, x_1)g(x_1) & \cdots & g(x_1)K'(x_1, x_N)g(x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g(x_N)K'(x_N, x_1)g(x_1) & \cdots & g(x_N)K'(x_N, x_N)g(x_N) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} g(x_1) & & \\ & \ddots & \\ & & g(x_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'(x_1, x_1) & \cdots & K'(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K'(x_N, x_1) & \cdots & K'(x_N, x_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g(x_1) & & \\ & \ddots & \\ & & g(x_N) \end{pmatrix} \\ &=: DA_{K'}D \end{aligned}$$

Die Matrix D ist symmetrisch und hat vollen Rang, da $g(x) \neq 0, x \in \Omega$. Daraus folgt für alle $\alpha \neq 0$

$$\alpha^T DA_{K'}D\alpha = (D\alpha)^T A_{K'}(D\alpha) > 0,$$

da $A_{K'}$ positiv definit ist und $D\alpha \neq 0$ aufgrund des vollen Ranges von D . Also ist K ein SPD Kern.

Es fehlt noch der zweite Teil des Satzes. Dafür stellen wir zunächst fest, dass für alle $y \in \Omega$

$$K(\cdot, y) = g(\cdot)K'(\cdot, y)g(y) \in g\mathcal{H}'_K(\Omega).$$

Als nächstes zeigen wir, dass $\mathcal{H}_K(\Omega)$ tatsächlich ein Hilbertraum ist. Sei dafür

$$\begin{aligned} s : \mathcal{H}_{K'}(\Omega) &\rightarrow g\mathcal{H}_{K'}(\Omega) \\ f &\mapsto gf \end{aligned}$$

s ist bijektiv, da $g \neq 0$ ist. Damit können wir auf $\mathcal{H}_K(\Omega)$ ein Skalarprodukt definieren:

$$\begin{aligned} (\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}_K(\Omega)} : \mathcal{H}_K(\Omega) \times \mathcal{H}_K(\Omega) &\rightarrow \mathbb{R} \\ (gf, gh) &\mapsto (s^{-1}(gf), s^{-1}(gh))_{\mathcal{H}_{K'}(\Omega)} = (f, h)_{\mathcal{H}_{K'}(\Omega)} \end{aligned}$$

Damit wird $\mathcal{H}_K(\Omega)$ zu einem Hilbertraum.

Wir zeigen noch die Reproduzierbarkeit auf $\mathcal{H}_K(\Omega)$, dann folgt aus der Eindeutigkeit des Kerns aus Satz 2.7 die Behauptung. Sei dafür $x \in \Omega$ und $h = gf \in \mathcal{H}_K(\Omega)$.

$$\begin{aligned} (h, K(\cdot, x))_{\mathcal{H}_K(\Omega)} &= (gf, gK'(\cdot, x)g(x))_{\mathcal{H}_K(\Omega)} \\ &= g(x) (gf, gK'(\cdot, x))_{\mathcal{H}_K(\Omega)} \\ &= g(x) (f, K'(\cdot, x))_{\mathcal{H}_{K'}(\Omega)} \\ &= g(x)f(x) \\ &= h(x) \end{aligned}$$

□

Hiermit haben wir einen neuen Kern konstruiert, der auf dem Rand unseres Definitionsgebiets konstant Null ist, auf den wir eine analoge Konstruktion zu der aus Kapitel 3.1 anwenden können.

Dafür sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen und beschränkt, L ein Differentialoperator der Ordnung k , $K' \in C^{2k}(\Omega \times \Omega)$ ein SPD Kern, $g \in C^k(\Omega)$ eine Gewichtsfunktion auf Ω und folgende PDE gegeben:

$$\begin{aligned} Lu(x) &= f(x), x \in \Omega \\ u(x) &= 0, x \in \partial\Omega \end{aligned}$$

Für ein $N \in \mathbb{N}$ betrachten wir eine Menge $X_N := \{x_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$. Wir definieren die Menge $\Lambda_N := \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ mit $\lambda_i := \delta_{x_i} \circ L$. Diese Funktionale sind im von

$K(x, y) := g(x)K'(x, y)g(y)$ erzeugten RKHS stetig. Dieser Kern ist nach Satz 4.4 SPD, da $g(x) > 0$ für $x \in \Omega$. Also wählen wir

$$\begin{aligned} V_N &:= \text{span} \{ \lambda_1^y K(x, y), \dots, \lambda_N^y K(x, y) \} \\ &= \text{span} \{ (\delta_{x_1} \circ L)^y (g(x)K'(x, y)g(y)), \dots, (\delta_{x_N} \circ L)^y (g(x)K'(x, y)g(y)) \} \end{aligned}$$

als Ansatzfunktionen. Diese sind auf dem Rand von Ω gleich Null, die Randbedingung der PDE ist also erfüllt.

Damit erhalten wir folgenden Interpolanten:

$$\begin{aligned} s_u(x) &= \sum_{j=1}^N \alpha_j \lambda_j^y K(x, y) \\ &= \sum_{j=1}^N \alpha_j (\delta_{x_j} \circ L)^y (g(x)K'(x, y)g(y)) \end{aligned}$$

Die α_j erhält man als Lösung des LGS $A\alpha = b$ mit

$$\begin{aligned} A_{i,j} &= (\delta_{x_i} \circ L)^x (\delta_{x_j} \circ L)^y (g(x)K'(x, y)g(y)) \\ b_i &= f(x_i) \end{aligned}$$

Die Matrix A ist wieder symmetrisch und positiv definit und das LGS ist damit lösbar.

4.4 Nicht-Symmetrische Kollokation

Wie bei der Standardkollokation können wir einen wesentlich simpleren Ansatz wählen. Es sei die gleiche Problemstellung wie gerade gegeben. Wir wählen

$$V_N := \text{span} \{ g(x)K'(x, x_1), \dots, g(x)K'(x, x_N) \}$$

als Ansatzfunktionen und bekommen damit folgenden Interpolanten:

$$s_u(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j g(x)K'(x, x_j)$$

Die α_j erhält man als Lösung des LGS $A\alpha = b$ mit

$$\begin{aligned} A_{i,j} &= (\delta_{x_i} \circ L)^x(g(x)K(x, x_j)) \\ b_i &= f(x_i) \end{aligned}$$

Erneut kann man keine Aussage über die Lösbarkeit des LGS oder über die numerische Stabilität des Verfahrens treffen.

Implementierung

ementierung

In diesem Kapitel möchten wir uns die Implementierung der bisher theoretisch hergeleiteten Verfahren anschauen.

Dazu müssen wir zunächst einen geeigneten Kern wählen. Beispielsweise wäre der Gauß Kern aus Beispiel 2.5 aufgrund seiner unendlichen Differenzierbarkeit geeignet, wohingegen das Skalarprodukt für die meisten Fälle ungeeignet wäre, da bereits alle partiellen Ableitungen der Ordnung 2 (angewandt auf x oder y) konstant Null sind. Wir erinnern uns auch, dass die Kerne einen Parameter γ besitzen, welchen wir zur Parameterwahl benutzen können. In Abbildung 5.1 ist der Gauß Kern $K(x, y) = \exp(-\gamma\|x - y\|^2)$ mit $y = 0$ und verschiedenen γ Werten geplottet. Wir wählen eine endliche Menge an möglichen γ Werten und iterieren über diese. Für jedes γ erstellen wir eine Lösung und suchen mit einem geeigneten Fehlerschätzer die beste heraus.

So erhält man nach Wahl von Kollokationspunkten X und Validationspunkten $XVal$ den Algorithmus 1.

Einige Anmerkungen zu dem Algorithmus:

- Kollokationspunkte sind die Punkte, die wir bereits aus der theoretischen Herleitung kennen. Also die Punkte, an denen wir die Interpolation durchführen.
- Validationspunkte sind die Punkte, an denen wir zur Parameterwahl den Fehler der aktuellen Lösung in einer Iteration bestimmen.

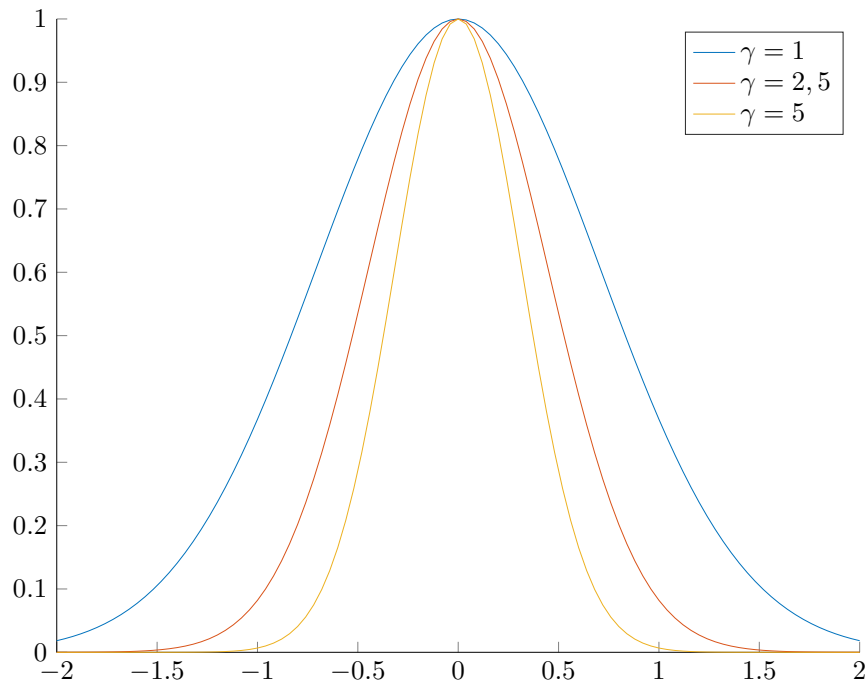


fig:Kerne

Abbildung 5.1: Plots verschiedener Kerne

Wir werden später zur Bestimmung der Güte unserer endgültigen Lösung noch eine Menge an Testpunkten brauchen, an denen wir dann den Fehler berechnen.

- f und g bezeichnen die rechte Seite der zu lösenden PDE.
- Der Algorithmus funktioniert so für die Standard und für die gewichtete Kollokation. Angepasst werden müssen nur die Unterfunktionen zum Aufstellen der rechten Seite und der Kollokationsmatrix.

Es ist noch offen wie wir die Kollokations-, Validations-, und Testpunkte und den Fehler in jeder Iteration bestimmen. Zuerst betrachten wir Letzteres. Dafür möchten wir zwei Möglichkeiten vorstellen:

- Falls wir eine analytisch bestimmte Lösung der PDE haben sollten, können wir diese mit der approximierten vergleichen. Sei dazu u die analytische Lösung und s_u die approximierte. Den Fehler erhalten wir dann mit

$$\text{error} = \max_{x \in X_{Val}} (|u(x) - s_u(x)|)$$

Algorithm 1 Grundlegender Algorithmus

```

1: function SOLVEPDE( $X, XVal, f, g$ )
2:    $b \leftarrow \text{RIGHTHANDSIDE}(X, f, g)$ 
3:    $\text{gamma} \leftarrow \text{list of parameters}$ 
4:    $\text{minError} \leftarrow \infty$ 
5:   for  $i$  in  $\text{gamma}$  do
6:      $A \leftarrow \text{COLLOCATIONMATRIX}(X, i)$ 
7:      $\alpha \leftarrow A \backslash b$ 
8:      $\text{error} \leftarrow \text{CALCULATEERROR}(X, XVal, f, i)$ 
9:     if  $\text{error} < \text{minError}$  then
10:        $\text{retVal} \leftarrow \alpha$ 
11:        $\text{minError} \leftarrow \text{error}$ 
12:     end if
13:   end for
14:   return  $\text{retVal}$ 
15: end function

```

- Eine analytische Lösung werden wir jedoch meist nicht besitzen und können die erste Methode somit nicht anwenden. Wir haben aber noch die Möglichkeit den Fehler in einem Residuum zu betrachten. Sei dafür L der Differentialoperator aus der PDE, f die rechte Seite in PDE und s_u die approximierte Lösung. Den Fehler erhalten wir dann mit

$$\text{error} = \max_{x \in XVal} (|f(x) - Ls_u(x)|)$$

Ls_u lässt sich aufgrund der Linearität des Differentialoperators leicht berechnen. So kann man ausnutzen, dass s_u eine Linearkombination aus den einzelnen Basisfunktionen ist, und L auf die einzelnen Summanden anwenden.

Kommen wir zur Bestimmung der Kollokationspunkte. Auch hier möchten wir mehrere Möglichkeiten vorstellen.

- Die Kollokationspunkte können als Gitter über das Definitionsgebiet gelegt werden.
- Die Kollokationspunkte können zufällig gewählt werden.
- Eine Greedy-Punktwahl ist auch möglich. Dafür berechnet man zunächst eine Lösung aus den aktuell gegebenen Punkten. Auf diese Lösung kann man einen der beiden gerade vorgestellten Fehlerschätzer mit der Testpunktmenge anstatt der Validationspunktmenge anwenden. An die Stelle, an der der maximale Fehler an-

genommen wird, wird der neue Kollokationspunkt gesetzt. Dieses Verfahren kann dann wiederholt werden.

Die Validationspunkte können, wie die Kollokationspunkte, zufällig gewählt werden, oder in einem Gitter über das Definitionsgebiet gelegt werden.

Die Testpunkte legt man am einfachsten in einem engen Gitter über das Definitionsgebiet, um eine genaue Auswertung der Funktion zu gewährleisten.

Numerische Tests

rischeTests

In diesem Kapitel möchten wir die vorgestellten Verfahren verschiedenen numerischen Tests unterziehen. Dabei wollen wir hauptsächlich den Fehler der numerischen Lösung zur analytischen untersuchen, aber auch die Kondition der Kollokationsmatrizen, die Parameterwahl und die Laufzeit betrachten. Außerdem wollen wir die Verfahren mit der finiten Elemente Methode (FEM) vergleichen.

Dafür betrachten wir die Poisson Gleichung auf zwei verschiedenen Gebieten und mit zwei verschiedenen rechten Seiten.

1. Sei $\Omega := (-1, 1) \times (-1, 1) \subset \mathbb{R}^2$ und folgende PDE gegeben:

$$\begin{aligned} -\Delta u &= 2\pi^2 \sin(\pi x) \sin(\pi y) & (x, y) \in \Omega^\circ \\ u &= 0 & (x, y) \in \partial\Omega \end{aligned}$$

Sie hat die analytische Lösung

$$u(x, y) = \sin(\pi x) \sin(\pi y),$$

dargestellt in Abbildung 6.1. Wir wählen als Gewichtsfunktion w für Ω die Funktion aus Beispiel 4.3:

$$w(x, y) = -x^2 - y^2 + 2 - \sqrt{x^4 - 2x^2 + y^4 - 2y^2 + 2}.$$

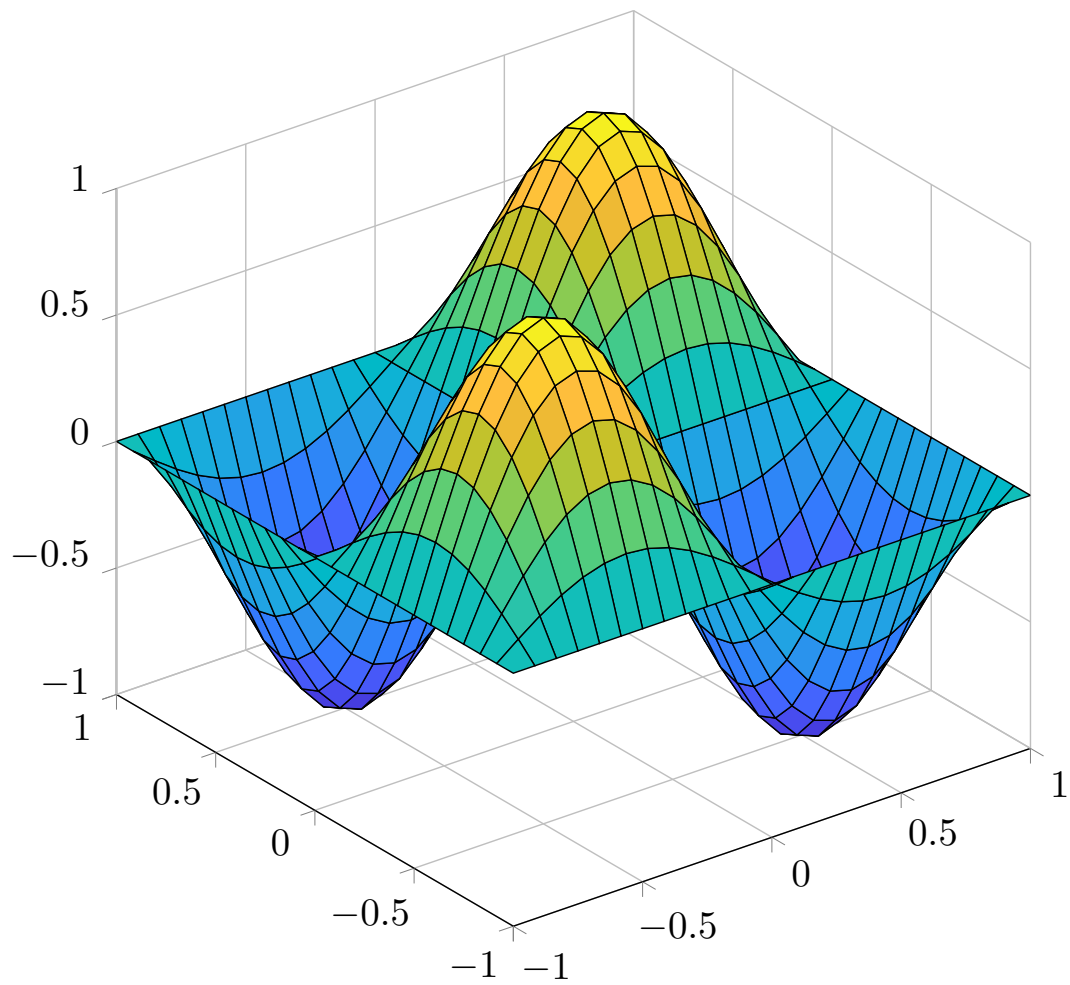
`fig:pde1sol`

Abbildung 6.1: Lösung der ersten PDE

2. Sei $\Omega := B_1(0) = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid \|x\|_2 < 1\} \subset \mathbb{R}^2$ und folgende PDE gegeben:

$$\begin{aligned} -\Delta u &= -\exp(-x^2 - y^2)(-4 + 4(x^2 + y^2)) & (x, y) \in \Omega \\ u &= 0 & (x, y) \in \partial\Omega \end{aligned}$$

Sie hat die analytische Lösung

$$u(x, y) = \exp(-x^2 - y^2) - \frac{1}{e},$$

dargestellt in Abbildung 6.2. Wir wählen als Gewichtsfunktion:

$$w(x, y) = 1 - x^2 - y^2$$

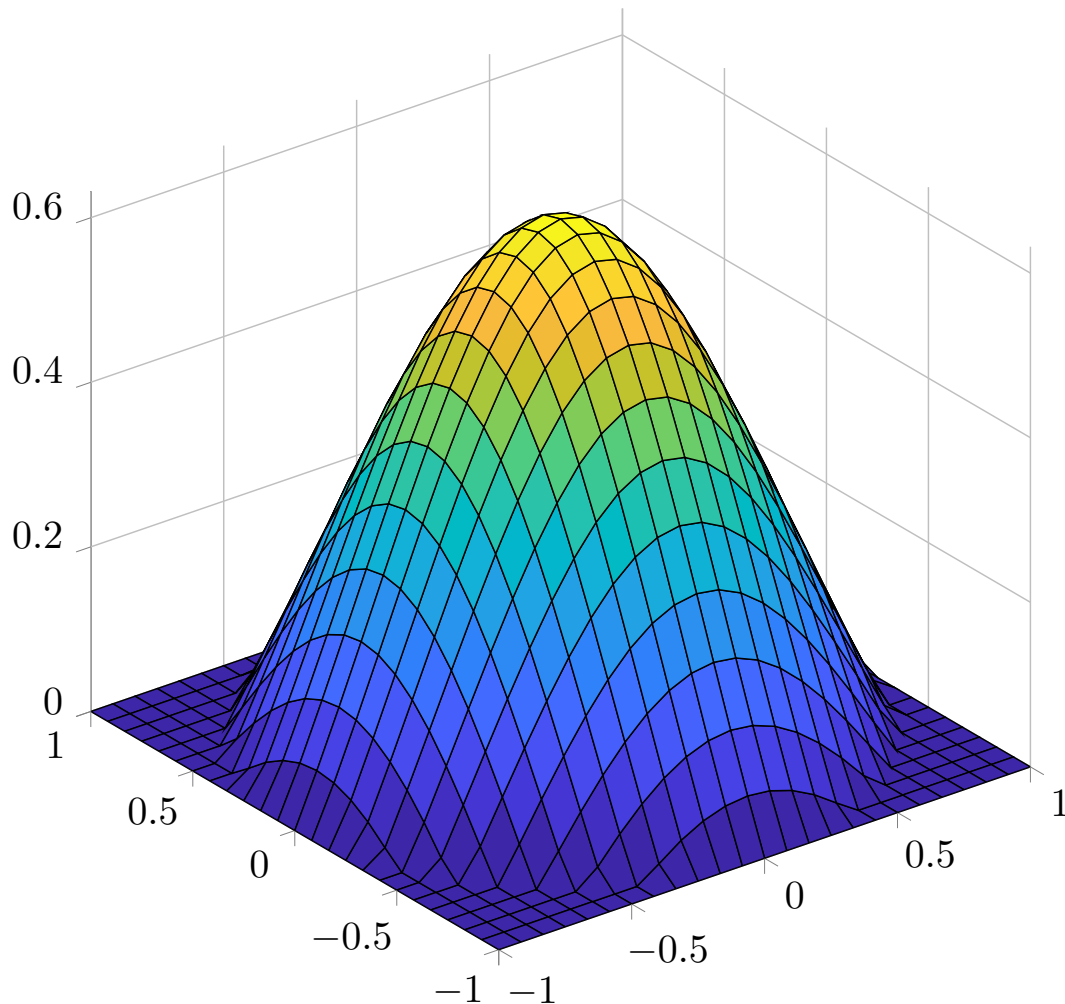


fig:pde2sol

Abbildung 6.2: Lösung der zweiten PDE

Die Poisson-Gleichung werden wir mithilfe der Kernkollokation numerisch lösen. Dafür wählen wir den Gauß Kern aus Beispiel 2.5. Im Anhang (Abbildung 8.1, 8.2) findet man die den hier nachfolgenden Fehlerplots entsprechenden Plots für den Wendland Kern. Dieser hat aufgrund numerischer Ungenauigkeiten entweder schlechtere oder komplett unbrauchbare Ergebnisse geliefert, weswegen wir ihn nicht genauer betrachten werden.

Ebenso werden wir den absoluten Fehlerschätzer, wie in Kapitel 5 vorgestellt, als Methode zur Fehlerberechnung in jeder Iteration nicht betrachten, sondern nur die im Residuum. Auch hierfür findet man im Anhang (Abbildung 8.3, 8.4) die entsprechenden Plots. Diese weisen allerdings keinen nennenswerten Unterschied zu dem Fehlerschätzer im Residuum auf.

6.1 Fehler

Als Maß des Fehlers unserer numerischen Lösung wollen wir den maximalen absoluten Fehler zur analytischen Lösung berechnen, also

$$\text{error} = \max_{x \in \Omega} |u(x) - s_u(x)|,$$

wobei s_u die numerische Lösung bezeichnet. Um den Fehler näherungsweise zu bestimmen, legen wir ein eng gewähltes Gitter an Testpunkten über Ω und bestimmen ihn an diesen Punkten.

6.1.1 Fehler im Inneren

Wir werden die drei in Kapitel 5 vorgestellten Methoden zur Kollokationspunktwahl testen und miteinander vergleichen.

6.1.1.1 Kollokationspunkte als Gitter

Wir werden die Kollokationspunkte, so wie die Validationspunkte, zunächst, wie in Abbildung 6.3 gezeigt, in einem Gitter anordnen.

Damit können wir uns anschauen, wie sich der Fehler bei Verfeinerung des Gitters verhält. Dieser ist in Abbildung 6.4 für die vier verschiedenen Verfahren und beide PDEs dargestellt.

Wir stellen als erstes fest, dass alle Verfahren vernünftige Ergebnisse liefern und gegen die analytische Lösung konvergieren. Unsere theoretische Herleitung war demnach also sinnvoll. Wir sehen aber deutliche Unterschiede zwischen den beiden PDEs.

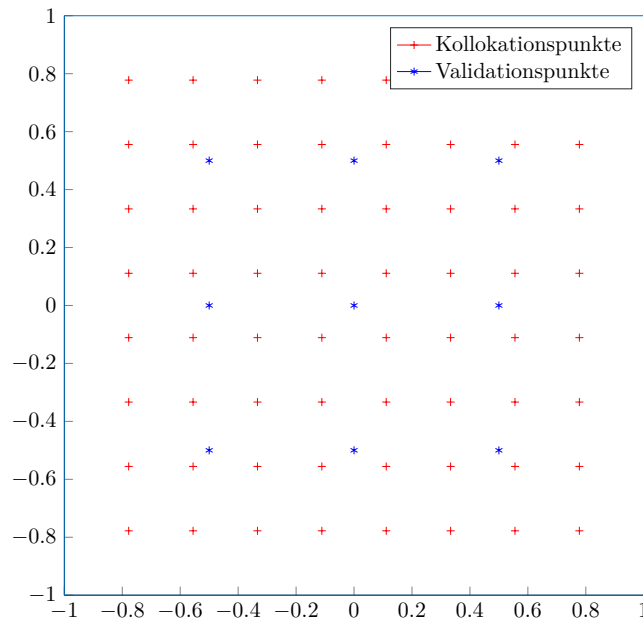


Abbildung 6.3: Kollokations- und Validationspunkte

fig:Kollok

Für die erste PDE liefern die Standardverfahren bereits mit nahezu 200 Kollokationspunkten ihre besten Ergebnisse mit einem Testfehler in der Größenordnung von 10^{-6} für das nicht-symmetrische Verfahren und 10^{-7} für das symmetrische und verbessern sich danach nicht mehr. Im Gegensatz dazu stehen die gewichteten Verfahren, die am Anfang bei weitem nicht so gute Ergebnisse von rund einem Testfehler von 10^{-2} liefern, sich dann aber mit mehr Kollokationspunkten noch leicht verbessern. Gesamt erreichen die gewichteten Verfahren aber selbst mit 4500 Kollokationspunkten nicht die Genauigkeit der Standardverfahren. Im Vergleich der symmetrischen und nicht-symmetrischen Verfahren schneidet beim Standardverfahren das symmetrische leicht besser ab, beim gewichteten ist kein Unterschied erkennbar.

Ein Grund für das schlechtere Abschneiden der gewichteten Verfahren wird erkennbar, wenn man sich anschaut, wo der große Fehler angenommen wird. In Abbildung 6.5 ist der Testfehler des gewichteten nicht-symmetrischen Verfahrens mit 529 Kollokationspunkten auf dem Gebiet Ω dargestellt.

Man erkennt große Fehler in den Ecken des Gebietes. Diese kommen aus der Ge-

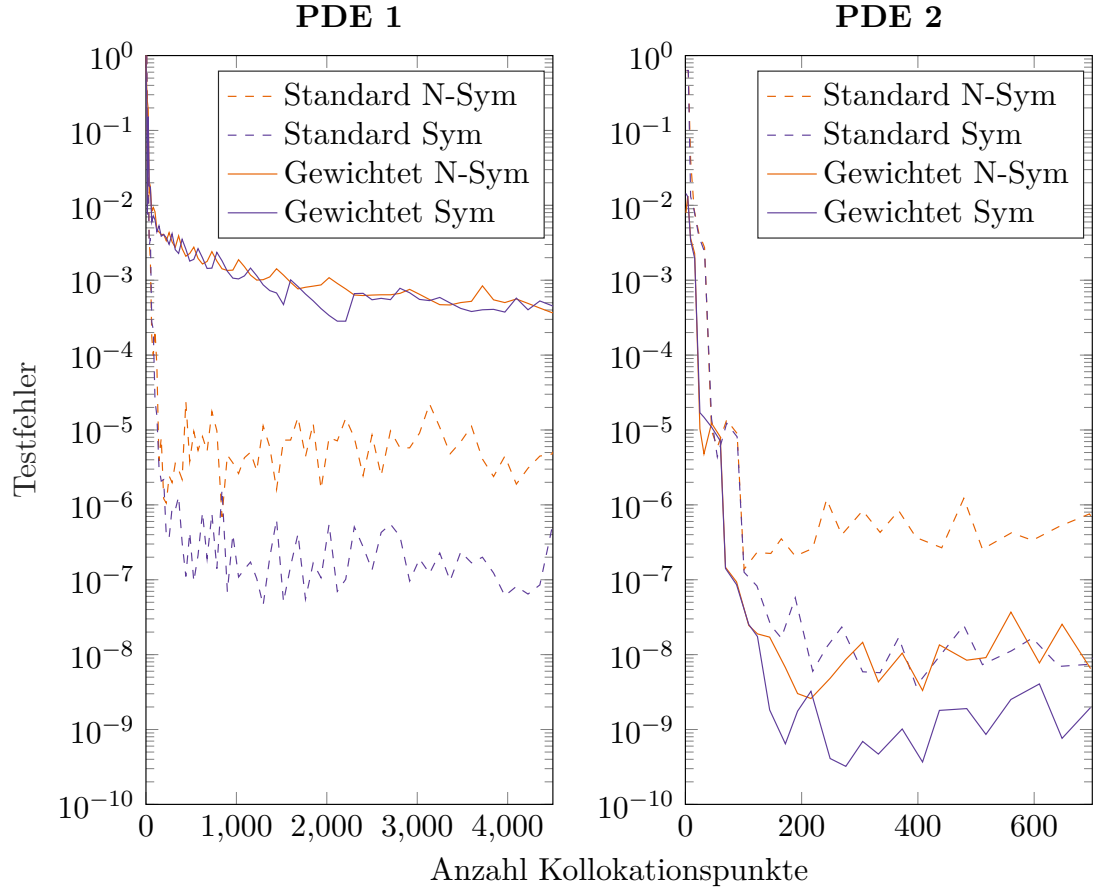


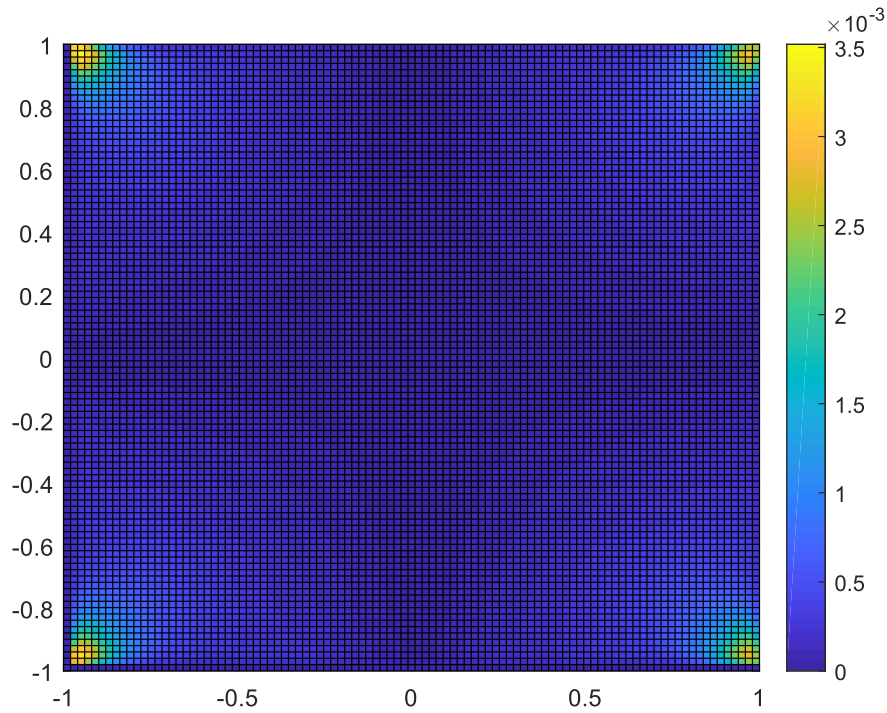
Abbildung 6.4: Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter

g:error-grid-both

wichtsfunktion. Wendet man nämlich den Differentialoperator der PDE auf diese an, erhält man:

$$-\Delta w(x, y) = \frac{2(x^6 + 3x^4y^2 - 4x^4 + 3x^2y^4 - 12x^2y^2 + 8x^2 + 2(x^4 - 2x^2 + y^4 - 2y^2 + 2)^{\frac{3}{2}} + y^6 - 4y^4 + 8y^2 - 4)}{(x^4 - 2x^2 + y^4 - 2y^2 + 2)^{\frac{3}{2}}}$$

Diese Funktion hat Singularitäten in den Ecken von Ω , wie in Abbildung 6.6 dargestellt. Sie kommt im Falle der nicht-symmetrischen Kollokation bei der Erstellung der Kollokationsmatrix vor, im symmetrischen Fall ist sie sogar Teil der Ansatzfunktionen. Als

Abbildung 6.5: Testfehler auf Ω

g:Vergleich

weiteres Indiz für die Ursache des Fehlers betrachten wir die zweite PDE. In dem Fall ist der negative Laplace der Gewichtsfunktion gegeben durch

$$-\Delta w(x, y) = 4$$

und hat damit keine Singularitäten.

Tatsächlich erhalten wir, wenn wir den Testfehler der zweiten PDE in Abbildung 6.4 betrachten, ein komplett anderes Bild. Alle Verfahren erreichen mit 200 Kollokationspunkten ihre besten Ergebnisse. Die gewichteten Verfahren erreichen dieses Mal einen Testfehler von 10^{-8} und 10^{-9} für das nicht-symmetrische beziehungsweise symmetrische Verfahren und sind damit besser als die Standardverfahren, welche nur einen Testfehler von 10^{-7} und 10^{-8} für das nicht-symmetrische beziehungsweise symmetrische Verfahren erreichen. Demnach sollten wir bei der Wahl der Gewichtsfunktionen darauf achten, dass in diesen und deren partiellen Ableitungen keine Singularitäten entstehen.

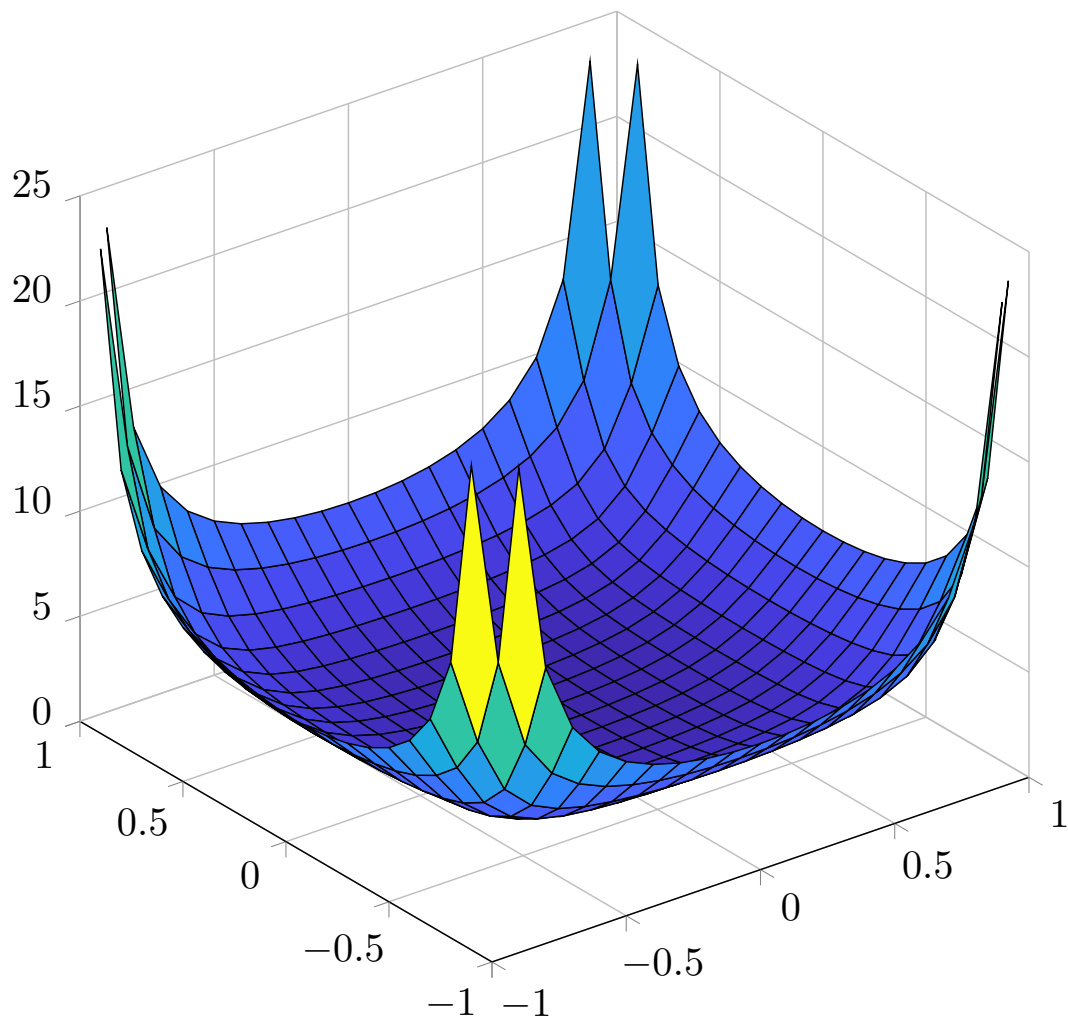


fig:Gewicht

Abbildung 6.6: Negativer Laplace der Gewichtsfunktion

6.1.1.2 Zufällige Kollokationspunkte

Als nächstes schauen wir uns zufällig verteilte Kollokationspunkte an. In Abbildung 6.7 ist der Fehler bei unterschiedlich vielen zufällig verteilten Kollokationspunkten für beide PDEs dargestellt.

Auch hier stellt man fest, dass alle Verfahren vernünftige Ergebnisse liefern. Vergleicht man die Fehler mit denen der Gitterpunktwahl, sieht man, dass sich diese für beide PDEs in der gleichen Größenordnung bewegen. Allerdings weisen die Kurven der zufällig gewählten Punkte größere Schwankungen auf. Diese sind auf eine zufällig schlechte

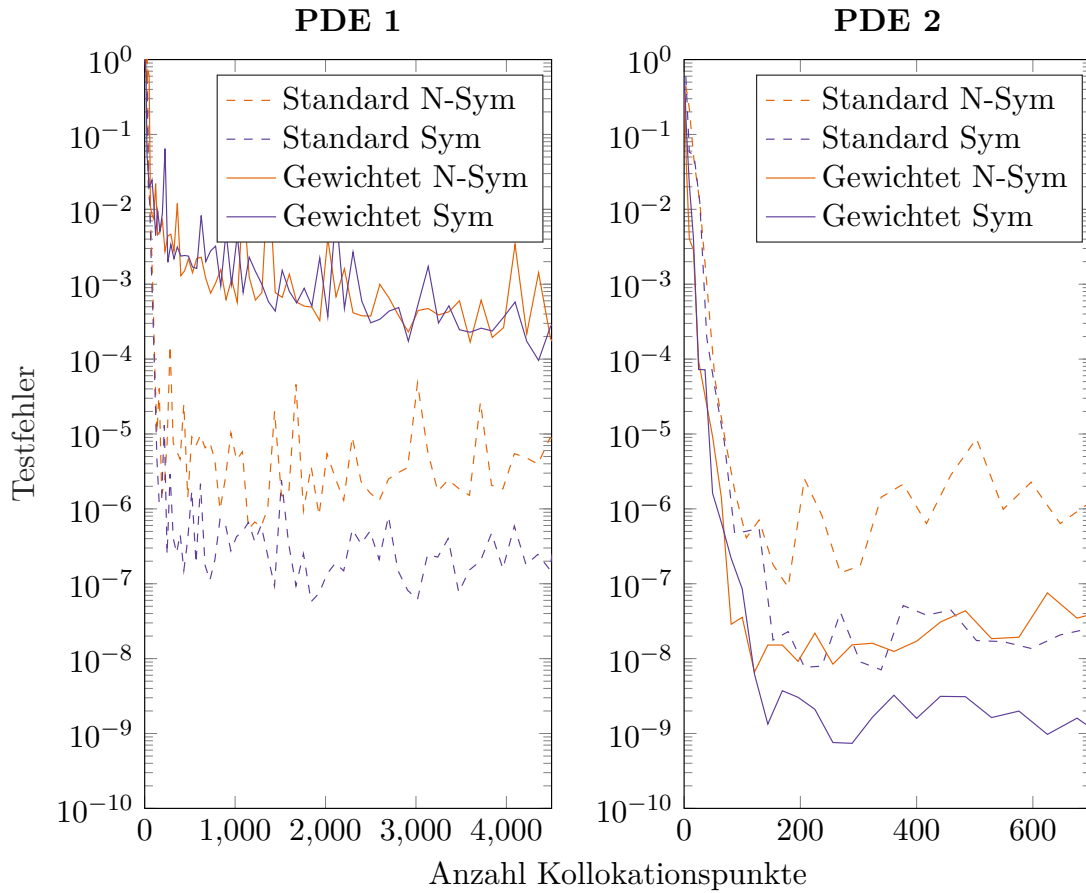


Abbildung 6.7: Testfehler bei zufällig verteilten Kollokationspunkten

Punktwahl zurückzuführen. Die zufälligen Punkte sind aber nie wesentlich besser als die Gitterpunkte. Von daher lässt sich in niedrigen Dimensionen kein Vorteil für zufällig gewählte Kollokationspunkte feststellen. In höheren Dimensionen ist es aufgrund der hohen Punktzahl allerdings nahezu unmöglich ein Gitter über das Gebiet zu legen. Dort kann man dann davon ausgehen, mit den zufällig gewählten Punkten vernünftige Ergebnisse zu erhalten.

6.1.1.3 Greedy-Punktwahl

Zuletzt schauen wir uns in Abbildung 6.8 den Testfehler bei Kollokationspunkten, die durch eine Greedy-Punktwahl gesetzt wurden, an. Es ist zu beachten, dass bei der benutzten Implementierung bei den Standardverfahren auf dem Rand festgesetzte Kollo-

kationspunkte benutzt werden. Deswegen beginnen die Graphen der Standardverfahren nicht bei 0 Kollokationspunkten.

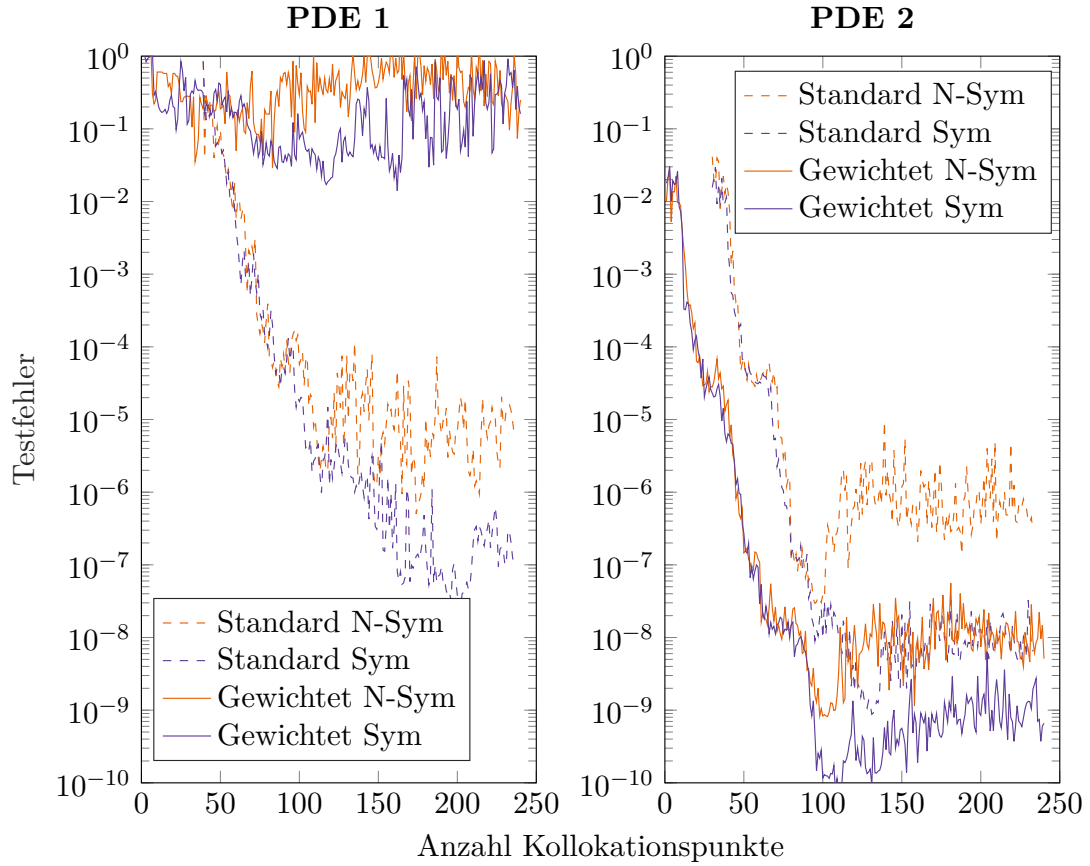


Abbildung 6.8: Fehler beim Greedy-Verfahren

Wir erkennen, dass für die erste PDE nur die Standardverfahren vernünftige Ergebnisse liefern. Diese pendeln sich nach ungefähr 110 Kollokationspunkten für das nicht-symmetrische Verfahren bei einem Testfehler von rund 10^{-5} und nach ungefähr 160 Iterationen für das symmetrische bei einem Testfehler von rund 10^{-7} ein. Damit benötigt die Greedy-Punktwahl jeweils 80 beziehungsweise 320 Kollokationspunkte weniger, um das gleiche Ergebnis wie die Gitterpunktwahl zu erzielen.

Die gewichteten Verfahren hingegen geben uns beide keine vernünftigen Ergebnisse. Ein Grund dafür wird erkennbar, wenn man sich anschaut, wo die Kollokationspunkte hingelegt werden. Dies ist in Abbildung 6.9 dargestellt.

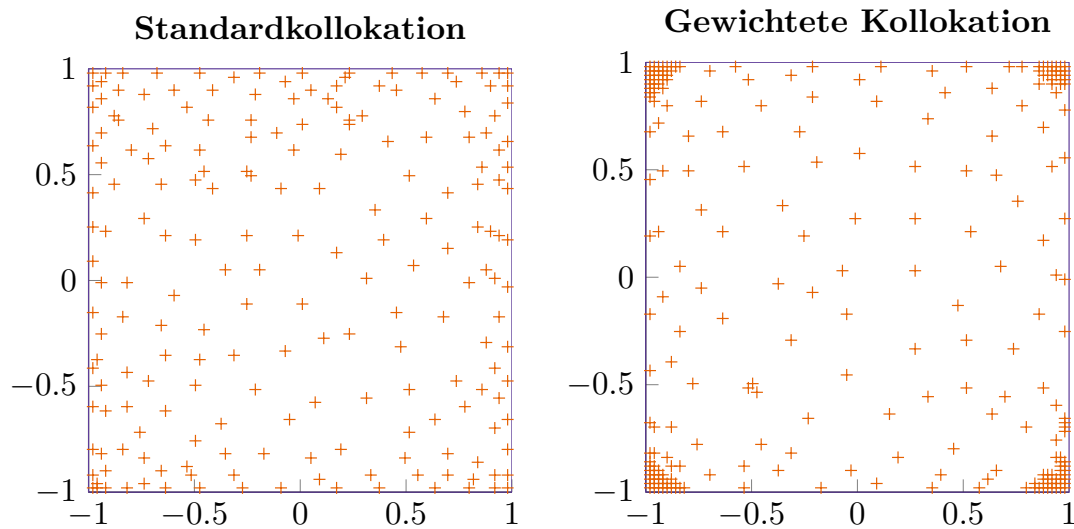


Abbildung 6.9: Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 1

Greedy-points

Man erkennt, dass die Kollokationspunkte im Falle der Standardkollokation gleichmäßig über das Einheitsquadrat verteilt sind, sich im gewichteten Fall allerdings in den Ecken drängen. Dies kann, wie schon der größere Testfehler der gewichteten Verfahren bei den Gitterpunkten, mit den Singularitäten in den partiellen Ableitungen begründet werden. Hier versucht das Verfahren allerdings diesen Fehler zu korrigieren, indem es die Kollokationspunkte in die Ecken legt. Dies führt aber zu einer in Abbildung 6.10 erkennbaren numerisch verrauschten Lösung.

Wieder erhalten wir ein komplett anderes Bild, wenn wir die zweite PDE betrachten. Insbesondere liefern hier die gewichteten Verfahren vernünftige Ergebnisse. Dies lässt sich auf eine gleichmäßige Verteilung der Kollokationspunkte, erkennbar in Abbildung 6.11, zurückführen, da keine partielle Ableitung der Gewichtsfunktion Singularitäten aufweist. Alle Verfahren erreichen nach rund 100 Kollokationspunkten ihre höchste Genauigkeit, die sich in der Größenordnung der Gitterpunkte bewegt. Allerdings werden meist deutlich weniger Kollokationspunkte für die gleiche Genauigkeit benötigt, rund 100 bei dem symmetrischen Standardverfahren, 120 beim gewichteten nicht-symmetrischen und 70 beim gewichteten symmetrischen.

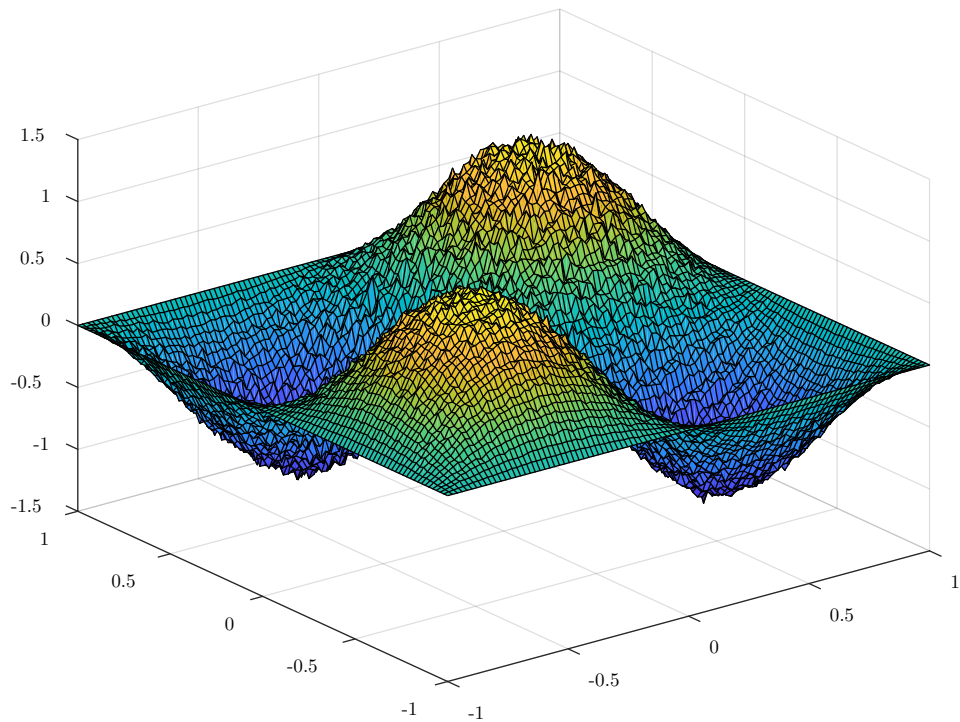


Abbildung 6.10: Lösung der PDE 1 bei gewichtetem Greedy-Verfahren

greedy-verrauscht

6.1.2 Fehler bei einer anderen Gewichtsfunktion

sec:andereGewicht

Wir haben gesehen, dass die gewichteten Verfahren bei der ersten PDE vergleichsweise keine guten Ergebnisse liefern. Dies haben wir auf die Gewichtsfunktion zurückgeführt, was nahelegt es mit einer anderen zu versuchen, die keine Singularitäten in den Ecken aufweist. Dafür setzen wir:

$$w(x, y) := \sin\left(\frac{\pi}{2}(x+1)\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}(y+1)\right)$$

Dies ist keine Gewichtsfunktion im Sinne von 4.1, da die Funktion außerhalb von Ω nicht überall kleiner als Null ist. Allerdings sind die Bedingungen in einer Umgebung von Ω erfüllt. Führen wir mit dieser Funktion die gewichteten Verfahren durch, erhalten wir in Abbildung 6.12 folgenden Fehlerplot:

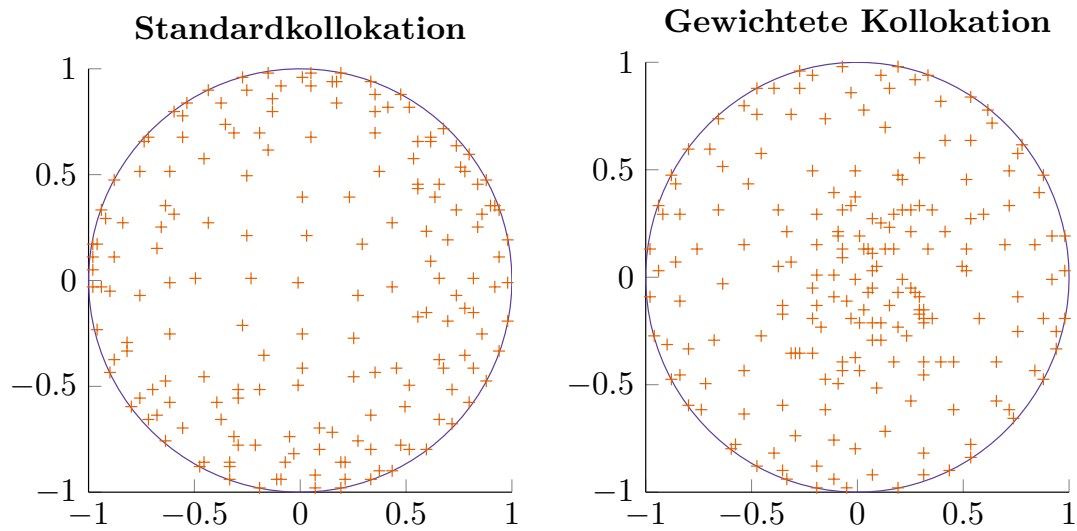


Abbildung 6.11: Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 2

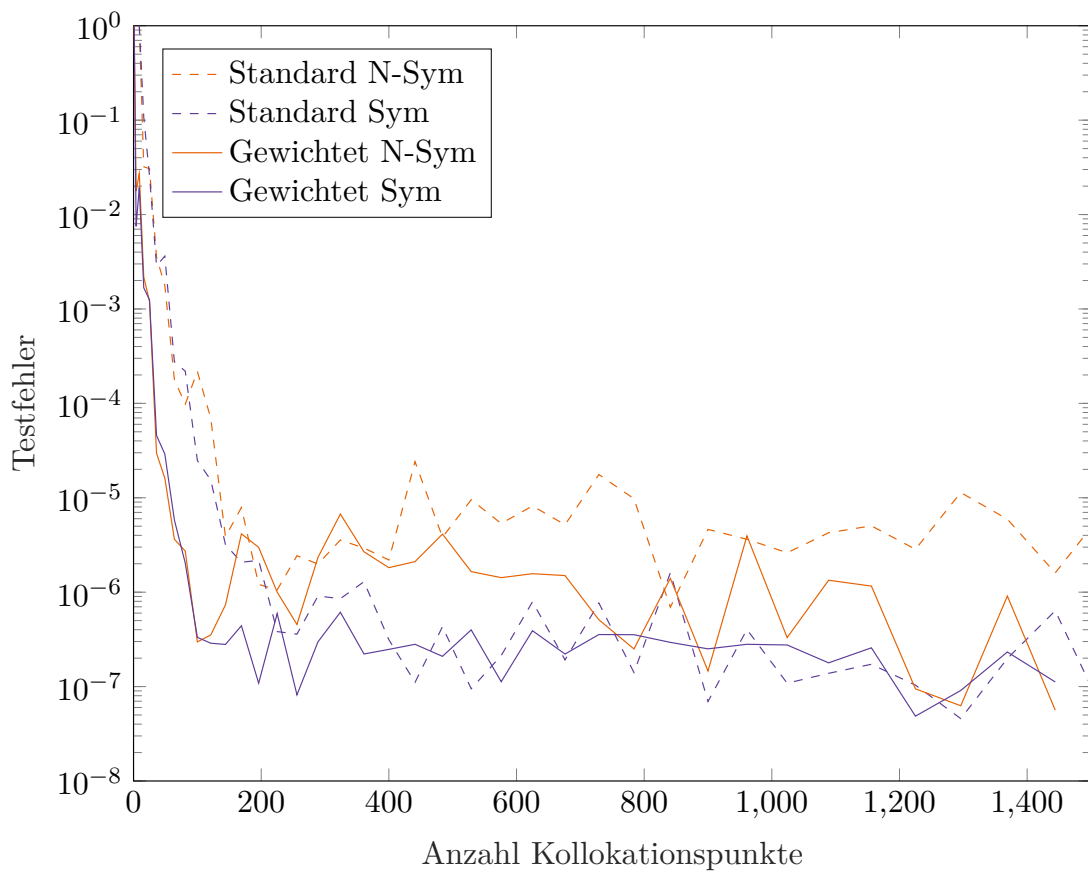


Abbildung 6.12: Testfehler der ersten PDE bei anderer Gewichtsfunktion

Die Kollokationspunkte sind hier wieder auf einem Gitter gewählt. Zum Vergleich sind auch die Testfehler der Standardkollokation nochmal dargestellt. Wir erkennen, dass die gewichtete Kollokation jetzt sehr ähnliche Ergebnisse zur Standardkollokation liefert. Es kann also manchmal hilfreich sein, den theoretisch richtigen Ansatz zu ignorieren und eine Funktion zu wählen, die die Bedingungen an eine Gewichtsfunktion nur lokal erfüllt.

6.1.3 Fehler auf dem Rand

Wir werden nun überprüfen, ob die gewichtete Kollokation auch ihren zweiten Sinn erfüllt, das heißt ob die Lösung auf dem Rand auch wirklich Null ist. Dafür plotten wir eine mit dem Standardverfahren und eine mit dem gewichteten Verfahren erstellte Lösung der ersten PDE in Abbildung 6.13 über einen Teil des Randes.

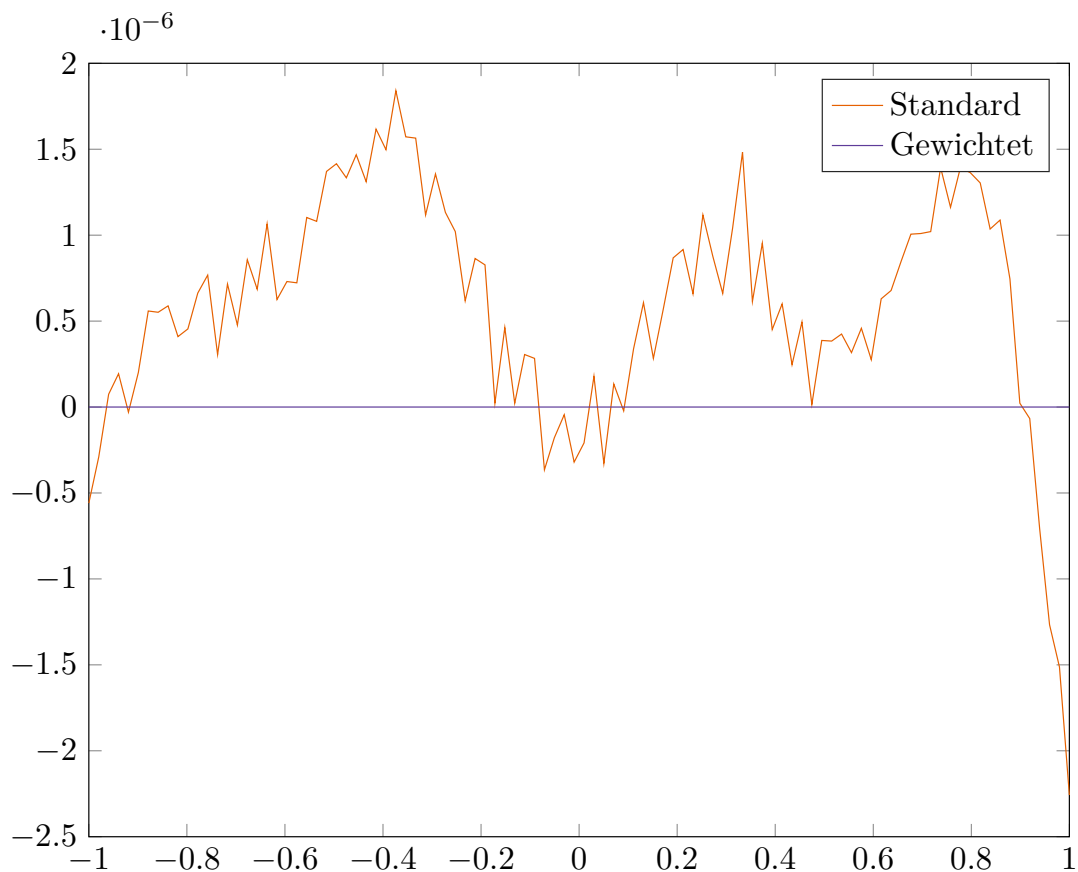


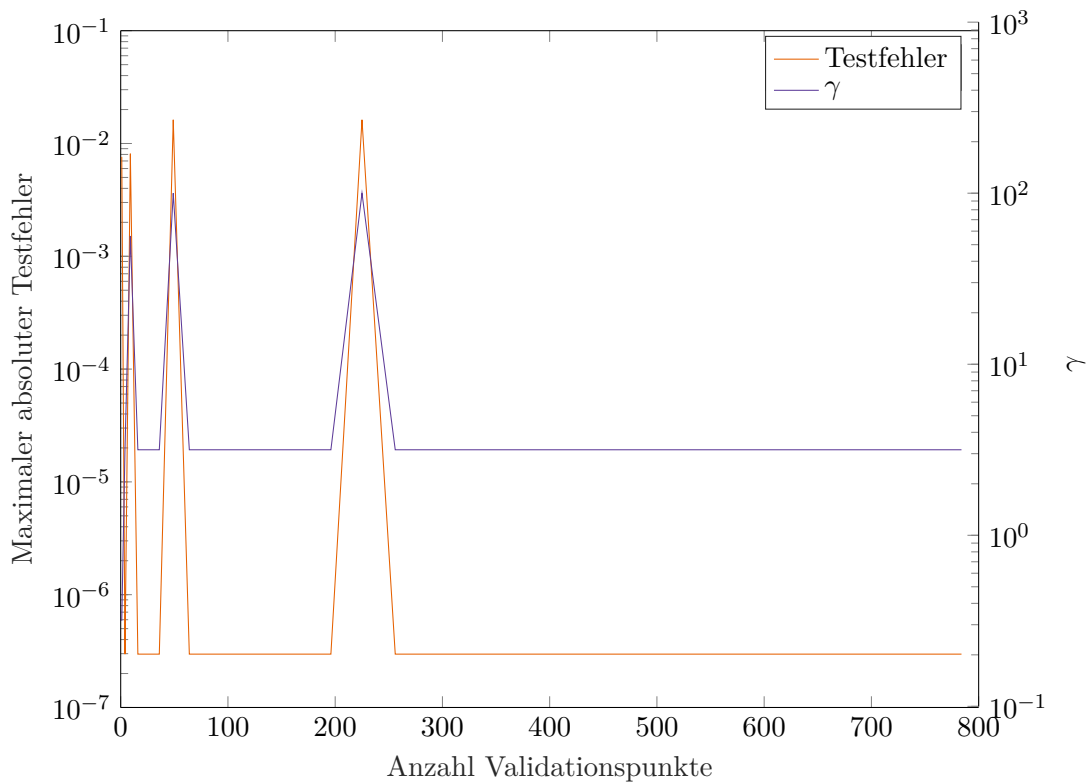
Fig:rand-vergleich

Abbildung 6.13: Plot über den Rand

Bei der Standardkollokation sind deutlich Schwankungen über den Rand erkennbar, wohingegen der Rand bei der gewichteten Kollokation tatsächlich Null ist. Das Ziel der gewichteten Kollokation wurde also erreicht.

6.1.4 Validationspunkte

Wir sind bisher nur auf die Wahl der Kollokationspunkte eingegangen, aber noch nicht auf die der Validationspunkte. Dafür stellen wir den Testfehler des nicht-symmetrischen Standardverfahrens und die gewählten γ -Werte unserer numerischen Lösung der ersten PDE in Abbildung 6.14 bei gleichbleibenden Kollokationspunkten, aber bei unterschiedlichen Anzahlen von Validationspunkten dar. Beide sind auch hier wieder in einem Gitter angeordnet. Wir erkennen, dass der Fehler bis auf wenige Ausreißer konstant bleibt.



□

testpunkte

Abbildung 6.14: Fehler und γ -Werte bei unterschiedlicher Anzahl an Validationspunkten

Demnach spielt die Wahl der Validationspunkte keine zu große Rolle. Die großen Fehler entstehen genau dann, wenn alle Validationspunkte mit den Kollokationspunkten zusam-

menfallen. Den dann auftretenden Effekt nennt man Überanpassung. Die Lösung wird dabei zu gut an die Kollokationspunkte angepasst und verliert dabei an Genauigkeit, wenn alle Testpunkte betrachtet werden. Dabei stellt man fest, dass genau dann, wenn ein großer Fehler auftritt auch ein großes γ gewählt wird. Wir erinnern uns an Abbildung 5.1, dass ein großes γ einem schmalen „Hütchen“ der Kernfunktion entspricht. Das kann man so interpretieren, dass, wenn Validations- und Kollokationspunkte zusammenfallen, die Ansatzfunktionen so gewählt werden, dass sie, wenn möglich, nur „Einfluss“ auf einen Validationspunkt nehmen. Erkennbar ist dies in Abbildung 6.15. So entsteht eine

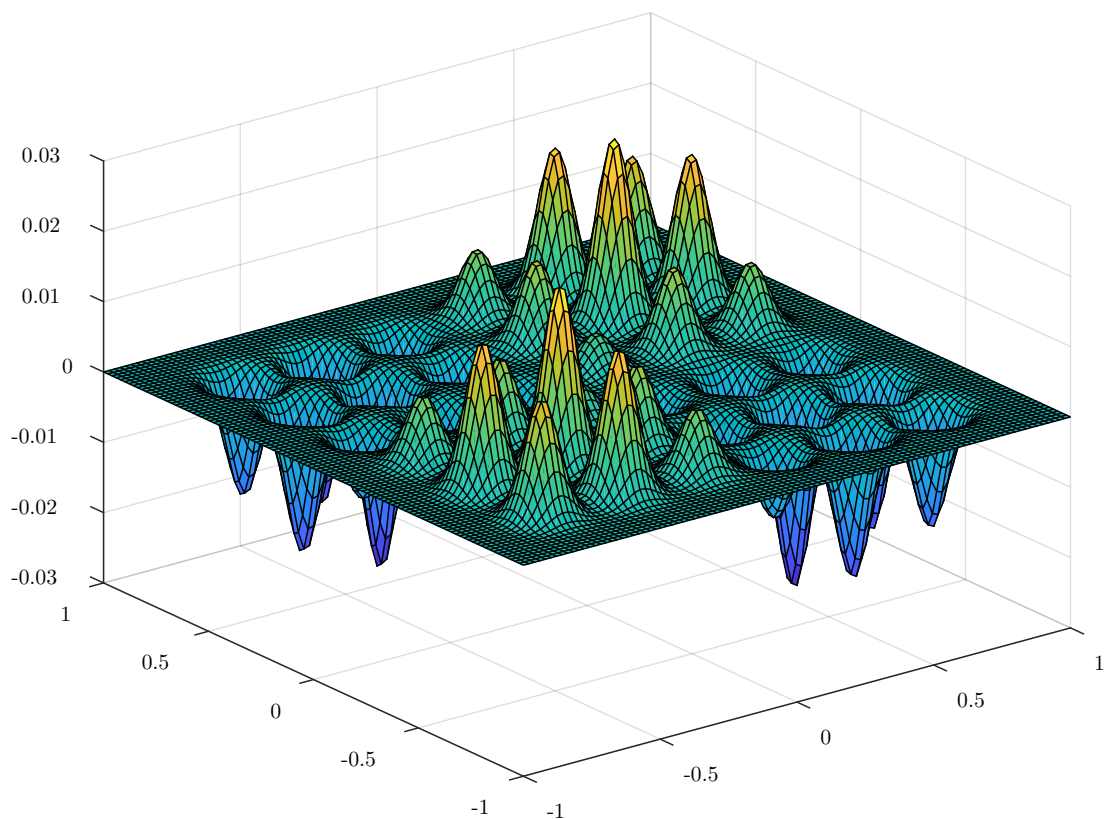


fig:overfitting

Abbildung 6.15: Lösung bei Überanpassung

Lösung, die an den Testpunkten extrem gut angepasst ist, ansonsten der echten Lösung aber kaum ähnlich sieht.

6.2 Parameterwahl und Kondition

Wir werden in Abbildung 6.16 zunächst betrachten, wie sich der gewählte Parameter γ bei unterschiedlich vielen Kollokationspunkten verhält. Dafür betrachten wir diese aufgrund der gleichmäßigen Verringerung der Abstände auf einem Gitter verteilt.

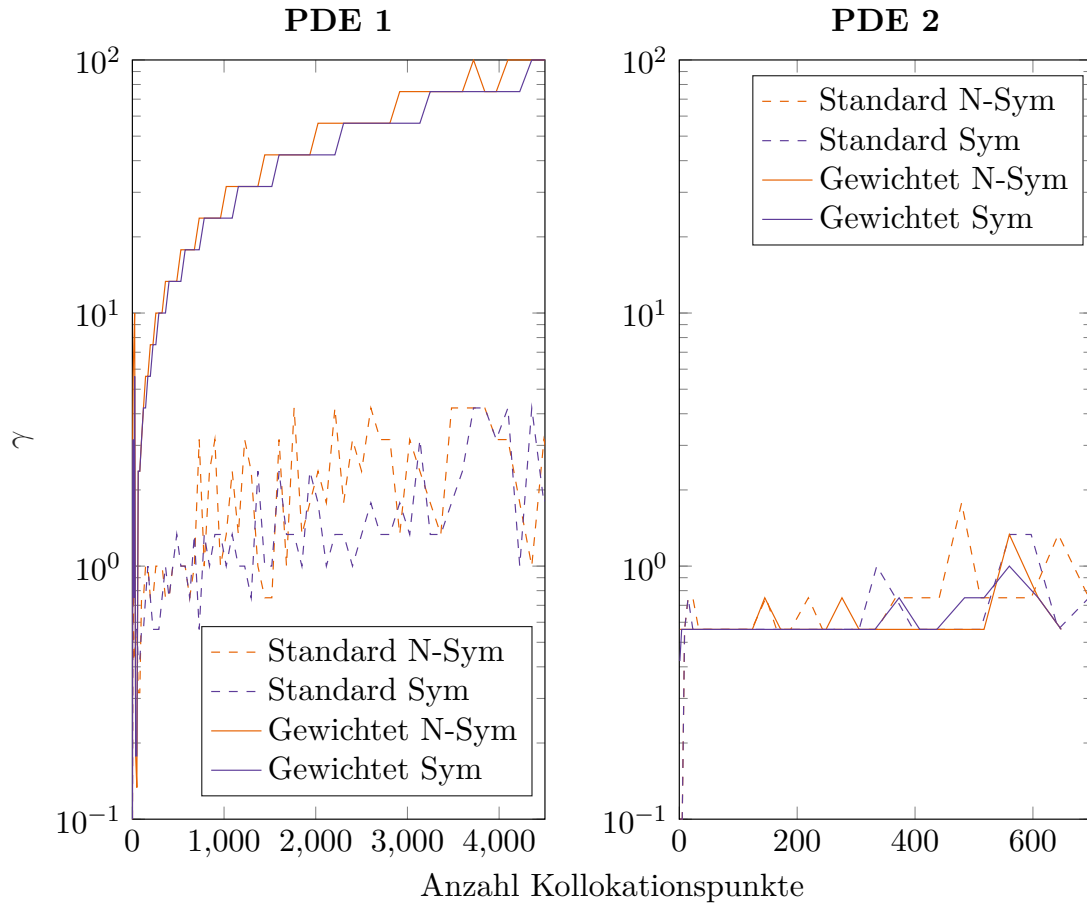


Abbildung 6.16: Gewählter Parameter γ

Wir erkennen, dass die Verfahren, die ihren besten Testfehler in Abbildung 6.4 bereits erreicht haben, ihren γ -Wert kaum mehr verändern. Es stechen nur die beiden gewichteten Verfahren bei der ersten PDE heraus, da sich hier der verwendete Parameter γ mit steigender Anzahl der Kollokationspunkte vergrößert. Das waren genau die Verfahren, die ihren Fehler mit steigender Anzahl der Kollokationspunkte noch verbessert haben. Das größere γ resultiert in einem engeren „Hütchen“ des Kerns, was zu den enger liegenden Kollokationspunkten passt.

In Abbildung 6.17 ist bei gleichbleibenden Kollokationspunkten der Testfehler beider PDEs bei unterschiedlichen Parametern γ dargestellt.

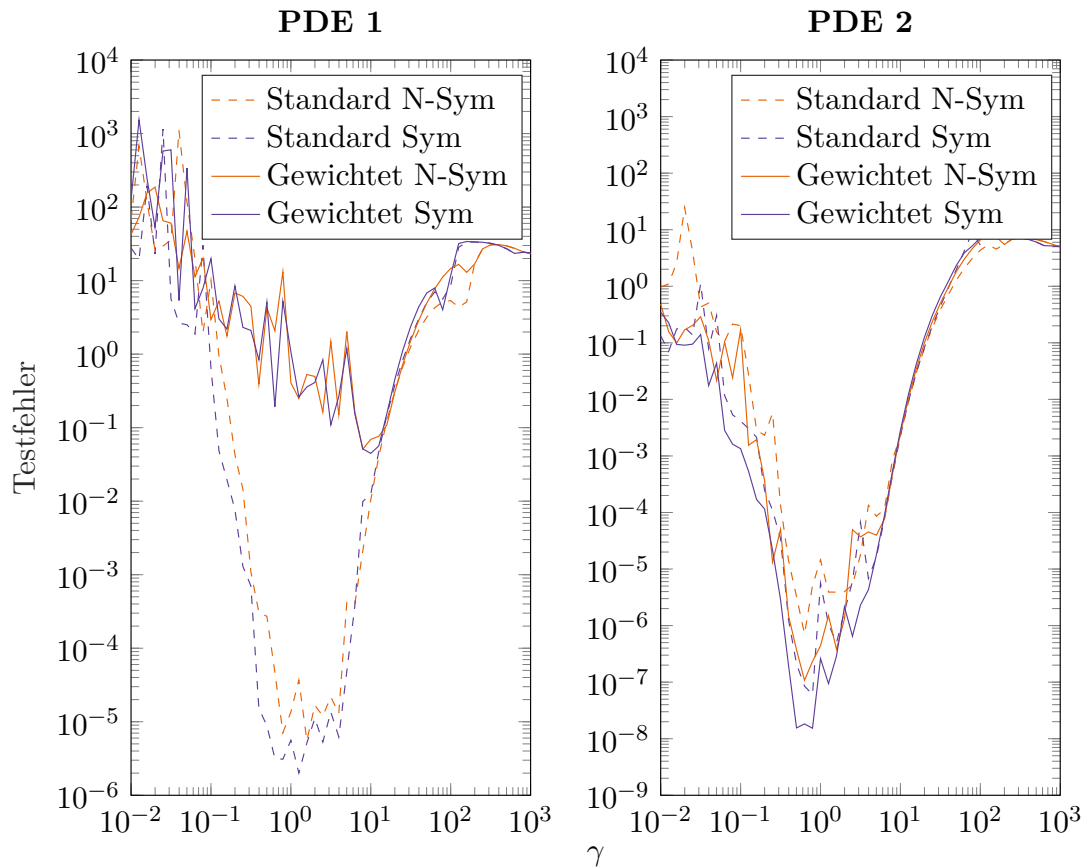
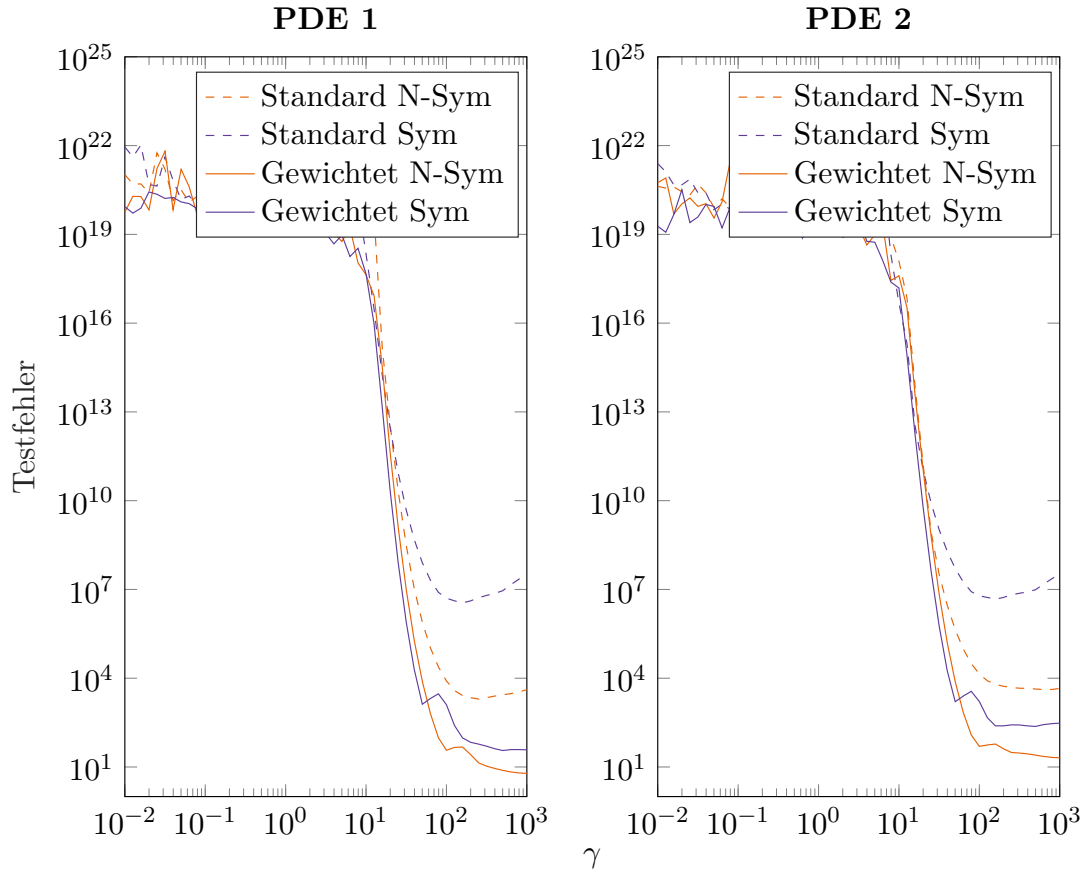


Abbildung 6.17: Fehler bei verschiedenen Parametern γ

fig:gamma-fehler

Daraus erkennt man, dass der Fehler groß ist, wenn γ entweder zu klein oder zu groß ist. Ist γ zu groß, haben wir zu kleine „Hütchen“, so können diese die PDE nur sehr lokal lösen. Der große Fehler für zu kleines γ lässt sich besser erklären, wenn man noch die Kondition hinzunimmt. Diese ist in Abbildung 6.18 dargestellt.

Abbildung 6.18: Kondition bei verschiedenen Parametern γ

Die Kondition ist für kleine γ groß. Das kommt daher, dass jede Ansatzfunktion „Einfluss“ auf viele Kollokationspunkte hat. Mitunter das erklärt den großen Fehler für zu kleine γ . Für große γ ist die Kondition wesentlich besser, da jede Ansatzfunktion auf weniger Kollokationspunkte deutlichen „Einfluss“ hat, die Kollokationsmatrix „näht“ sich damit der Einheitsmatrix an. Es lässt sich schließlich erkennen, dass der Fehler ungefähr dann am niedrigsten ist, wenn die Kondition anfängt besser zu werden.

Auffällig sind wieder die gewichteten Verfahren bei der ersten PDE. Hier ist wieder der deutlich schlechtere Fehler erkennbar.

6.3 Laufzeit

Als letztes werden wir die verschiedenen Verfahren bezüglich ihrer Laufzeit vergleichen. Die Zeitmessungen unterliegen verschiedenen Umgebungsbedingungen wie Prozessortakt, Betriebssystem und Zimmertemperatur. Deswegen wurden alle Messungen mehrfach unter ähnlichen Bedingungen durchgeführt und wir haben konsistente Ergebnisse bekommen. Dargestellt werden keine Mittelwerte über mehrere Durchläufe, sondern nur ein einzelner. Diese etwas ungenaue Arbeitsweise können wir damit rechtfertigen, dass wir weniger an den absoluten Zeitwerten interessiert sind, als an den relativen Vergleichswerten der einzelnen Verfahren.

In Abbildung 6.19 ist für die erste PDE die Laufzeit bei unterschiedlich vielen auf einem Gitter verteilten Kollokationspunkte dargestellt.

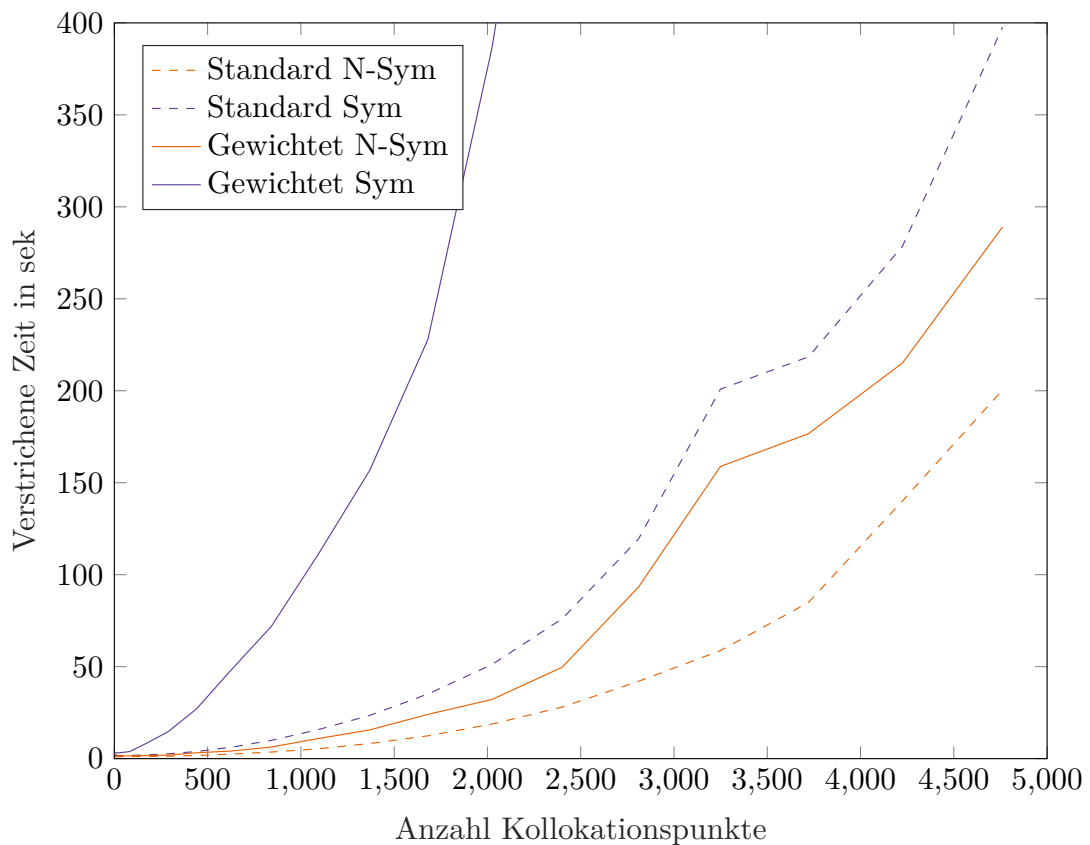


fig:Laufzeit

Abbildung 6.19: Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren

Wir sehen deutliche Unterschiede zwischen den verschiedenen Verfahren. Das Nicht-symmetrische Verfahren ist durchgehend das schnellste. Danach kommt das gewichtete symmetrische Verfahren. Der Mehraufwand entsteht hier durch den komplizierteren Kern und damit durch längere Auswertungszeiten. Mit der selben Begründung lässt sich auch die längere Laufzeit des symmetrischen Standardverfahrens erklären. Hier entstehen die komplizierteren Funktionen allerdings nicht durch das Anhängen der Gewichtsfunktion, sondern durch die zweimalige Anwendung des Differentialoperators. Beim symmetrischen gewichteten Verfahren kommen beide Effekte zusammen, was die längste Laufzeit erklärt.

In Abbildung 6.20 ist die Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren bei einer Greedy-Punktwahl dargestellt. Wieder gilt es zu beachten, dass die Graphen der Standardverfahren erst bei 37 Kollokationspunkten beginnen.

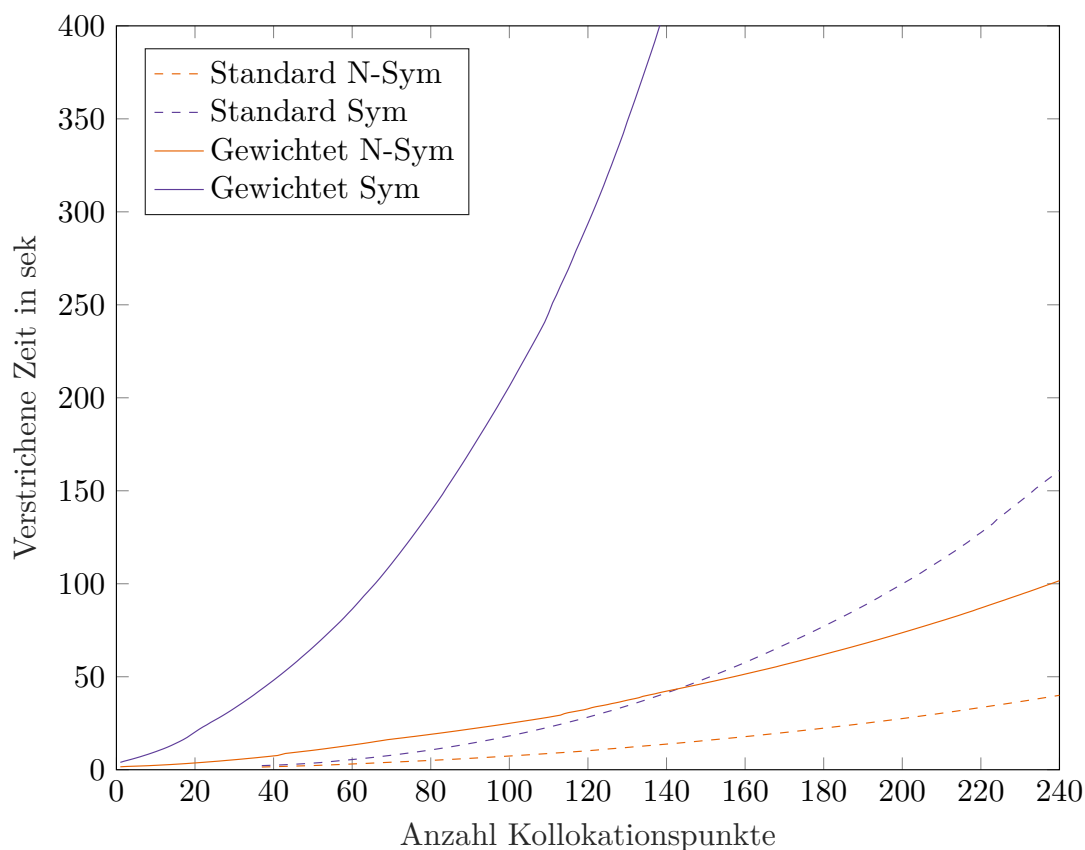


Abbildung 6.20: Laufzeit bei Greedy-Punktwahl

Wir erhalten wieder die gleiche Reihenfolge der Verfahren, die wir genauso begründen

können, wie schon im Fall der auf einem Gitter verteilten Punkte. Allerdings benötigt das Greedy-Verfahren wesentlich mehr Zeit für gleich viele Punkte. Das liegt daran, dass beim Greedy-Verfahren alle vorhergegangenen Iterationen zur Punktwahl mitberechnet werden müssen, was im Falle des Gitters wegfällt.

6.4 Vergleich mit FEM

Die Kernkollokation bietet eine Reihe von Vorteilen gegenüber der FEM. Dazu gehören:

- Die Kernkollokation hat eine höhere Genauigkeit als die FEM. In der folgenden Tabelle 6.1 ist der Fehler der FEM und der Kernkollokation mit zufälligen Kollokationspunkten für die erste PDE dargestellt. n bezeichnet dabei die Knotenanzahl, beziehungsweise die Anzahl der Kollokationspunkte.

	$n = 183$	$n = 689$	$n = 2673$
FEM	3.3902×10^{-2}	1.1434×10^{-2}	3.6496×10^{-3}
Standard N-Sym	6.3587×10^{-3}	9.1230×10^{-5}	1.6121×10^{-5}
Standard Sym	3.9065×10^{-3}	1.0242×10^{-5}	3.2350×10^{-7}
Gewichtet N-Sym	5.8360×10^{-3}	3.1449×10^{-3}	3.0448×10^{-4}
Gewichtet Sym	9.9156×10^{-3}	1.0253×10^{-3}	4.0773×10^{-4}

tab:FEM

Tabelle 6.1: Vergleich FEM mit Kernkollokation

Wir sehen, dass selbst die schlechtesten Kollokationsverfahren einen geringeren Fehler als die FEM haben.

- Die Kernkollokation ist im Gegensatz zur FEM, welche praktisch nur für maximal drei Dimensionen eingesetzt wird, komplett dimensionsunabhängig. Wir können mit zufälligen Kollokationspunkten ohne Weiteres PDEs von Dimension vier und höher numerisch lösen.
- Die Kernkollokation, dabei insbesondere die gewichtete Kernkollokation, kann einfach für beliebige mit einer Gewichtsfunktion beschreibbare Gebiete eingesetzt werden.

Zusammenfassung und Ausblick

cha:schluss

In diesem Kapitel fassen wir die wichtigsten Erkenntnisse dieser Arbeit zusammen und zeigen interessante weiterführende Fragen auf.

Wir haben in Kapitel 2 und 3 die bekannte Theorie der Kernkollokation vorgestellt, welche wir in Kapitel 4 um Gewichtsfunktionen erweitert haben. Diese könnte man noch weiter untersuchen, auch im Hinblick darauf, Gewichtsfunktionen für beliebige Gebiete mit möglichst wenig Singularitäten in ihren Ableitungen zu finden. Als Ansatz dafür bietet sich die in Kapitel 6.1.2 experimentell vorgestellte Methode an, in der wir eine Gewichtsfunktion nur auf einer Umgebung gegeben hatten.

Daraufhin haben wir in Kapitel 5 eine Implementierung der theoretisch hergeleiteten Verfahren vorgestellt, welche wir in Kapitel 6 ausgewertet haben. Dort haben wir sehr verschiedene Ergebnisse für unterschiedliche PDEs erhalten. Insbesondere haben die gewichteten Verfahren teilweise erstaunlich schlechte Ergebnisse geliefert. Diese Beobachtung haben wir auf die Singularitäten der partiellen Ableitungen der Gewichtsfunktionen zurückgeführt.

Wir haben außerdem verschiedene Möglichkeiten der Kollokationspunktwahl untersucht. Dabei haben wir festgestellt, dass eine Greedy-Punktwahl bezüglich der Anzahl der Kollokationspunkte die geschickteste der vorgestellten Wahlmöglichkeiten ist. Hier wäre es noch interessant einen anderen Fehlerschätzer zur Punktwahl zu benutzen, beispielsweise mit den C^1, C^2, \dots Normen. Außerdem wäre eine Greedy-Punktwahl schön, bei der die Punkte auf dem Rand nicht festgesetzt sind, sondern auch erst nach und nach

gesetzt werden. Dafür könnte man auf dem Rand einen zweiten Fehlerschätzer einführen und diesen mithilfe einer Konstante gegen den Fehler im Inneren abwägen.

Wir haben die Möglichkeit, dass die Kernkollokation PDEs in höheren Dimensionen numerisch lösen kann, nur erwähnt und sind aufgrund der guten Ergebnisse zufälliger Kollokationspunkte in zwei Dimensionen davon ausgegangen, dass sie auch in höheren Dimensionen ähnlich gut sein werden. An dieser Stelle wären weitere Experimente zur Überprüfung dieser These wünschenswert.

cha : Anhang

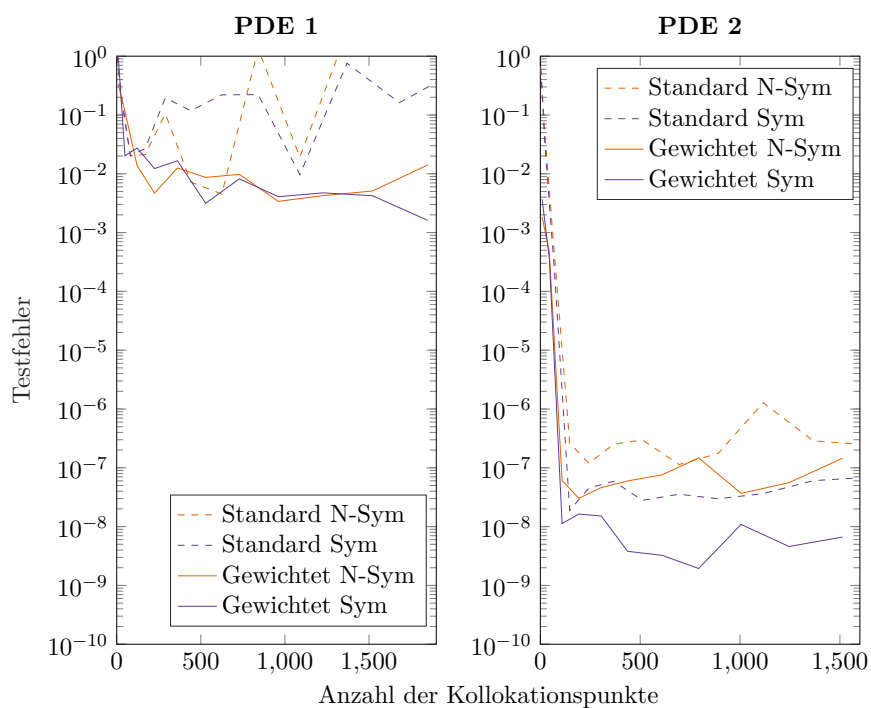


Abbildung 8.1: Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter beim Wendland Kern

c-grid-both

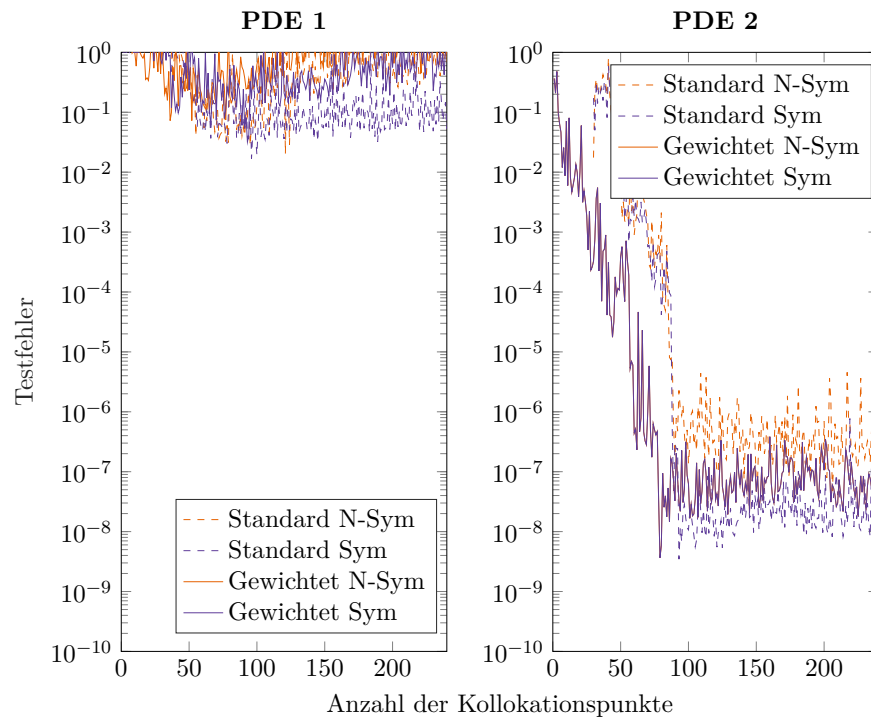


Abbildung 8.2: Testfehler bei Kollokationspunkten mit einer Greedy-Punktwahl beim Wendland Kern

error-greedy-both

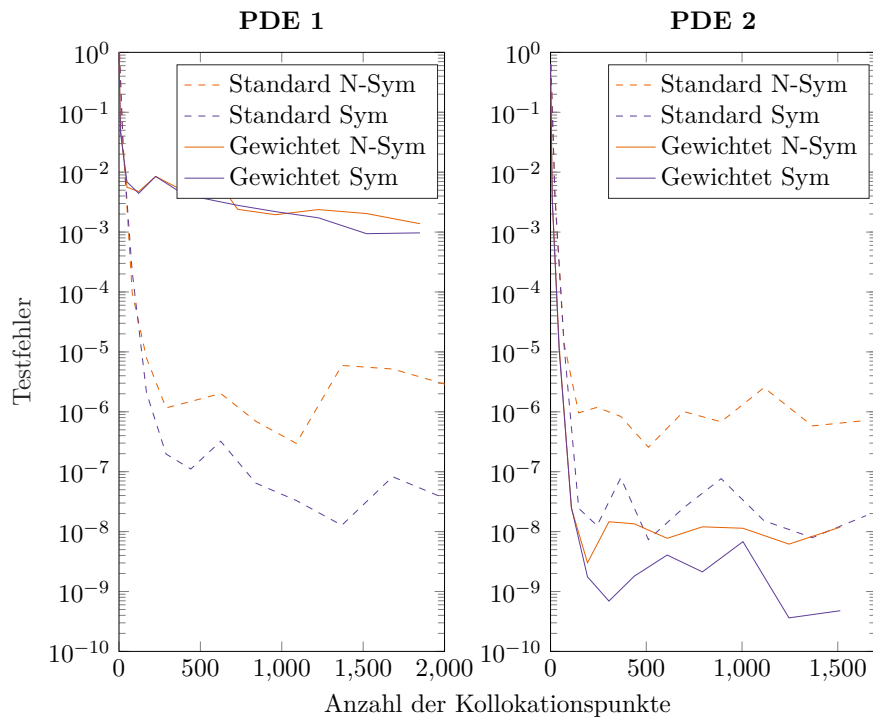


Abbildung 8.3: Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter bei absolutem Fehlerschätzer

c-grid-both

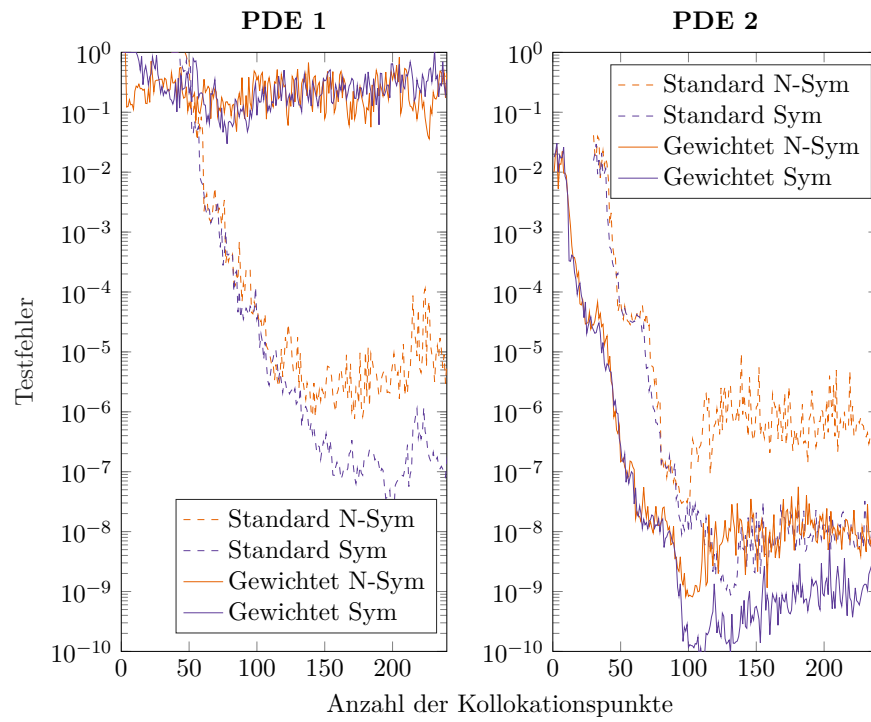


Abbildung 8.4: Testfehler bei Kollokationspunkten mit einer Greedy-Punktwahl bei absolutem Fehlerschätzer

error-greedy-both

Literatur

- Horn.2013 [1] R. A. Horn und C. R. Johnson. *Matrix analysis, second edition*. 2nd ed. Cambridge und New York: Cambridge University Press, 2013.
- Wendland.2005 [2] H. Wendland. *Scattered data approximation*. Bd. 17. Cambridge monographs on applied and computational mathematics. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- Santin.2017 [3] G. Santin. *Approximation with Kernel Methods Vorlesungsskript*. Stuttgart, 2017.
- Kaballo.2018 [4] W. Kaballo. *Grundkurs Funktionalanalysis*. 2. Auflage. Lehrbuch. Berlin: Springer Spektrum, 2018.
- Hon.2001 [5] Y. C. Hon und R. Schaback. „On unsymmetric collocation by radial basis functions“. In: *Applied Mathematics and Computation* 119.2-3 (2001), S. 177–186.
- Höllig.2013 [6] K. Höllig und J. Hörner. *Approximation and modeling with B-splines*. Bd. 132. Other titles in applied mathematics. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2013.