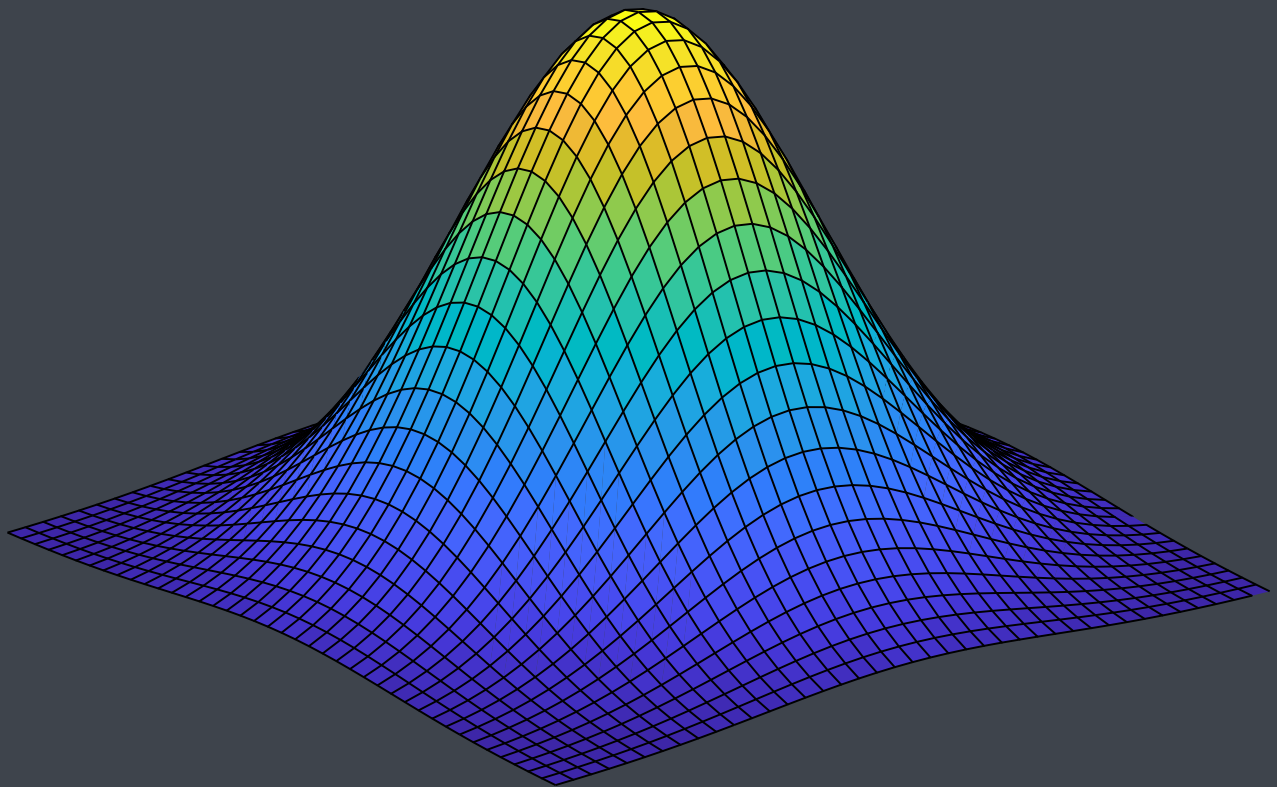


Bachelorarbeit

Randwertprobleme mit gewichteter Kernkollokation

Daniel Koch

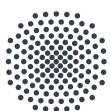


Betreuer & Prüfer:

Prof. Dr. Bernard Haasdonk

Immatrikulationsnummer:

2948791



Universität Stuttgart



Oktober 2018

Bachelorarbeit

Randwertprobleme mit gewichteter Kernkollokation

Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart

von

Daniel Koch

aus Leonberg

Prüfer:	Prof. Dr. Bernard Haasdonk
Betreuer:	Prof. Dr. Bernard Haasdonk
Immatrikulationsnummer:	2948791
Eingereicht am:	5. Oktober 2018

Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation der Universität Stuttgart
IANS

Oktober 2018

Bachelor's Thesis

Boundary Value Problems with Weighted Kernel Collocation

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

by

Daniel Koch

from Leonberg

Supervisor:	Prof. Dr. Bernard Haasdonk
Advisor:	Prof. Dr. Bernard Haasdonk
Student ID:	2948791
Submitted on:	5th October 2018

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

October 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 wörtlich oder sinngemäß übernommenen Aussagen sind als solche kenntlich gemacht. Diese Arbeit ist weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen. Das elektronische Exemplar stimmt mit den anderen Exemplaren überein.

Datum, Ort

Unterschrift

Zusammenfassung

In dieser Bachelorarbeit erweitern wir die Kernkollokation, ein Verfahren zum numerischen Lösen 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 der PDE nur an manchen Stellen exakt angenommen. Um zu erreichen, dass dies auf dem 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, reproduzierender Kern Hilbertraum

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 as well as 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 as the result automatically fulfills the boundary conditions given by the PDE. As a consequence, we can also 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, singularities occur easily 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	45
6.1.4. Validationspunkte	46
6.1.5. Ein Beispiel in vier Dimensionen	48
6.2. Parameterwahl und Kondition	50
6.3. Laufzeit	52
6.4. Vergleich mit der finiten Elemente Methode	54

7. Zusammenfassung und Ausblick	57
Literatur	59
A. Anhang	61

Akronyme

FEM finite Elemente Methode xiii, 33, 54, 55

LGS lineares Gleichungssystem 16–18, 27, 28

oBdA ohne Beschränkung der Allgemeinheit 22, 23

PD positiv definit 5, 7–9

PDE partielle Differentialgleichung iii, v, xi, 1–4, 15, 19, 20, 26, 27, 30, 31, 33–35, 37, 38, 40–46, 48–53, 55, 57, 61–63

RKHS reproduzierender Kern Hilbertraum 1, 8–12, 24, 27

SPD strikt positiv definit 5–7, 11–13, 15, 24–27

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 auf einem Gitter	37
6.4. Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter	38
6.5. Testfehler auf Ω beim gewichteten Verfahren	39
6.6. Negativer Laplace der Gewichtsfunktion	39
6.7. Testfehler bei zufällig verteilten Kollokationspunkten	41
6.8. Testfehler beim Greedy-Verfahren	42
6.9. Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 1	43
6.10. Lösung der PDE 1 bei gewichtetem Greedy-Verfahren	43
6.11. Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 2	44
6.12. Testfehler der ersten PDE bei einer anderen Gewichtsfunktion	45
6.13. Plot über den Rand	46
6.14. Testfehler und γ -Werte bei unterschiedlichen Anzahlen von Validationspunkten	47
6.15. Lösung bei Überanpassung	48
6.16. Fehlerplot einer PDE in vier Dimensionen	49
6.17. Gewählter Parameter γ	50
6.18. Fehler bei verschiedenen Parametern γ	51
6.19. Kondition bei verschiedenen Parametern γ	52
6.20. Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren	53
6.21. Laufzeit bei Greedy-Punktwahl	54
A.1. Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter beim Wendland Kern	61
A.2. Testfehler bei Kollokationspunkten mit einer Greedy-Punktwahl beim Wendland Kern	62
A.3. Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter bei absolutem Fehlerschätzer	62
A.4. Testfehler bei Kollokationspunkten mit einer Greedy-Punktwahl bei absolutem Fehlerschätzer	63

Tabellenverzeichnis

6.1. Vergleich FEM mit Kernkollokation	55
--	----

KAPITEL 1

Einleitung

In dieser Bachelorarbeit stellen wir ein Verfahren zum numerischen Lösen von partiellen Differentialgleichungen (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 bestehendes numerisches Verfahren zum Lösen von PDEs zu erweitern 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.

Im dritten Kapitel werden wir die Theorie aus dem vorherigen Kapitel anwenden und das Standardverfahren der Kernkollokation herleiten. Dafür verfolgen wir zwei verschiedene Ansätze, zum einen die symmetrische Kollokation in Kapitel 3.1, welche theoretisch gut motiviert ist, aber auch komplexer ist als die wesentlich simplere nicht-symmetrische Kollokation in Kapitel 3.2, über die sich weniger theoretische Aussagen treffen lässt.

In Kapitel 4 kommen wir zur gewichteten Kollokation. Wir machen uns im ersten Abschnitt 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.

Daraufhin gehen wir in Kapitel 5 auf die Implementierung aller Verfahren ein. Dabei stellen wir den grundlegenden Algorithmus vor und gehen dabei auf die Parameterwahl und die Wahl der verschiedenen benötigten Punktmengen ein.

In Kapitel 6 testen wir alle vorgestellten Verfahren. Dafür lösen wir verschiedene PDEs 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

Die Kernkollokation ist ein Verfahren, welches auf der Idee der Interpolation beruht. Da wir bei partiellen 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 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen und beschränkt und sei eine PDE mit Lösung $u \in C^k(\Omega) \cap C^l(\bar{\Omega})$ gegeben:

$$\begin{aligned} Lu(x) &= f(x), x \in \Omega \\ Bu(x) &= g(x), x \in \partial\Omega, \end{aligned} \tag{2.1}$$

wobei L ein linearer Differentialoperator der Ordnung k und B ein linearer Randwertoperator der Ordnung l ist. Sei $X_N := \{x_1, \dots, x_N\} \subset \bar{\Omega}$ 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.

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.

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

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

Hier genügt es sogar, wenn nur einer der beiden Kerne SPD ist.

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 strikte 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 $\alpha \neq 0$

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

An dieser Stelle sehen wir, dass es genügen würde, wenn nur einer der beiden Kerne SPD ist.

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

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

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 definit und damit nach dem Satz von Schur [1, Theorem 7.5.3] auch das Produkt der beiden.

□

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

1. Skalarprodukt: $K(x, y) := \gamma^{-1}(x, y)$ ist PD.

2. Gauß Kern: $K(x, y) := \exp(-\gamma\|x - y\|^2)$ ist SPD.

Die Abbildung auf der Titelseite dieser Arbeit zeigt den Gauß Kern in zwei Dimensionen.

3. C^2 Wendland Kern in drei oder weniger Dimensionen:

$K(x, y) := (1 - \gamma\|x - y\|)_+^4(4\gamma\|x - y\| + 1)(20\gamma^2)^{-1}$, wobei $(1 - \gamma\|x - y\|)_+$ definiert ist als

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

ist SPD.

Beweis.

1. Einen Beweis findet man in Santin [2, Proposition 2.10].

2. Einen Beweis dafür findet man in Wendland [3, Theorem 6.10].

3. Auch hierfür findet man einen Beweis in Wendland [3, Theorem 9.13]. Außerdem findet man dort eine Verallgemeinerung auf alle Dimensionen und Differenzierbarkeiten.

□

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.

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 [2, 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 von \mathcal{H} . Dann gilt für alle $x, y \in \Omega$:

$$\begin{aligned} K_1(x, y) &= (K_1(\cdot, y), K_2(x, \cdot))_{\mathcal{H}} && \text{(Reproduzierbarkeit von } K_1) \\ &= K_2(x, y) && \text{(Reproduzierbarkeit von } K_2) \end{aligned}$$

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 PD Kern. Dann existiert genau ein RKHS $\mathcal{H}_K(\Omega)$ mit reproduzierendem Kern K .*

Beweis. Einen Beweis findet man in Santin [2, Theorem 3.10].

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.

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:*

1. \mathcal{H} ist genau dann ein RKHS, wenn die Auswertungsfunktionale stetig sind.
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 [2, Proposition 3.8].

1. Sei \mathcal{H} ein RKHS mit reproduzierendem Kern K . 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 in Santin [2, Proposition 7.13] und einen Beweis des zweiten Teils in Santin [2, 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.

Satz 2.12. *Sei K ein SPD 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 [2, 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 [2, 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 $\alpha \in \mathbb{R}^d$ und $\alpha \neq 0$ existiert mit $\lambda := \sum_{i=1}^d \alpha_i \lambda_i = 0$, 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

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

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 $\beta \in \mathbb{R}^d, \beta \neq 0$. Dann gilt:

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

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. \square

Jetzt betrachten wir die lineare Unabhängigkeit der Auswertungen der Ableitungen:

Satz 2.14. *Sei K SPD und ein translationsinvarianter Kern auf \mathbb{R}^d , das heißt $K(x, y) = \Phi(x - y)$ für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und eine Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Sei $k \in \mathbb{N}$ und angenommen, dass $\Phi \in L_1(\mathbb{R}^d) \cap C^{2k}(\mathbb{R}^d)$. Seien $a_1, \dots, a_N \in \mathbb{N}_0^d$ mit $|a_i| \leq k$ und sei $X_N := \{x_i\}_{i=1}^N \subset \mathbb{R}^d$. 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 [2, Theorem 7.15]. \square

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

3.1. Symmetrische Kollokation

Sei wieder $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen und beschränkt, L und B lineare Differentialoperatoren der Ordnungen l und k , $K \in C^{2\max\{l,k\}}(\Omega \times \Omega)$ ein translationsinvarianter SPD Kern und eine PDE wie in (2.1) gegeben. Für ein $N \in \mathbb{N}$ betrachten wir die Menge $X_N := \{x_i\}_{i=1}^N \subset \bar{\Omega}$ mit paarweise verschiedenen Punkten, 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

$$\begin{aligned}(b_L)_i &= f(x_i), x_i \in X_{in} \\ (b_B)_i &= g(x_i), x_i \in X_{bd}.\end{aligned}$$

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

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 eines LGS $A\alpha = b$ mit

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

mit

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

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

4.1. Motivation für die gewichtete Kollokation

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 Gleichung (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

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

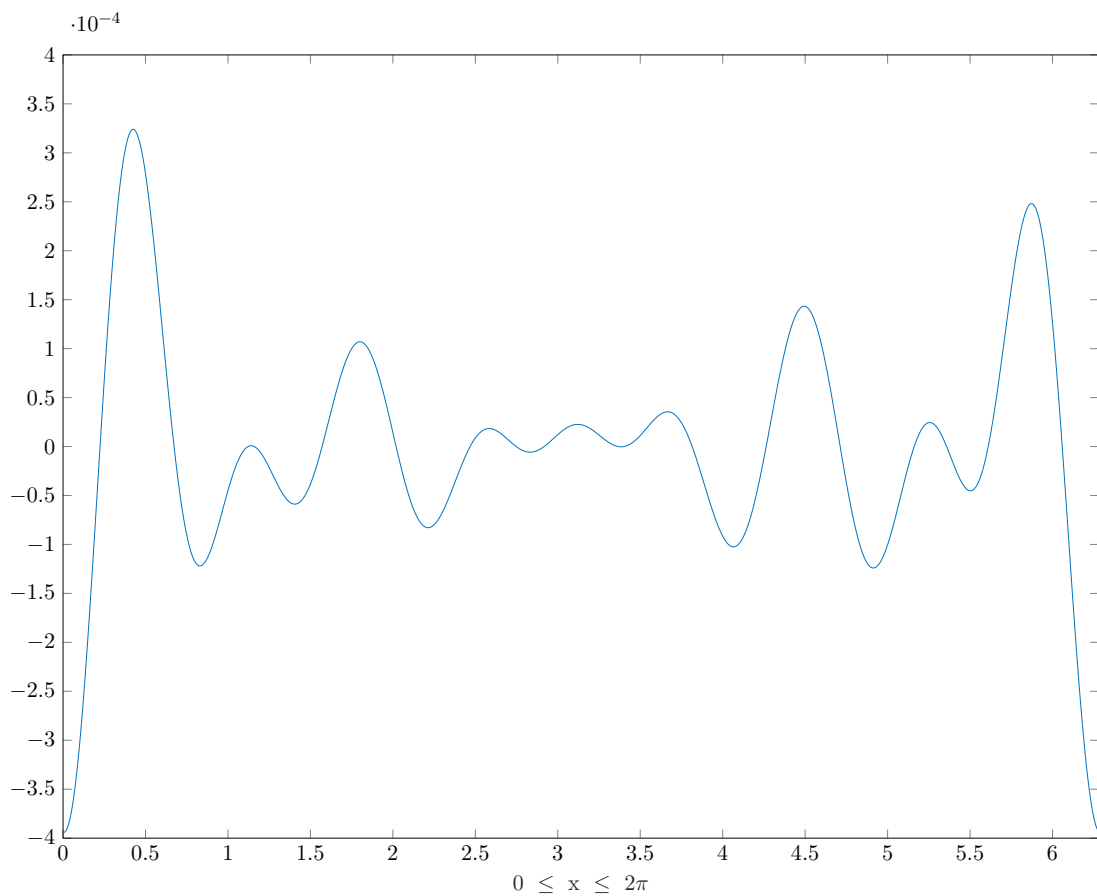


Abbildung 4.1: Plot eines Interpolanten über den Rand des Gebietes

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

Definition 4.1. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen und beschränkt. Eine Funktion $w : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 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 $x \in \mathbb{R}^d \setminus \bar{\Omega}$

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 $\Omega = \mathbb{R}^d \setminus \bar{\Omega}_1$ 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 $x \in \partial\Omega_1, x \in \partial\Omega_2. \Rightarrow w_1(x) = 0, w_2(x) = 0$

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

□

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

$$w_1(x) = -x_1^2 + 1$$

$$w_2(x) = -x_2^2 + 1$$

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

$$\begin{aligned} w(x) &= w_1(x) + w_2(x) - \sqrt{w_1(x)^2 + w_2(x)^2} \\ &= -x_1^2 + 1 - x_2^2 + 1 - \sqrt{(-x_1^2 + 1)^2 + (-x_2^2 + 1)^2} \\ &= -x_1^2 - x_2^2 + 2 - \sqrt{x_1^4 - 2x_1^2 + x_2^4 - 2x_2^2 + 2} \end{aligned}$$

Wir wollen jetzt einen Kern und eine Gewichtsfunktion miteinander multiplizieren 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

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:

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

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

Wir zeigen noch die Reproduzierbarkeit von K 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 Definitionsbereichs 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 $X_N := \{x_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$ mit paarweise verschiedenen Punkten. 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

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

Wir können dieses Mal allerdings ohne Weiteres keine Aussage über die Lösbarkeit des LGS treffen. Selbst wenn der ursprüngliche Kern K' translationsinvariant ist, ist es der Kern K durch die Multiplikation mit einer Gewichtsfunktion im Allgemeinen nicht mehr. Das bedeutet, dass wir Satz 2.14 nicht anwenden können und somit keine Aussage über die lineare Unabhängigkeit der verwendeten Funktionale haben. Damit verlieren wir die positive Definitheit der Matrix A und damit auch ihre gesicherte Invertierbarkeit.

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

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 $K(x, y) = \exp(-\gamma\|x - y\|^2)$ aus Beispiel 2.5 aufgrund seiner unendlichen Differenzierbarkeit, seiner Translationsinvarianz und seiner strikten positiven Definitheit geeignet. 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 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 X^{Val} 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.
- Wir werden später zur Bestimmung der Güte unserer endgültigen Lösung noch eine Menge an Testpunkten brauchen, an denen wir dann den Fehler berechnen.

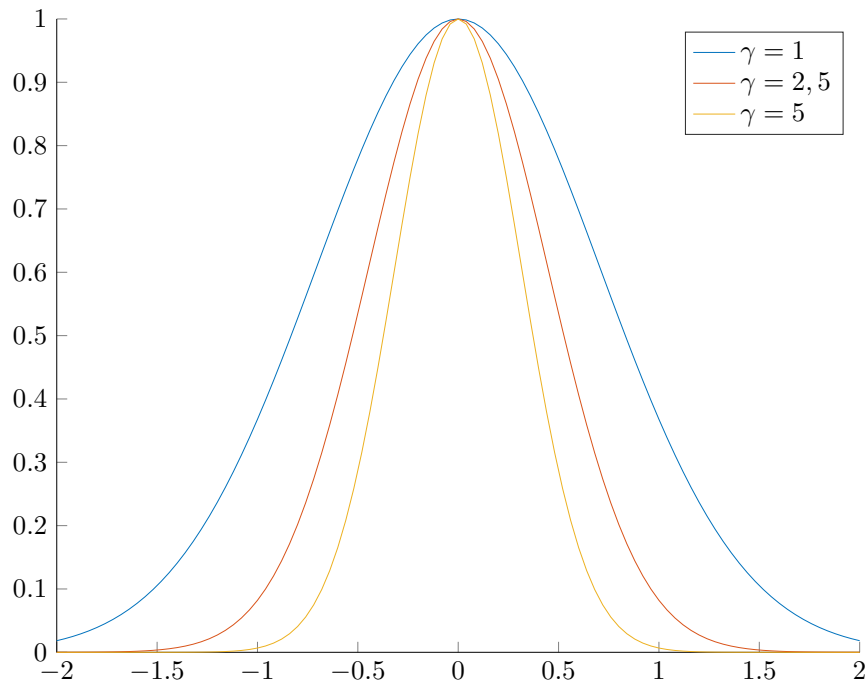


Abbildung 5.1: Plots verschiedener Kerne

- f und g bezeichnen die rechte Seite der zu lösenden PDE.
- Der Algorithmus funktioniert so für die Standard sowie 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

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

- 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

Algorithmus 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:      $\text{error} \leftarrow \text{CALCULATEERROR}(X, XVal, i)$ 
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
```

die rechte Seite der 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. Dies ist theoretisch immer möglich, allerdings werden dafür in höheren Dimensionen sehr viele Punkte benötigt, weswegen es praktisch nicht umsetzbar ist.
- 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 einer neuen Punktmenge anstatt der Validationspunktmenge anwenden. An die Stelle, an der der maximale Fehler angenommen

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

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

Die Testpunkte legt man, wenn möglich, am einfachsten in einem engen Gitter über das Definitionsgebiet, um eine genaue Auswertung der Funktion zu gewährleisten. Ansonsten kann man auch hier auf zufällig gewählte Punkte zurückgreifen.

Numerische Tests

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:

$$\begin{aligned} -\Delta u(x) &= 2\pi^2 \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) & x \in \Omega \\ u(x) &= 0 & x \in \partial\Omega \end{aligned}$$

Sie hat die analytische Lösung

$$u(x) = \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2),$$

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

$$w(x) = -x_1^2 - x_2^2 + 2 - \sqrt{x_1^4 - 2x_1^2 + x_2^4 - 2x_2^2 + 2}.$$

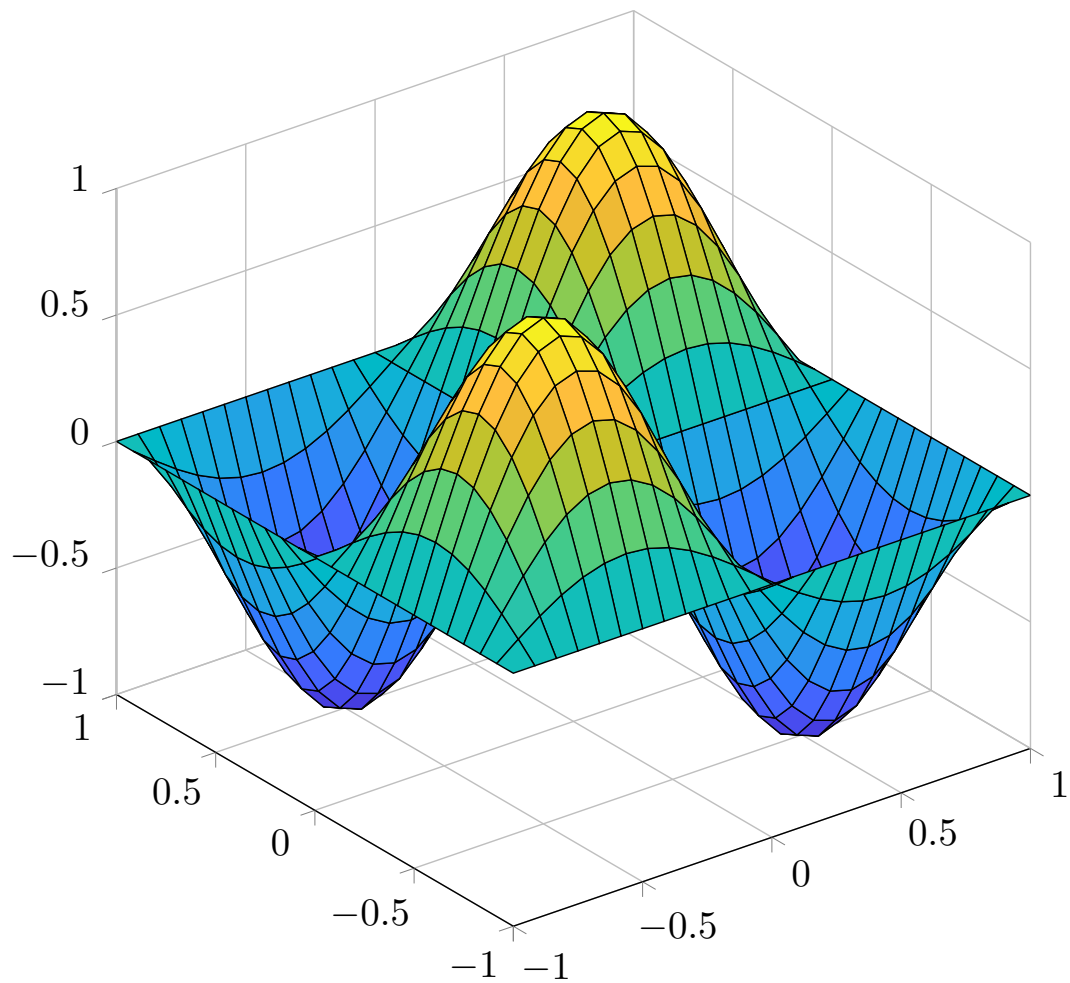


Abbildung 6.1: Lösung der ersten PDE

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

$$\begin{aligned} -\Delta u(x) &= -\exp(-x_1^2 - x_2^2)(-4 + 4(x_1^2 + x_2^2)) & x \in \Omega \\ u(x) &= 0 & x \in \partial\Omega \end{aligned}$$

Sie hat die analytische Lösung

$$u(x) = \exp(-x_1^2 - x_2^2) - \frac{1}{e},$$

dargestellt in Abbildung 6.2. Wir wählen als Gewichtsfunktion:

$$w(x) = 1 - x_1^2 - x_2^2$$

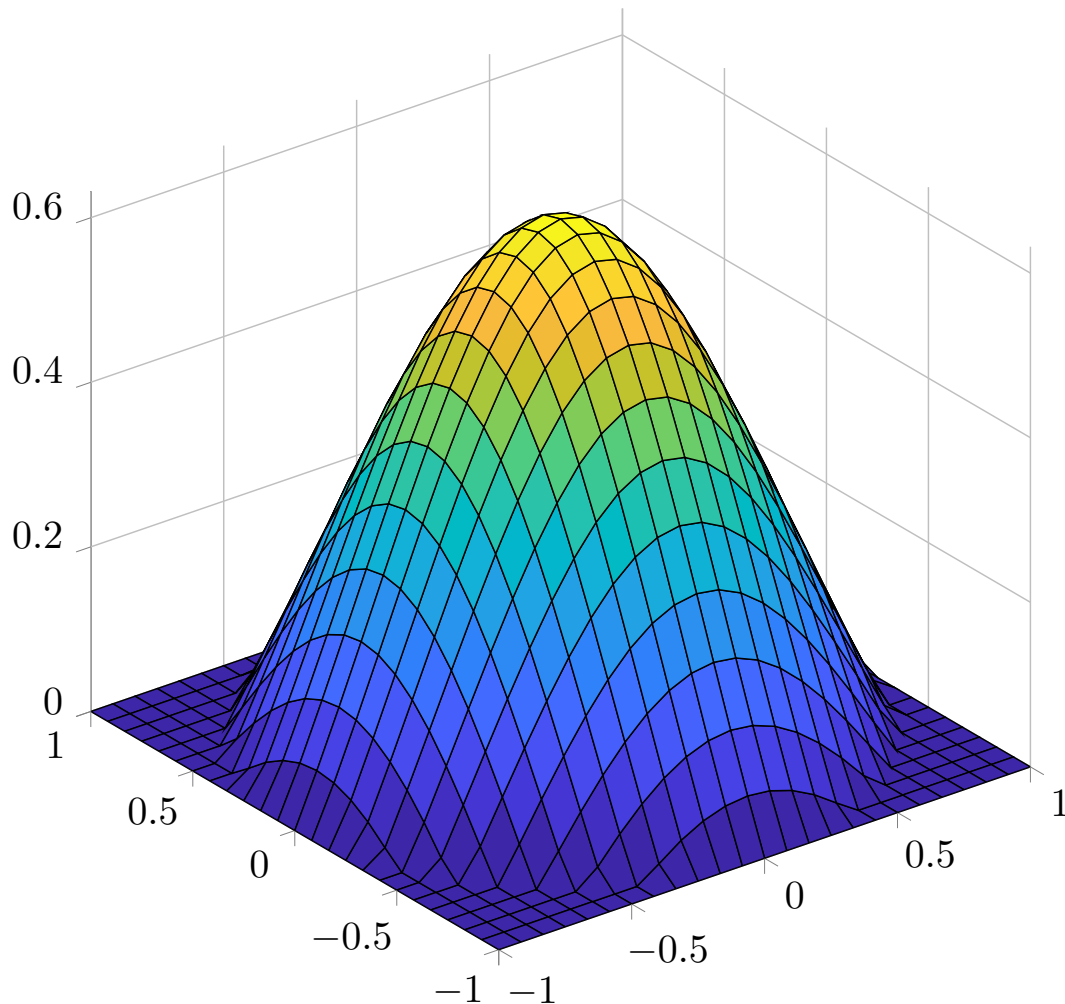


Abbildung 6.2: Lösung der zweiten PDE

Die Poisson-Gleichung werden wir mithilfe der Kernkollokation numerisch lösen. Dafür wählen wir den Gauß Kern aus Beispiel 2.5. Im Anhang (Abbildung A.1, A.2) findet man die den hier nachfolgenden Fehlerplots entsprechenden Plots für einen leicht veränderten C^4 Wendland Kern (zu finden in Wendland [3, Kapitel 9.4]). Dabei haben wir die $\|x - y\|$ Terme quadriert, um Nullstellen im Nenner der partiellen Ableitungen zu vermeiden. Dieser Kern

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 A.3, A.4) die entsprechenden Plots. Diese weisen allerdings keinen nennenswerten Unterschied zu den Plots mit 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.

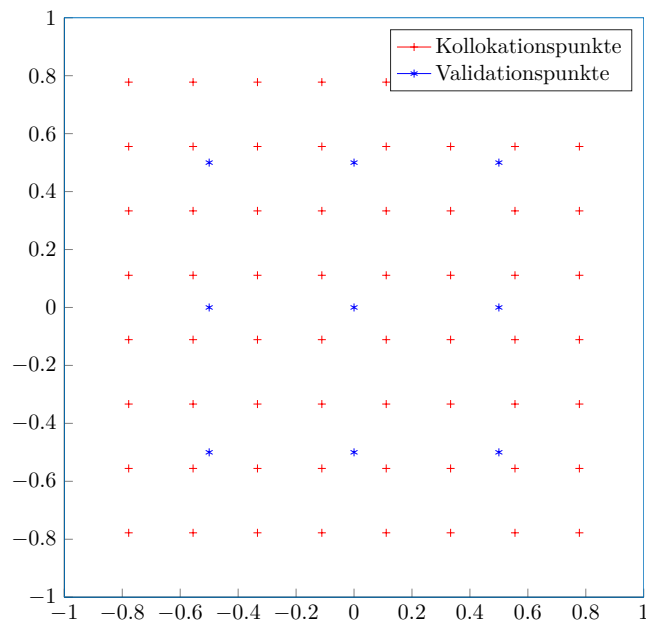


Abbildung 6.3: Kollokations- und Validationspunkte auf einem Gitter

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 sinnvoll. Wir sehen aber deutliche Unterschiede zwischen den beiden PDEs.

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 mit rund einem Testfehler von 10^{-2} liefern, sich dann aber mit mehr Kollokationspunkten noch leicht verbessern. Insgesamt 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. Der Testfehler des gewich-

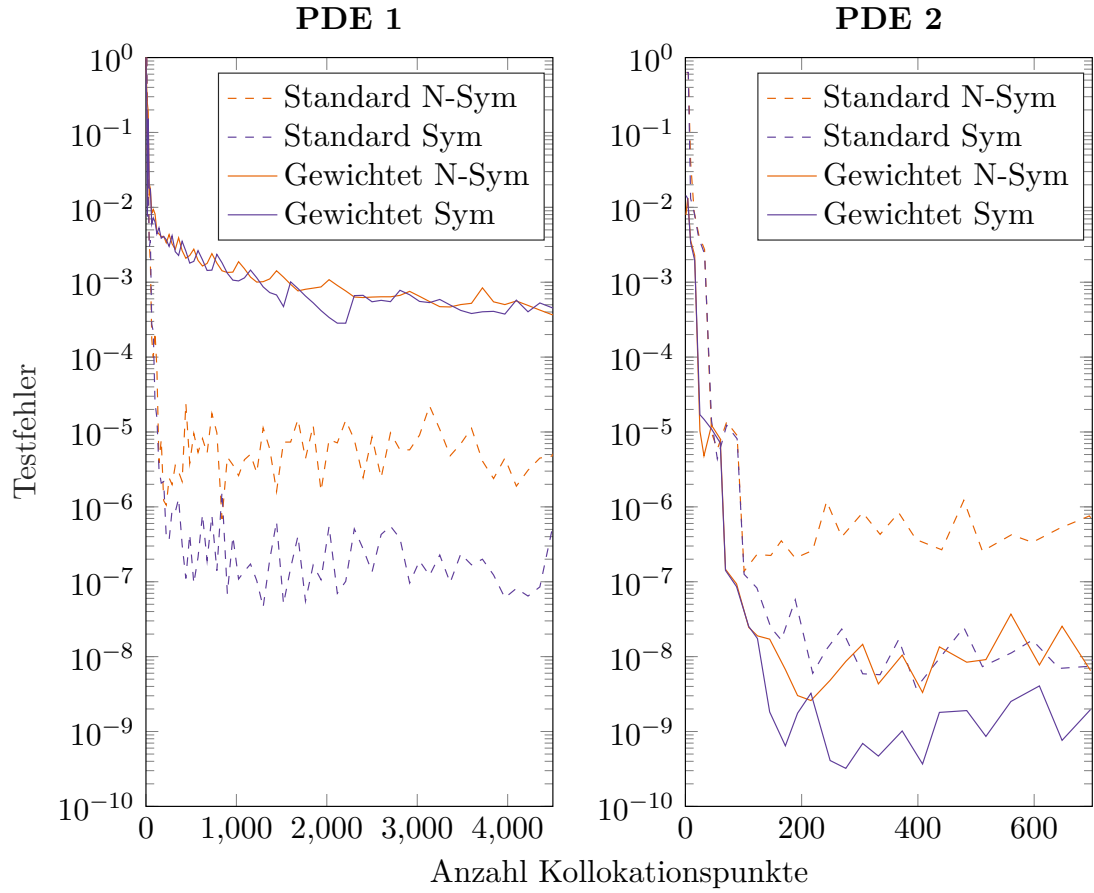


Abbildung 6.4: Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter

teten nicht-symmetrischen Verfahrens mit 529 Kollokationspunkten auf dem Gebiet Ω ist in Abbildung 6.5 dargestellt.

Man erkennt große Fehler in den Ecken des Gebietes. Diese kommen aus der Gewichtsfunktion. Wenn man den Differentialoperator der PDE auf diese anwendet, erhält man:

$$-\Delta w(x) = \frac{2(x_1^6 + 3x_1^4x_2^2 - 4x_1^4 + 3x_1^2x_2^4 - 12x_1^2x_2^2 + 8x_1^2 + 2(x_1^4 - 2x_1^2 + x_2^4 - 2x_2^2 + 2)^{\frac{3}{2}} + x_2^6 - 4x_2^4 + 8x_2^2 - 4)}{(x_1^4 - 2x_1^2 + x_2^4 - 2x_2^2 + 2)^{\frac{3}{2}}}$$

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

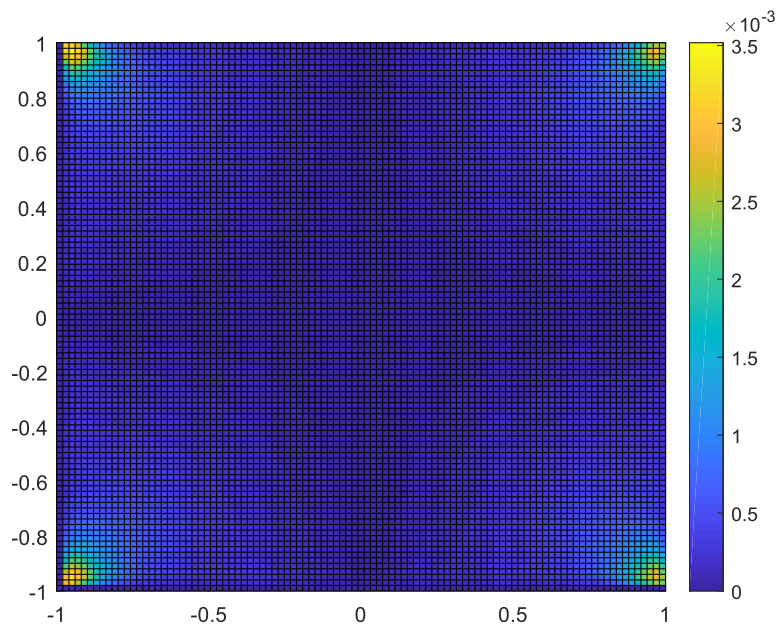
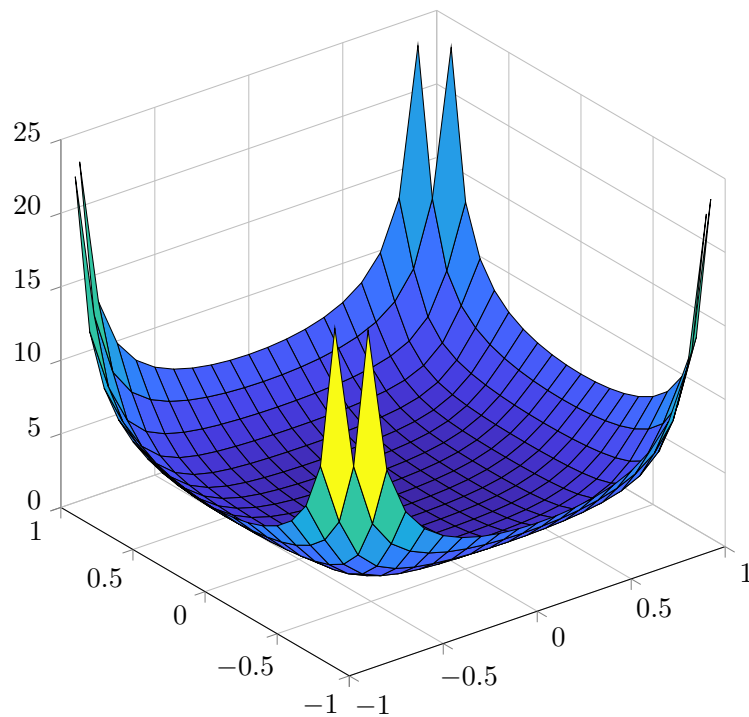
Abbildung 6.5: Testfehler auf Ω beim gewichteten Verfahren

Abbildung 6.6: Negativer Laplace der Gewichtsfunktion

Als weiteres Indiz für die Ursache des Fehlers betrachten wir die zweite PDE. In dem Fall erhält man, wenn man den negativen Laplace Operator auf die Gewichtsfunktion anwendet,

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

was keine Singularitäten aufweist.

Tatsächlich erhalten wir, wenn wir den Testfehler der zweiten PDE in Abbildung 6.4 betrachten, ein komplett anderes Bild. Alle Verfahren erreichen mit spätestens 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.

6.1.1.2. Zufällige Kollokationspunkte

Als nächstes schauen wir uns zufällig verteilte Kollokationspunkte an. In Abbildung 6.7 ist der Testfehler 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. Es lässt sich in niedrigen Dimensionen also kein Vorteil bezüglich des Fehlers für zufällig gewählte Kollokationspunkte feststellen. Wie schon in Kapitel 5 erwähnt ist es in höheren Dimensionen allerdings aufgrund der hohen Punktzahl praktisch unmöglich ein Gitter über das Gebiet zu legen. Dort können die zufälligen Kollokationspunkte vernünftige Ergebnisse liefern.

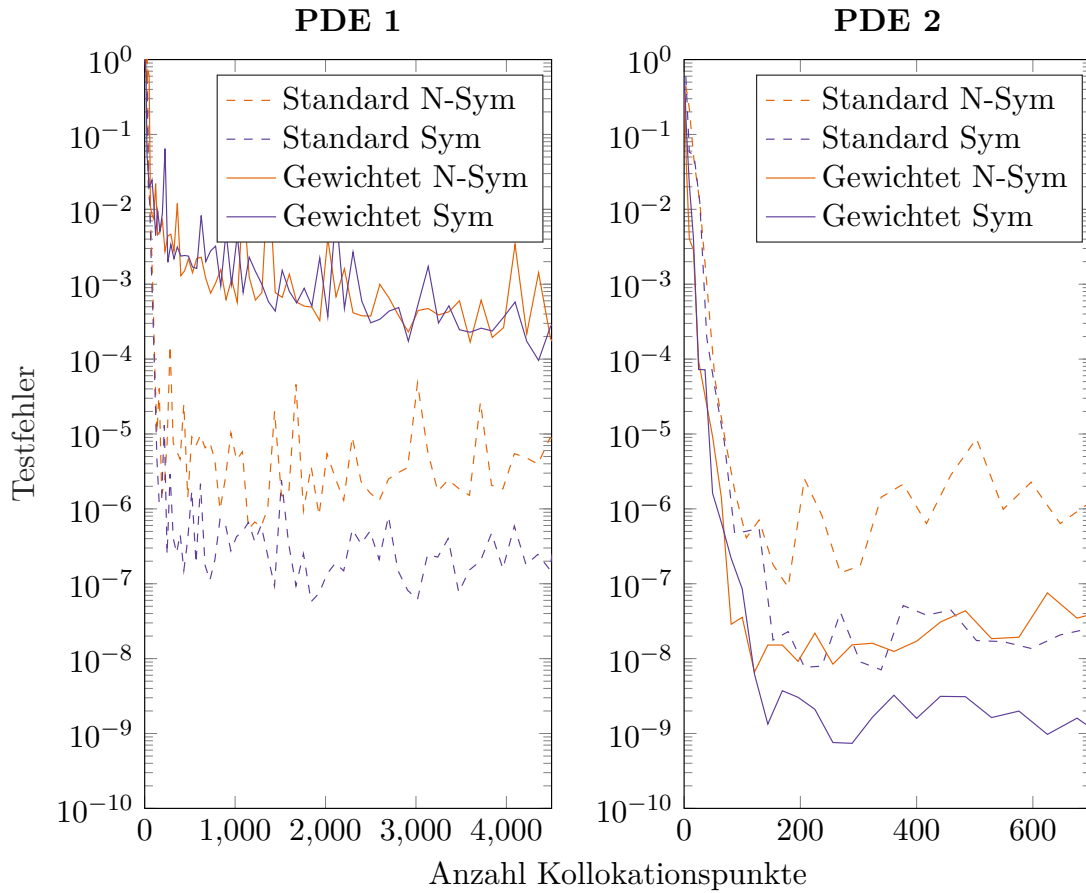


Abbildung 6.7: Testfehler bei zufällig verteilten Kollokationspunkten

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. Als Kriterium für die Punktwahl benutzen wir einen Fehlerschätzer im Residuum auf einer von den Validations- und Testpunkten disjunkten Punktmenge. Es ist zu beachten, dass bei der benutzten Implementierung bei den Standardverfahren auf dem Rand festgesetzte Kollokationspunkte benutzt werden. Deswegen beginnen die Graphen der Standardverfahren nicht bei 0 Kollokationspunkten.

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

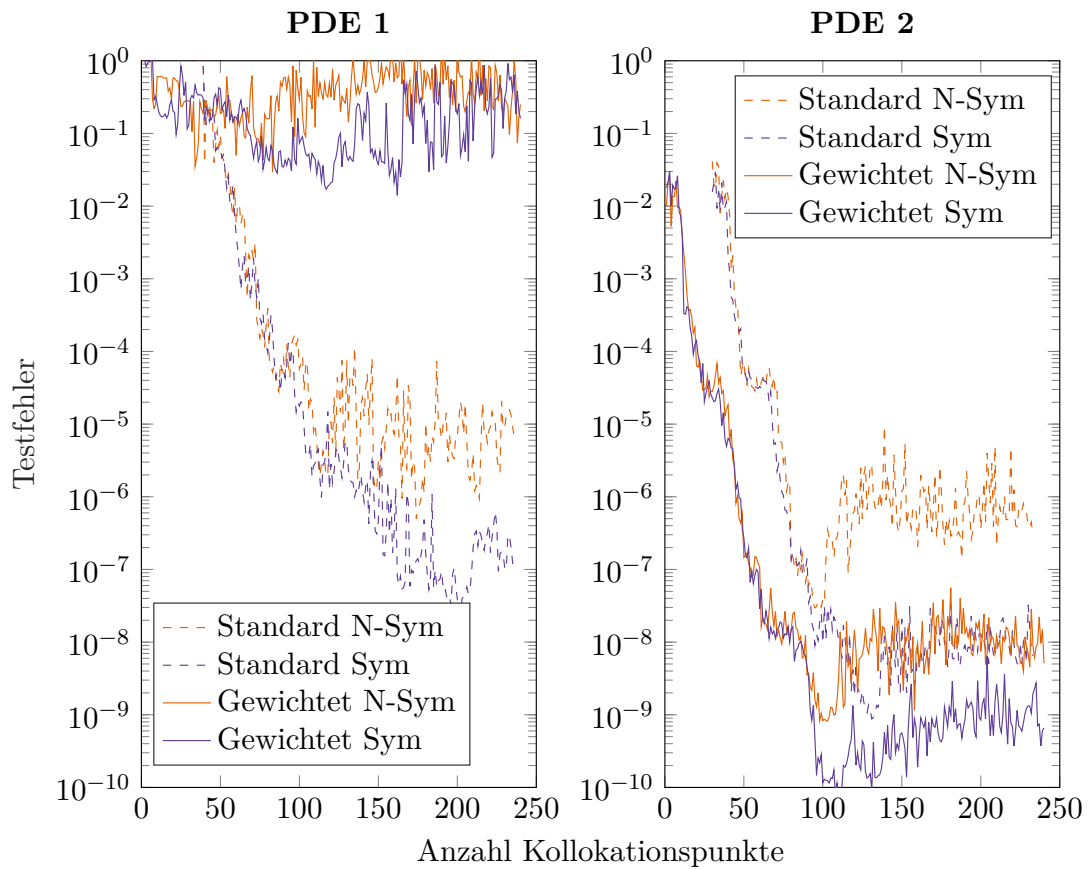


Abbildung 6.8: Testfehler beim Greedy-Verfahren

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.

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, in dem es die Kollokationspunkte in die Ecken legt. Dies führt aber zu einer in Abbildung 6.10 erkennbaren numerisch verrauschten Lösung.

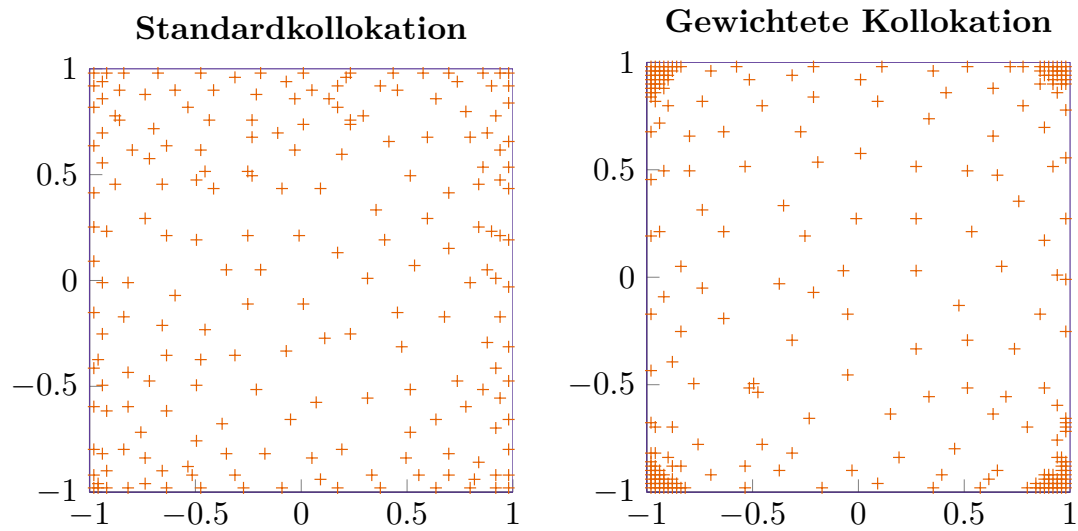


Abbildung 6.9: Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 1

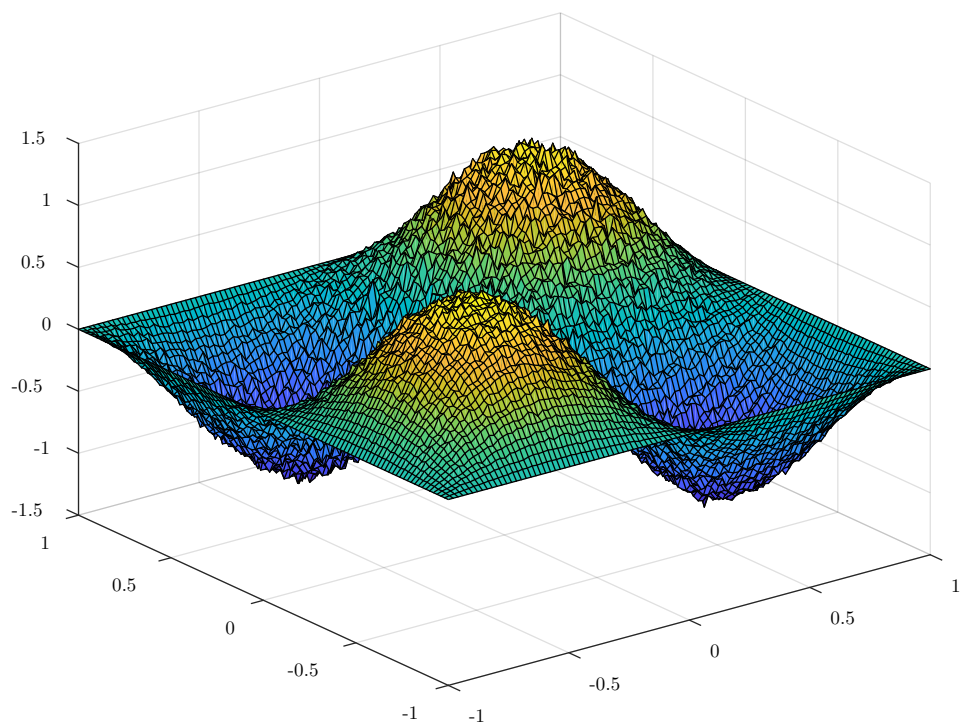


Abbildung 6.10: Lösung der PDE 1 bei gewichtetem Greedy-Verfahren

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.

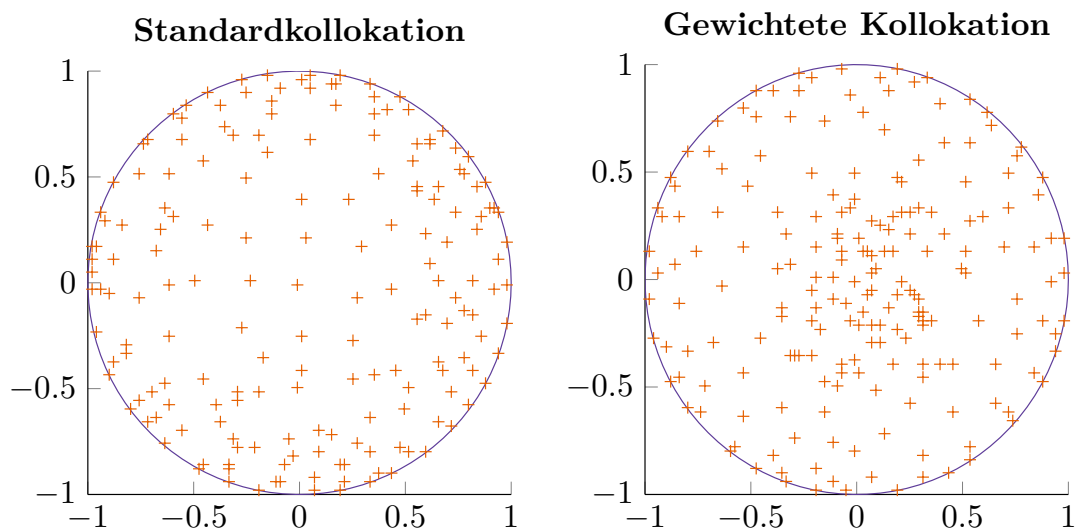


Abbildung 6.11: Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 2

6.1.2. Fehler bei einer anderen Gewichtsfunktion

Wir haben gesehen, dass die gewichteten Verfahren bei der ersten PDE vergleichsweise schlechte 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:

$$w(x) := \sin\left(\frac{\pi}{2}(x_1 + 1)\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}(x_2 + 1)\right)$$

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: Die Kollokationspunkte sind hier wieder auf einem Gitter gewählt.

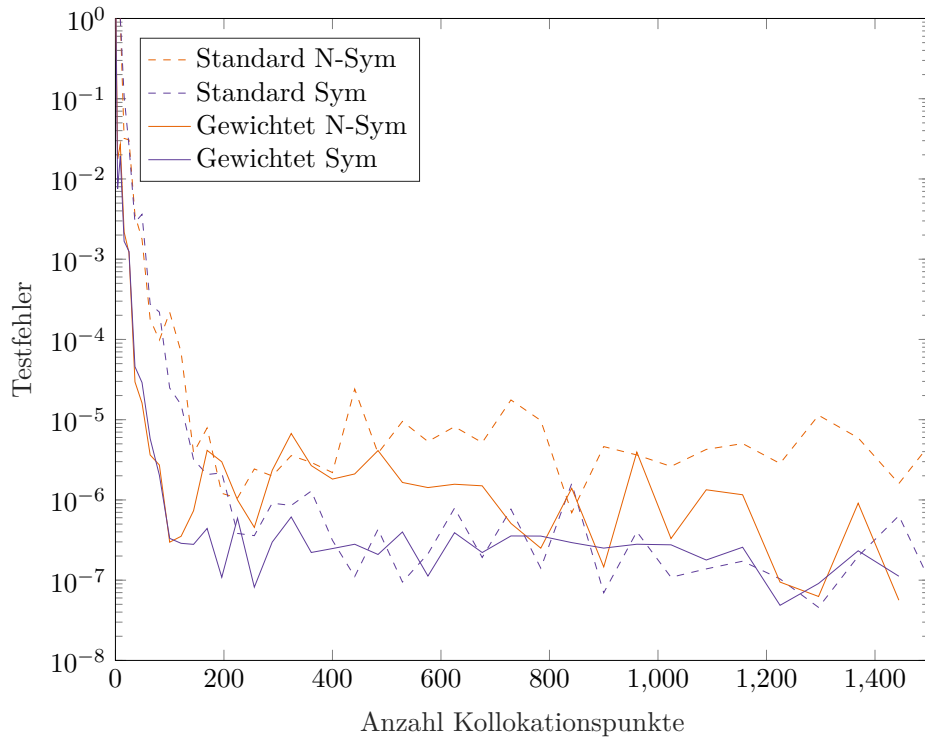


Abbildung 6.12: Testfehler der ersten PDE bei einer anderen Gewichtsfunktion

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 Sinn erfüllt, das heißt ob die Lösung auf dem Rand auch wirklich Null ist. Dafür plotten wir eine mit dem Stan-

dardverfahren und eine mit dem gewichteten Verfahren erstellte Lösung der ersten PDE in Abbildung 6.13 über einen Teil des Randes.

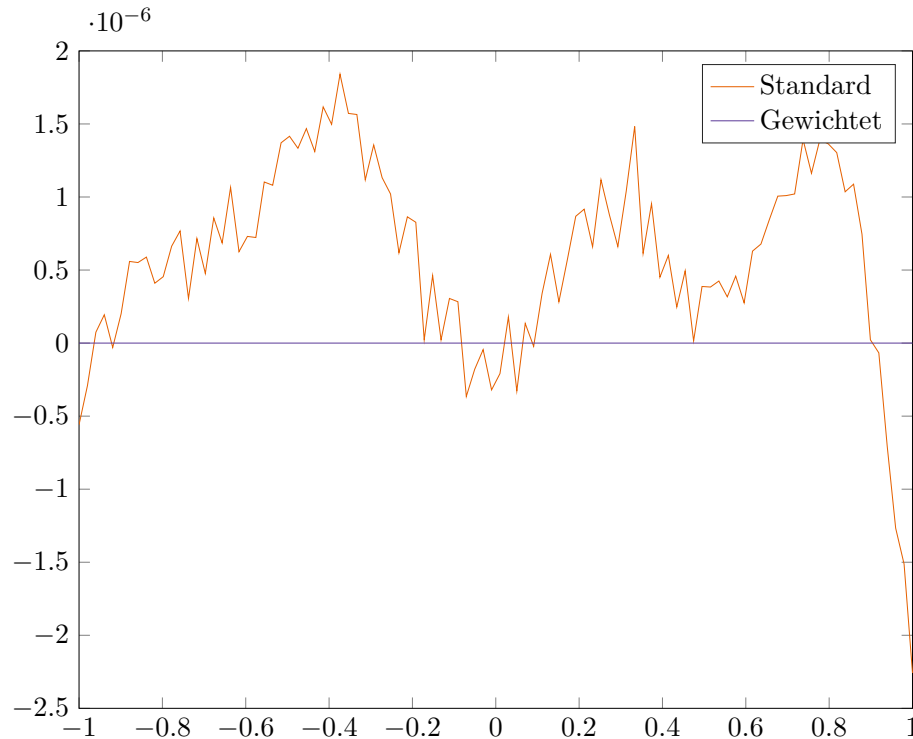


Abbildung 6.13: Plot über den Rand

Bei der Standardkollokation sind deutliche Schwankungen auf dem 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 Testfehler bis auf wenige Ausreißer konstant bleibt. Demnach spielt die Wahl der Validationspunkte keine zu große Rolle, solange sie einigermaßen gleichmäßig über

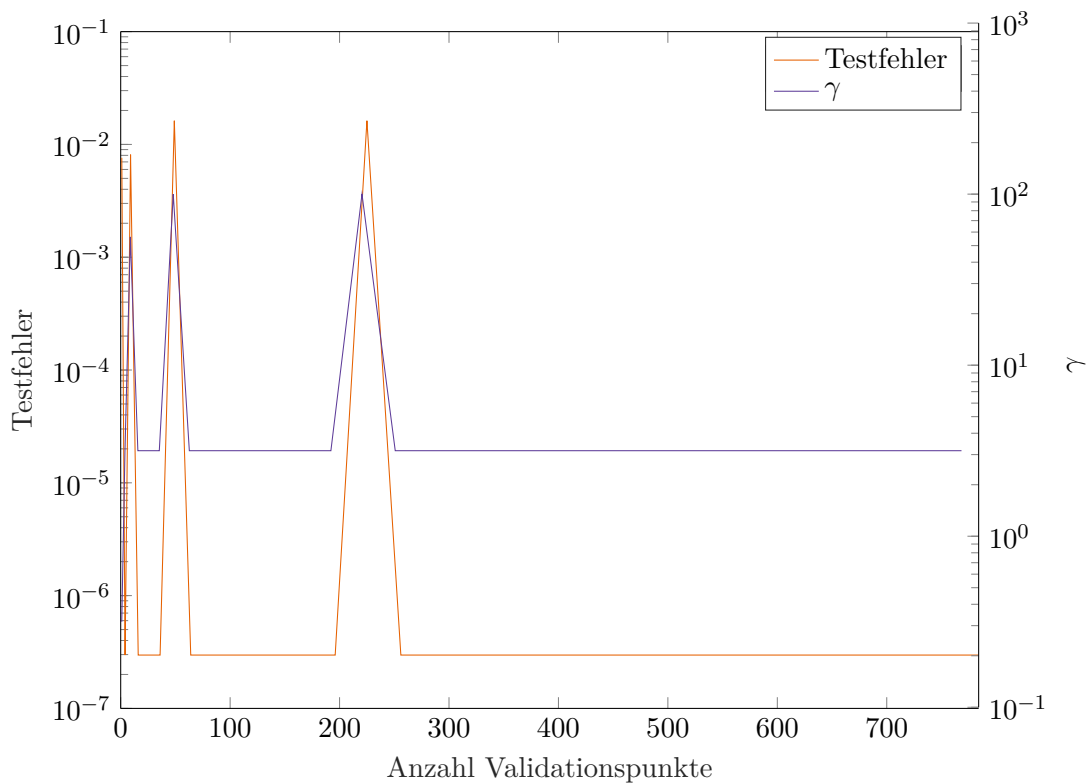


Abbildung 6.14: Testfehler und γ -Werte bei unterschiedlichen Anzahlen von Validationspunkten

das Gebiet verteilt sind. Die großen Testfehler entstehen genau dann, wenn alle Validationspunkte mit den Kollokationspunkten zusammenfallen. 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 Lösung, die an den Testpunkten extrem gut angepasst ist, ansonsten der echten Lösung aber kaum ähnlich sieht.

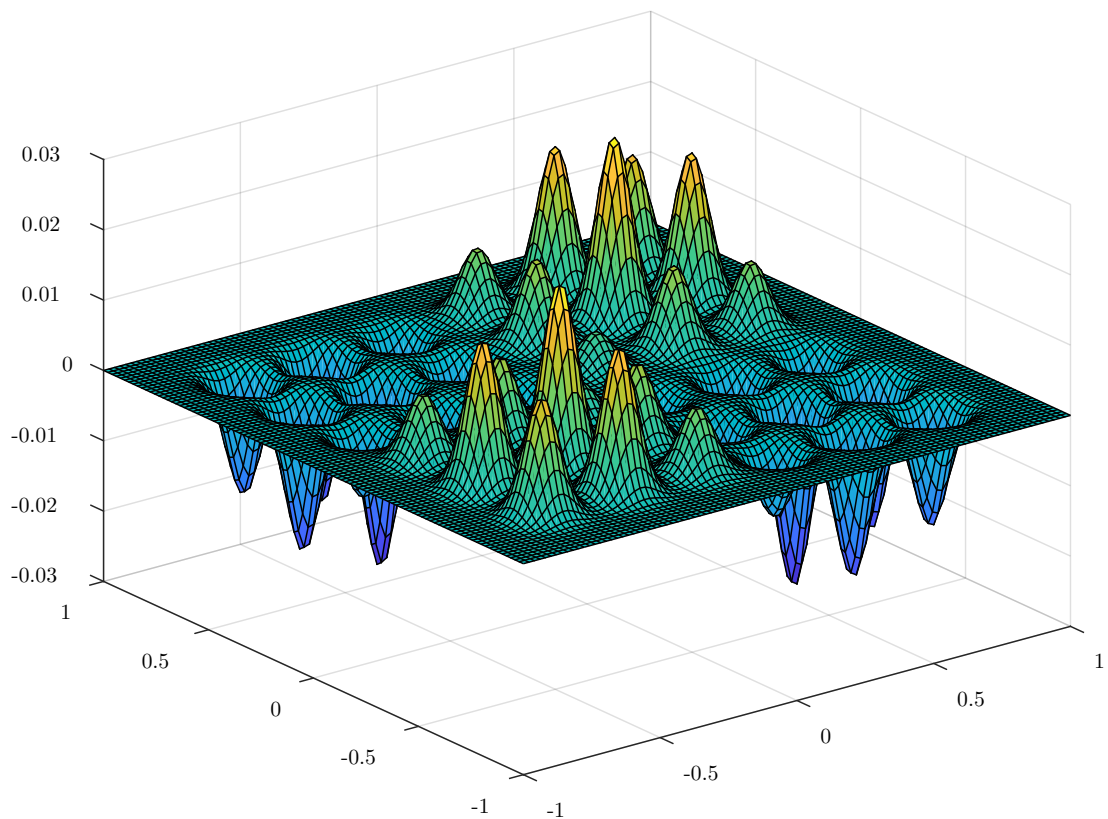


Abbildung 6.15: Lösung bei Überanpassung

6.1.5. Ein Beispiel in vier Dimensionen

Wir möchten in diesem Abschnitt einen kurzen Blick auf ein höherdimensionales Beispiel werfen. Dafür betrachten wir folgende PDE:

Sei $\Omega := (-1, 1) \times (-1, 1) \times (-1, 1) \times (-1, 1) \subset \mathbb{R}^4$ und folgende PDE gegeben:

$$\begin{aligned} -\Delta u(x) &= 4\pi^2 \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) \sin(\pi x_3) \sin(\pi x_4) & x \in \Omega \\ u(x) &= 0 & x \in \partial\Omega \end{aligned}$$

Sie hat die analytische Lösung

$$u(x) = \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) \sin(\pi x_3) \sin(\pi x_4).$$

Für die Gewichtsfunktion verwenden wir den in Kapitel 6.1.2 vorgestellten Ansatz einer Gewichtsfunktion, die nur in einer Umgebung von Ω gegeben ist:

$$w(x) := \sin\left(\frac{\pi}{2}(x_1 + 1)\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}(x_2 + 1)\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}(x_3 + 1)\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}(x_4 + 1)\right)$$

Wir benutzen den Gauß Kern und zufällige Kollokationspunkte. Außerdem betrachten wir aufgrund ihrer simpleren Implementierung nur die gewichtete Kollokation, da sie keine Punkte auf dem Rand benötigt. Der Testfehler ist in Abbildung 6.16 dargestellt.

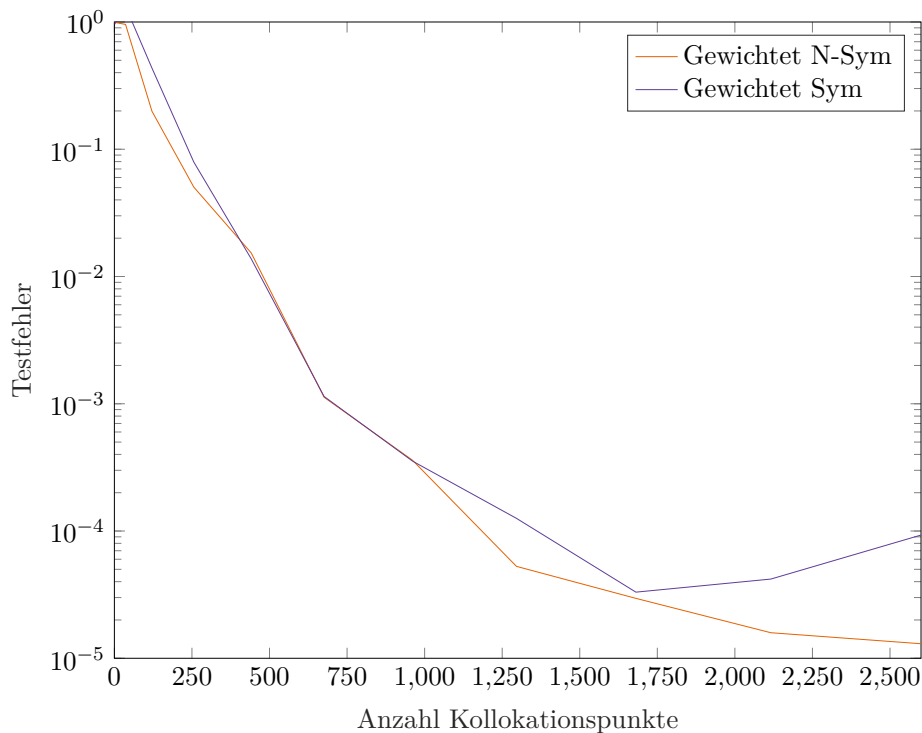


Abbildung 6.16: Fehlerplot einer PDE in vier Dimensionen

Wir erkennen zunächst, dass unsere Verfahren auch in vier Dimensionen funktionieren und gegen die analytische Lösung konvergieren. Wir vergleichen die Ergebnisse hier mit denen aus 6.12, da die PDE und die gewählte Gewichtsfunktion dort vergleichbar sind. Allerdings sehen wir im Vergleich zum zweidimensionalen Fall eine deutlich langsamere Konvergenz, was durch die höhere Dimension auch zu erwarten ist. Demnach benötigen wir in höheren Dimensionen mehr Kollokationspunkte für gute Ergebnisse. Außerdem erreichen wir insgesamt nur einen Fehler von ungefähr 10^{-5} , was schlechter ist als die Ergebnisse in zwei Dimensionen. Dies ist aber nicht zwangsläufig auf die Dimension zurückzuführen, sondern auch auf die

komplizierteren Terme in der Gewichtsfunktion und der rechten Seite der PDE, die wir im vierdimensionalen Fall gegeben haben.

6.2. Parameterwahl und Kondition

Wir werden in Abbildung 6.17 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.

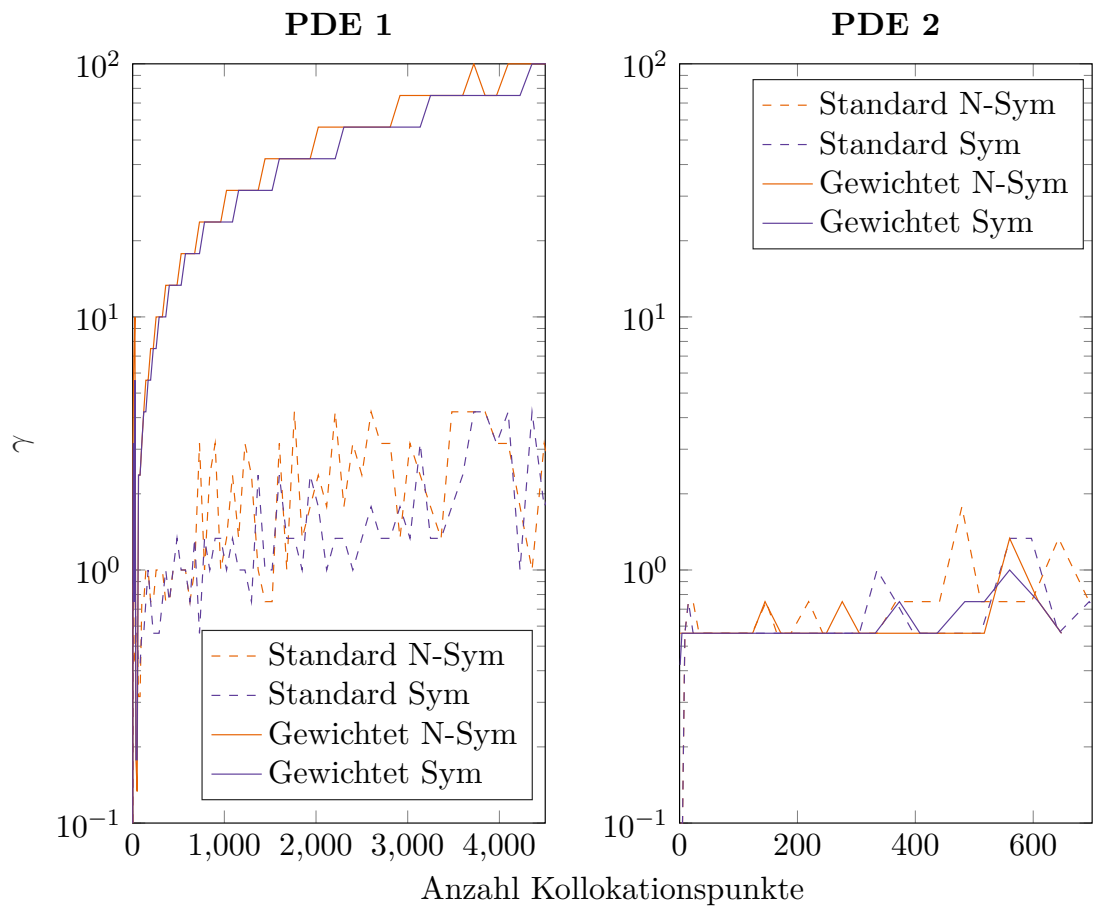


Abbildung 6.17: Gewählter Parameter γ

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 Testfehler 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 6.18 ist bei gleichbleibenden Kollokationspunkten der Testfehler beider PDEs bei unterschiedlichen Parametern γ dargestellt. Daraus erkennt man, dass der Testfehler groß

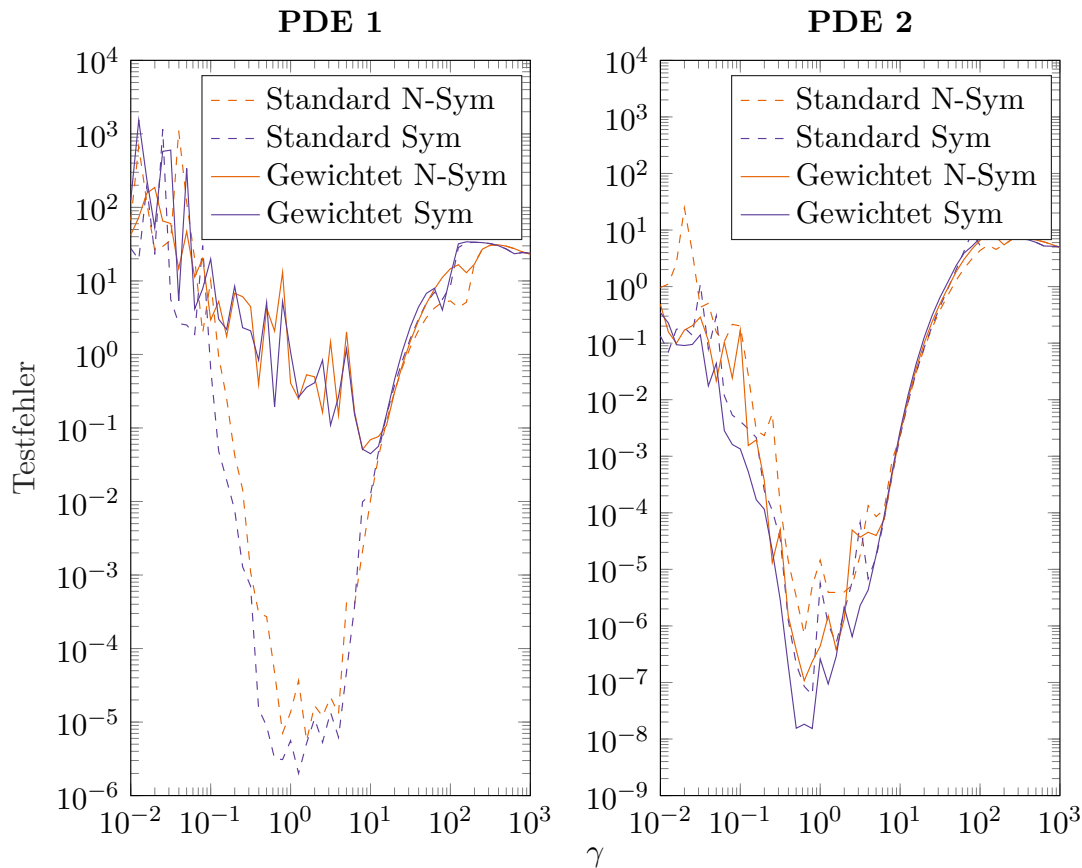
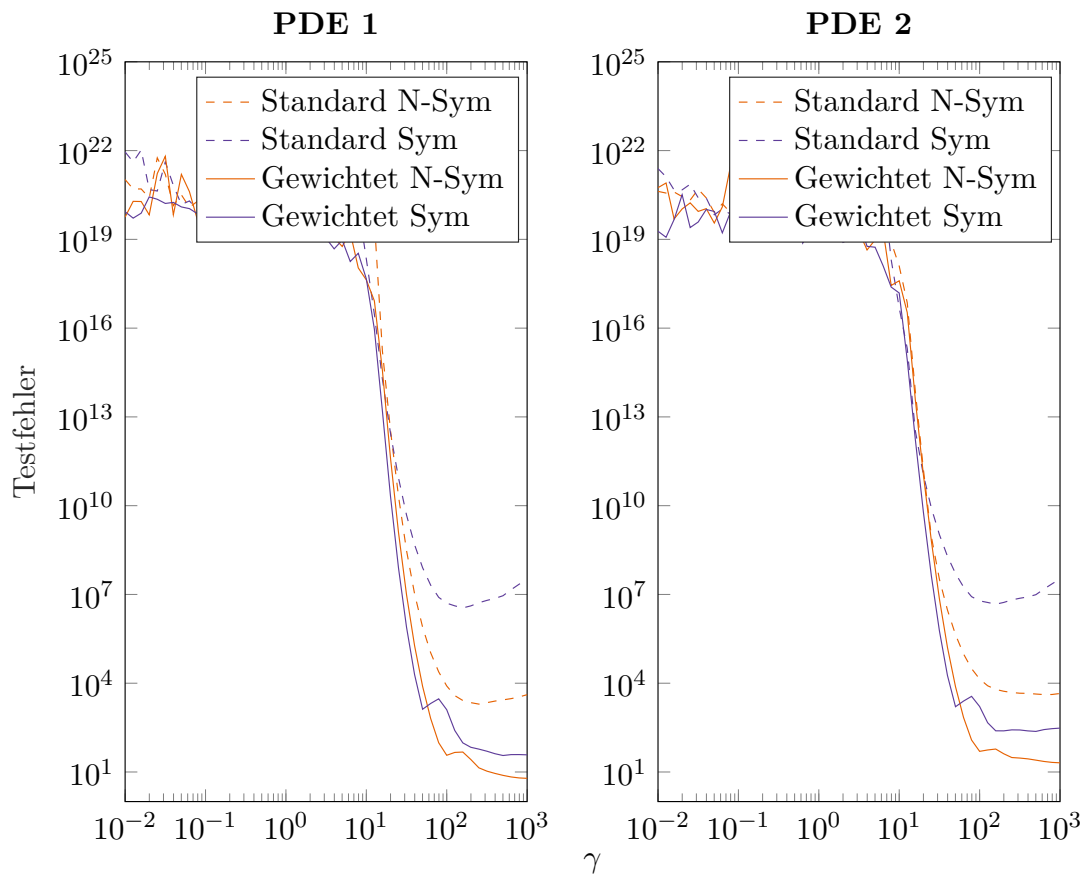


Abbildung 6.18: Fehler bei verschiedenen Parametern γ

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 Testfehler für zu kleines γ lässt sich besser erklären, wenn man noch die Kondition hinzunimmt. Diese ist in Abbildung 6.19 dargestellt. Die Kondition ist für kleine γ groß. Das kommt daher, dass jede Ansatzfunktion „Einfluss“ auf viele Kollokationspunkte hat. Das erklärt den großen Testfehler für zu kleine γ . Für große γ ist die Kondition wesentlich besser, da jede Ansatzfunktion auf weniger

Abbildung 6.19: Kondition bei verschiedenen Parametern γ

Kollokationspunkte deutlichen „Einfluss“ hat, die Kollokationsmatrix nähert sich damit einer Diagonalmatrix an. Es lässt sich schließlich erkennen, dass der Testfehler 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 größere Testfehler erkennbar.

6.3. Laufzeit

Jetzt 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 6.20 ist für die erste PDE die Laufzeit bei unterschiedlich vielen auf einem Gitter verteilten Kollokationspunkte dargestellt.

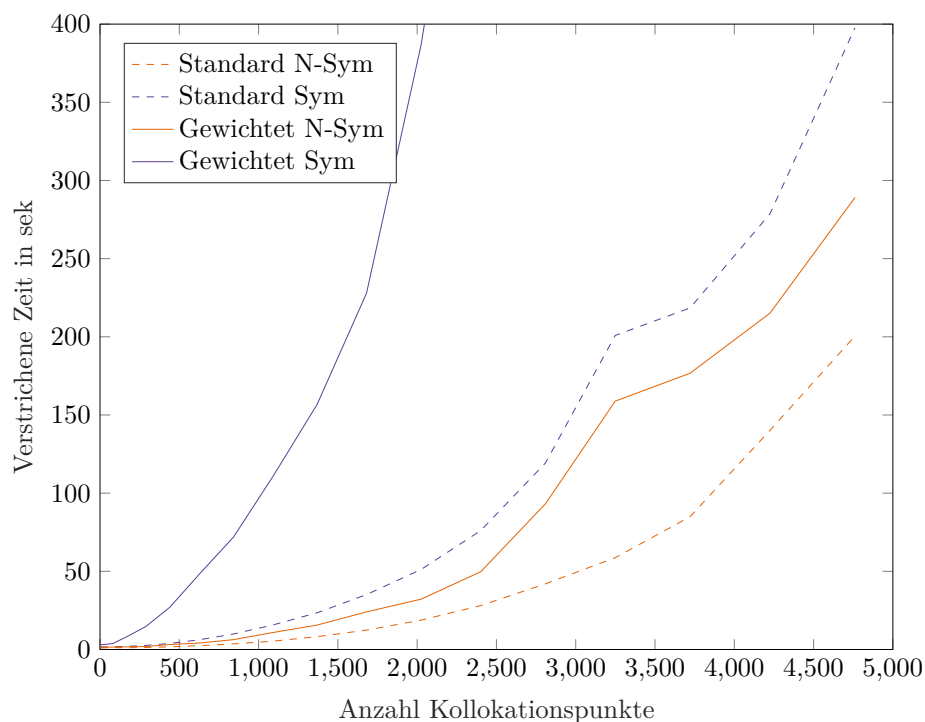


Abbildung 6.20: Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren

Wir erkennen deutliche Unterschiede zwischen den verschiedenen Verfahren. Das nicht-symmetrische Standardverfahren ist durchgehend das schnellste. Danach kommt das nicht-symmetrische gewichtete 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 6.21 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.

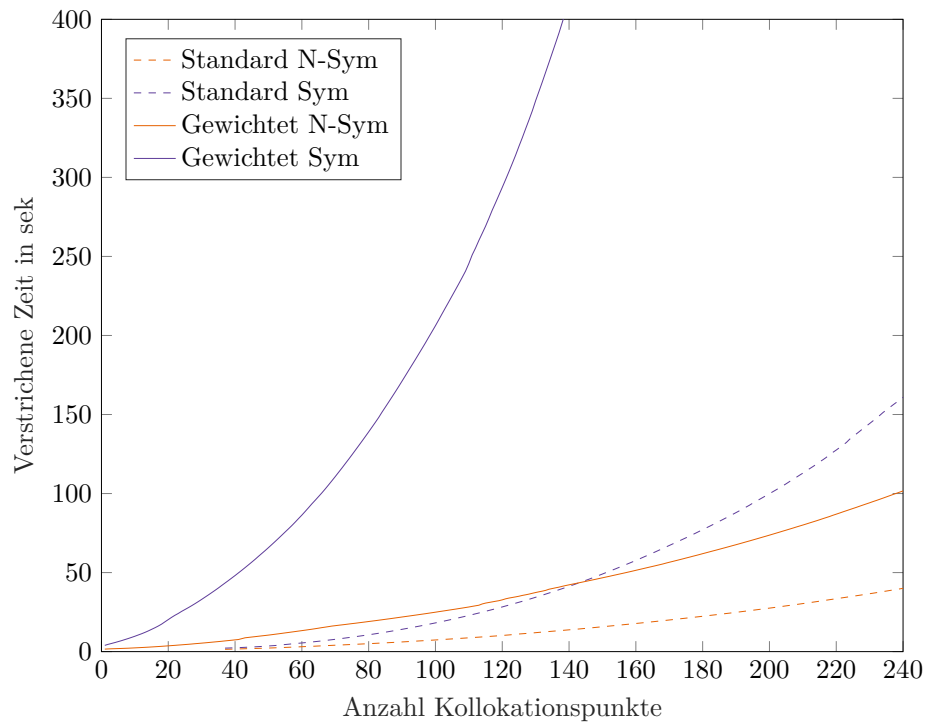


Abbildung 6.21: Laufzeit bei Greedy-Punktwahl

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 der finiten Elemente Methode

Die Kernkollokation bietet einige Vorteile gegenüber der FEM. Zunächst kann jene auch für höhere Dimensionen eingesetzt werden, wie wir in Kapitel 6.1.5 beispielhaft in vier Dimensionen gesehen haben, wobei die FEM praktisch nur für bis zu drei Dimensionen eingesetzt wird.

Außerdem hat die Kernkollokation 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. Wir sehen, dass selbst die gewichteten Kollokationsverfahren, die in diesem Fall vergleichsweise schlecht abgeschnitten haben, einen geringeren Fehler als die FEM haben.

	$n = 183$	$n = 689$	$n = 2673$
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}

Tabelle 6.1: Vergleich FEM mit Kernkollokation

Zusammenfassung und Ausblick

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, bei 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 sehr schlechte Ergebnisse geliefert. Diese Beobachtung haben wir auf Singularitäten der partiellen Ableitungen der Gewichtsfunktionen zurückgeführt. Bei der gewichteten Kollokation haben wir beobachtet, dass die Werte auf dem Rand tatsächlich genau angenommen werden.

Wir haben außerdem verschiedene Möglichkeiten der Kollokationspunktwahl untersucht. Dabei haben wir festgestellt, dass eine Greedy-Punktwahl, in den Fällen in denen sie funktioniert, bezüglich der Anzahl der Kollokationspunkte, die geschickteste der vorgestellten Wahlmöglichkeiten ist. Hier wäre es noch interessant einen anderen Fehlerschätzer zur Punktwahl zu testen, um zu schauen, ob dadurch andere Ergebnisse erzielt werden. Außerdem wäre eine

Greedy-Punktwahl wünschenswert, 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 Kernkollokation zum Großteil nur in zwei Dimensionen getestet, haben aber gesehen, dass einer Umsetzung in höheren Dimensionen nichts im Wege steht. Dies haben wir allerdings nur kurz angeschnitten und dort wären noch weitere Tests nötig, um auf eine größere Allgemeingültigkeit zu schließen.

Abschließend lässt sich sagen, dass wir unser Ziel erreicht und die Kernkollokation so erweitert haben, dass sie auf dem ganzen Rand eine exakte Lösung liefert. Dafür zahlen wir aber in manchen Fällen den Preis, dass wir im Inneren an Genauigkeit verlieren.

Literatur

- [1] R. A. Horn und C. R. Johnson. *Matrix analysis, second edition*. 2nd ed. Cambridge und New York: Cambridge University Press, 2013.
- [2] G. Santin. *Approximation with Kernel Methods Vorlesungsskript*. Stuttgart, 2017.
- [3] H. Wendland. *Scattered data approximation*. Bd. 17. Cambridge monographs on applied and computational mathematics. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- [4] W. Kaballo. *Grundkurs Funktionalanalysis*. 2. Auflage. Lehrbuch. Berlin: Springer Spektrum, 2018.
- [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.
- [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.



Anhang

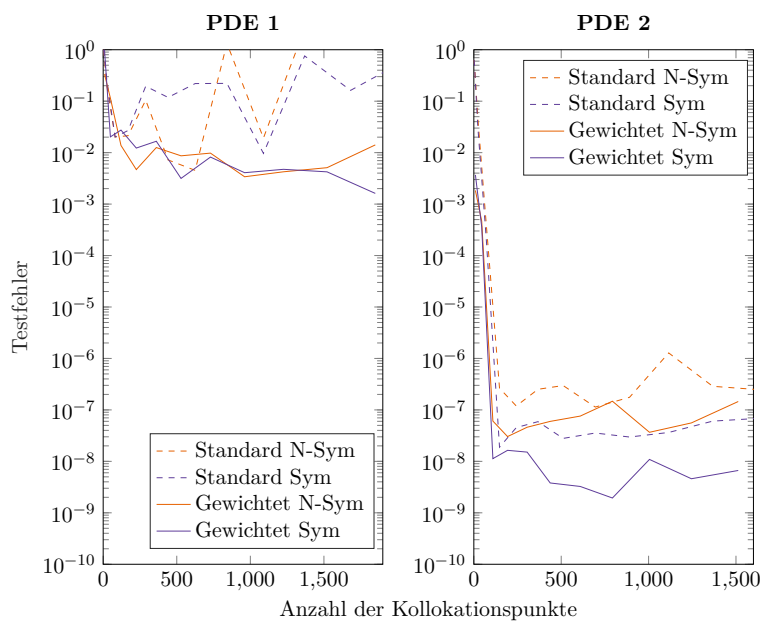


Abbildung A.1: Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter beim Wendland Kern

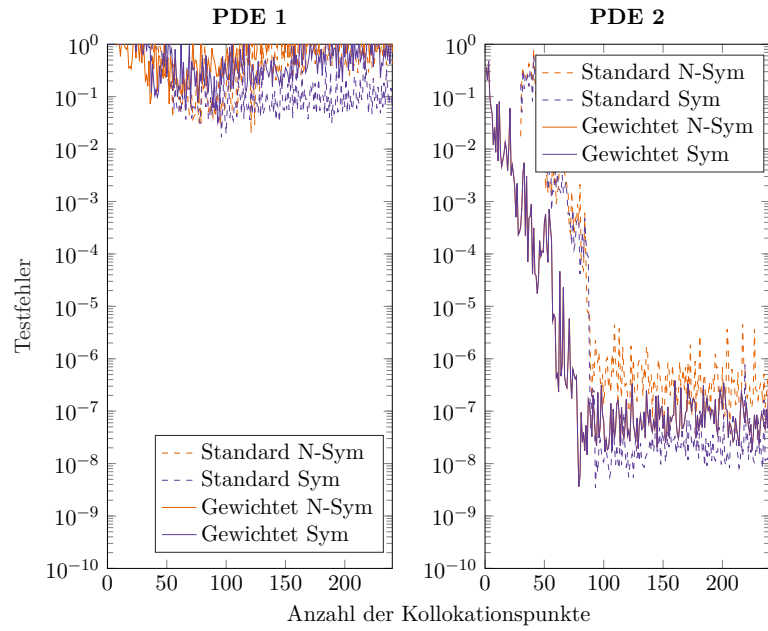


Abbildung A.2: Testfehler bei Kollokationspunkten mit einer Greedy-Punktwahl beim Wendland Kern

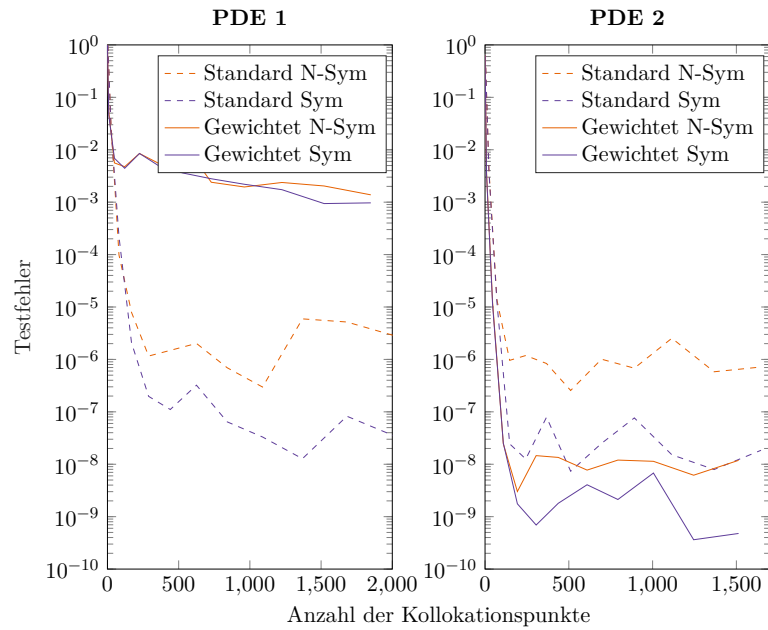


Abbildung A.3: Testfehler bei Kollokationspunkten auf einem Gitter bei absolutem Fehlerschätzer

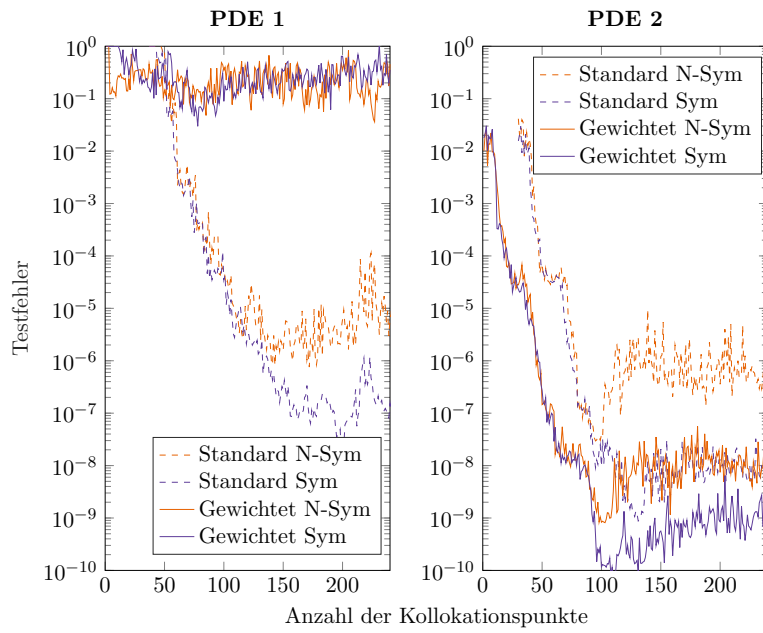


Abbildung A.4: Testfehler bei Kollokationspunkten mit einer Greedy-Punktwahl bei absolutem Fehlerschätzer