

Bachelorarbeit

Elliptische 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:	18. September 2018

Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation der Universität
Stuttgart.

IANS

September 2018

Bachelor's Thesis

Elliptic 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: 18th September 2018

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

IANS

September 2018

Zusammenfassung

Stichwörter:

Abstract

Keywords:

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	i
Abstract	iii
Akronyme	vii
Abbildungsverzeichnis	ix
Tabellenverzeichnis	xi
1 Einleitung	1
2 Kerne und reproduzierende Kern Hilberträume	3
3 Standardkollokation	13
3.1 Symmetrische Kollokation	13
3.2 Nicht-Symmetrische Kollokation	15
4 Gewichtete Kollokation	17
4.1 Motivation für die gewichtete Kollokation	17
4.2 Gewichtsfunktionen	19
4.3 Symmetrische Kollokation	22
4.4 Nicht-Symmetrische Kollokation	25
5 Implementierung	27
6 Numerische Tests	31
6.1 Fehler	32
6.1.1 Absoluter Fehler	32
6.1.2 Fehler auf dem Rand	37
6.1.3 Testpunkte	38
6.2 Parameterwahl und Kondition	41
6.3 Laufzeit	41
Literatur	45

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	18
5.1	Plots verschiedener Kerne	28
6.1	Lösung der PDE	32
6.2	Kollokationspunkte	33
6.3	Fehler bei Kollokationspunkten auf Gitter	34
6.4	Fehler bei zufällig verteilten Kollokationspunkten	35
6.5	Fehler beim Greedy-Verfahren	36
6.6	Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren	37
6.7	Lösung bei gewichtetem Greedy-Verfahren	38
6.8	Rand bei gewichteter Kollokation	39
6.9	Fehler bei unterschiedlicher Anzahl an Testpunkten	39
6.10	Gammawerte bei unterschiedlicher Anzahl an Testpunkten	40
6.11	Lösung bei Überanpassung	41
6.12	Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren	42
6.13	Laufzeit bei Greedy-Punktwahl	43

Tabellenverzeichnis

Liste der noch zu erledigenden Punkte

KAPITEL 1

Einleitung

Einleitung

In dieser Bachelorarbeit stellen wir ein Verfahren zur numerischen Lösung 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 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.

Kerne und reproduzierende Kern Hilbert- räume

Grundlagen

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 $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, in dem 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 $u \in C^k(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega})$ 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 und B ein linearer Randwertoperator 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, in dem 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. 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] auch das Produkt der beiden.

□

ex:Kern

Beispiel 2.5. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 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

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].

□

Die Definition der Kerne führt uns direkt zu den gesuchten Hilberträumen. Diese sind zunächst ohne Bezug zu Kernen 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.

igkeitsKern

Satz 2.7. Sei \mathcal{H} ein RKHS 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:

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

K ist somit PD.

Seien jetzt K_1, K_2 zwei Kerne auf \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 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. Der Abschluss dessen ist der gesuchte RKHS. \square

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 .

Zur Wohldefiniertheit unserer Interpolation benötigen wir die Stetigkeit aller verwendeten Funktionalen. Zunächst betrachten wir die Punktauswertungsfunktionalen.

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 Auswertungsfunktionalen 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 ist SPD 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. □

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. \square

Jetzt betrachten wir die lineare Unabhängigkeit der Auswertungen der Ableitungen:

linUn **Satz 2.14.** *Sei K ein translationsinvarianter Kern auf \mathbb{R}^d , also $K(x, y) = \Phi(x - y)$ 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 Wendland [2, Theorem 16.4]. \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

kollokation

3.1 Symmetrische Kollokation

sec:SymKol

Sei wieder $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und beschränkt, L und B lineare Differentialoperatoren, K 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. [4].

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

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

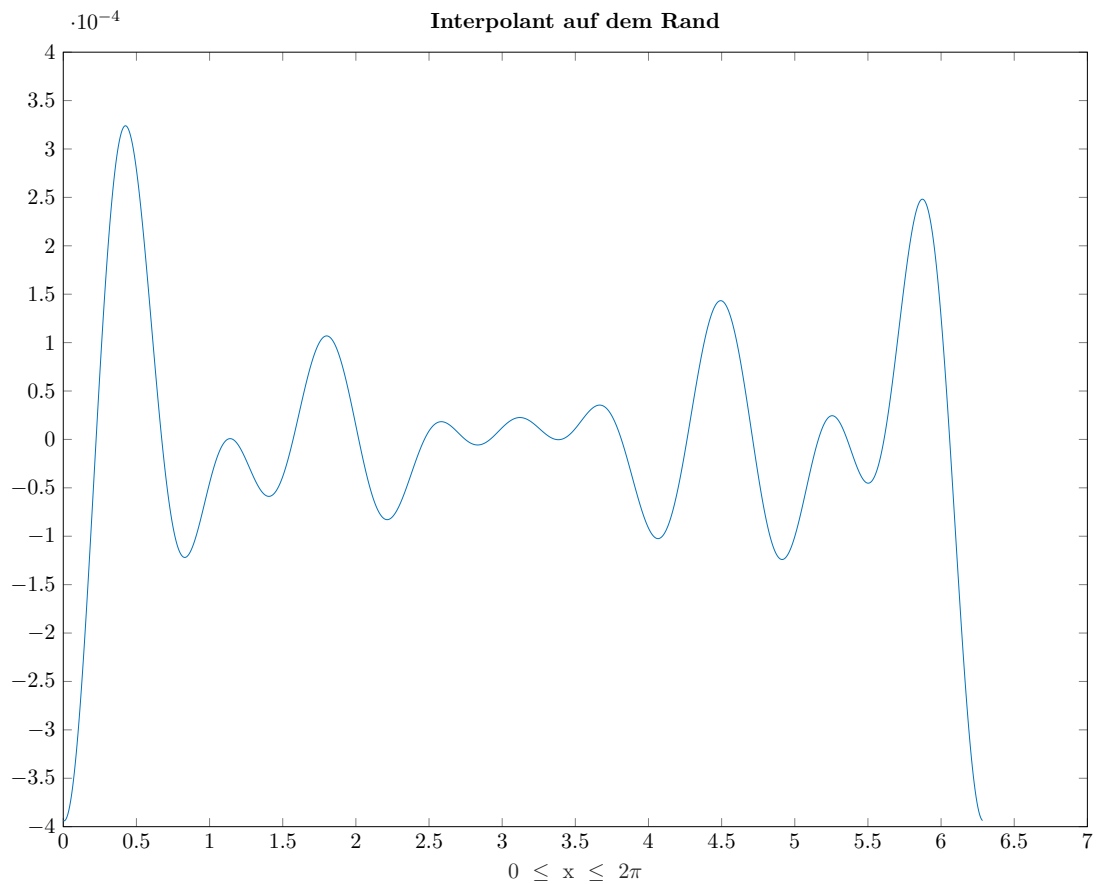


fig:rand

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, welcher 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.

4.2 Gewichtsfunktionen

sec:gewicht

Definition 4.1. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 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 $\Omega_1, \Omega_2 \subset \mathbb{R}^n$ 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 $x \in \Omega = \mathbb{R}^n \setminus \bar{\Omega}_1$.

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

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

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

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

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

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 PD Kern und $g : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \setminus \{0\}$ eine Funktion. Dann ist

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

ein PD 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. Den ersten Teil des Beweises findet man auch in Santin [3, Proposition 2.7].

Wir zeigen zunächst, dass $\tilde{K}(x, y) := g(x)g(y)$ ein PD Kern ist.

Die Symmetrie erhalten wir mit

$$\tilde{K}(x, y) = g(x)g(y) = g(y)g(x) = \tilde{K}(y, x).$$

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

$$A = \begin{pmatrix} g(x_1)g(x_1) & \cdots & g(x_1)g(x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g(x_N)g(x_1) & \cdots & g(x_N)g(x_N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(x_1) \\ \vdots \\ g(x_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g(x_1) & \cdots & g(x_N) \end{pmatrix} := \bar{g}\bar{g}^T$$

und damit für alle $\alpha \neq 0$

$$\alpha^T A \alpha = \alpha^T (\bar{g}\bar{g}^T) \alpha = (\alpha^T \bar{g}) (\bar{g}^T \alpha) = \|\bar{g}^T \alpha\|^2 \geq 0.$$

Also ist \tilde{K} ein PD Kern.

Nach Satz 2.4 ist $K(x, y) = \tilde{K}(x, y)K'(x, y) = g(x)K'(x, y)g(y)$ ein PD 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 Definitionsbereichs konstant Null ist, auf den wir eine analoge Konstruktion zu der aus Kapitel 3.1 anwenden können.

Dafür sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und beschränkt K' ein PD Kern, g 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. 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, allerdings haben wir dieses Mal keine zusätzliche Anforderung an die Ableitung der Gewichtsfunktion. 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. Wir erinnern uns an Beispiel 2.5, dass die Kerne einen Parameter γ besitzen. In Abbildung 5.1 ist der Gauß Kern $K(x, y) = \exp(-\gamma\|x - y\|^2)$ mit $y = 0$ und verschiedenen γ Werten geplottet. So können wir zur Parameterwahl eine ganze Familie an Kernen wählen, über die wir leicht iterieren können.

So erhält man nach Wahl von Kollokationspunkten X und Testpunkten X_{te} 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.
Testpunkte sind die Punkte, an denen wir den Fehler unserer Lösung bestimmen.
- 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.

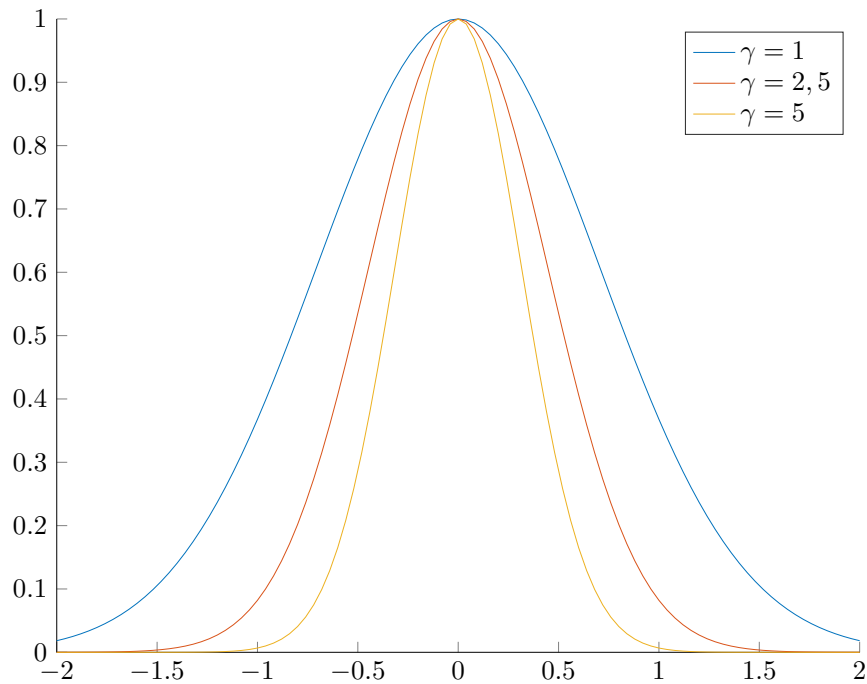


fig:Kerne

Abbildung 5.1: Plots verschiedener Kerne

Es ist noch offen wie wir die Kollokations- 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

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

- 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 der Ableitung 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

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

Algorithm 1 Grundlegender Algorithmus

```

1: function SOLVEPDE( $X, Xte, f, g$ )
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:      $\text{error} \leftarrow \text{CALCULATEERROR}(X, Xte, f, i)$ 
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

```

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 dann den Differentialoperator aus der PDE anwenden. Zwischen dieser Funktion und der rechten Seite der PDE kann man dann den maximalen Fehler in dem Definitionsgebiet bestimmen. An die Stelle, an der der maximale Fehler angenommen wird, wird der neue Kollokationspunkt gesetzt. Dieses Verfahren kann dann wiederholt werden.

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

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.

Dafür betrachten wir die Poisson-Gleichung mit Dirichlet-Randbedingung auf $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1] \subset \mathbb{R}^n$:

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

mit analytischer 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:

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

Diese werden wir mithilfe der Kernkollokation numerisch lösen. Dafür wählen wir den Gauß Kern aus Beispiel 2.5. Aufgrund der fehlenden Praxisrelevanz werden wir die erste in Kapitel 5 vorgestellte Methode zur Fehlerberechnung in jeder Iteration nicht betrachten, sondern nur die in der Ableitung.

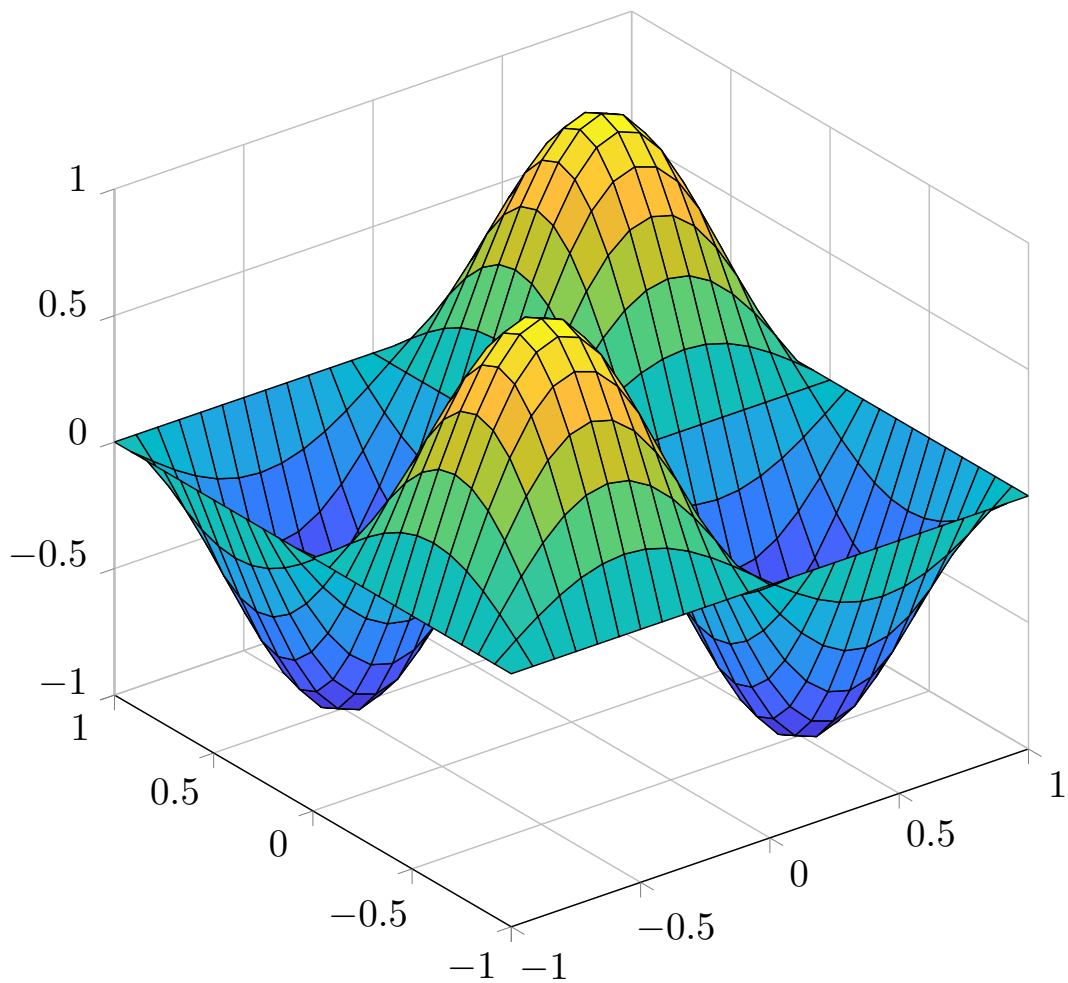


fig:plot

Abbildung 6.1: Lösung der PDE

6.1 Fehler

6.1.1 Absoluter Fehler

Als Maß des Fehlers unserer numerischen Lösung wollen wir zunächst 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.

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 Testpunkte, zunächst, wie in Abbildung 6.2 gezeigt, in einem Gitter anordnen.

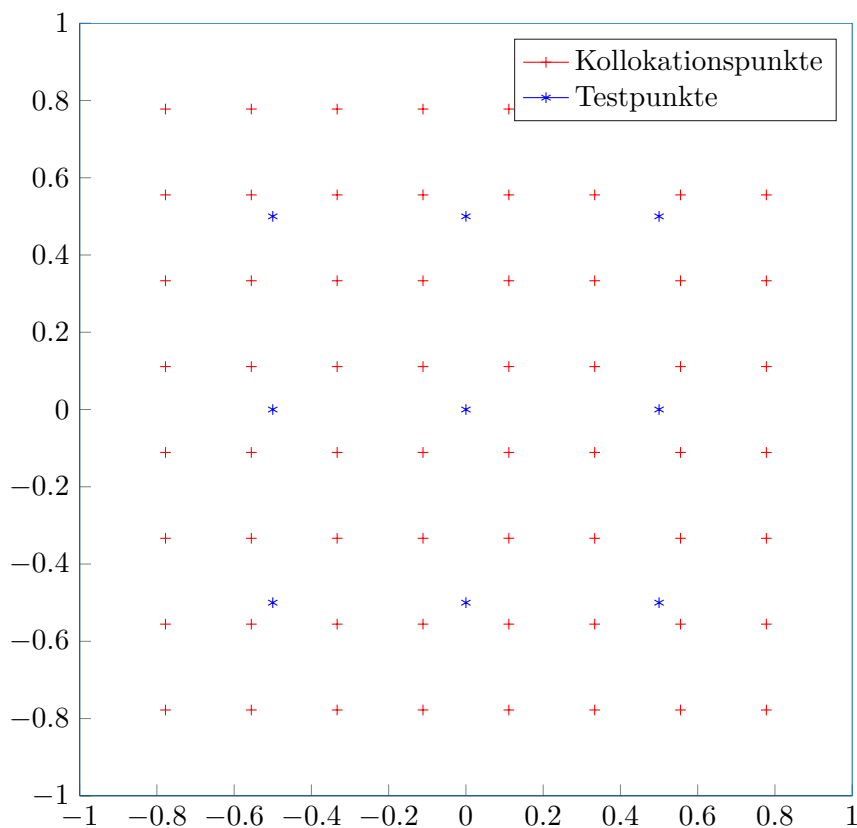


fig:Kollok

Abbildung 6.2: Kollokationspunkte

Damit können wir uns anschauen, wie sich der Fehler bei Verfeinerung des Gitters verhält. In Abbildung 6.3 ist der Fehler der vier verschiedenen Verfahren 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.

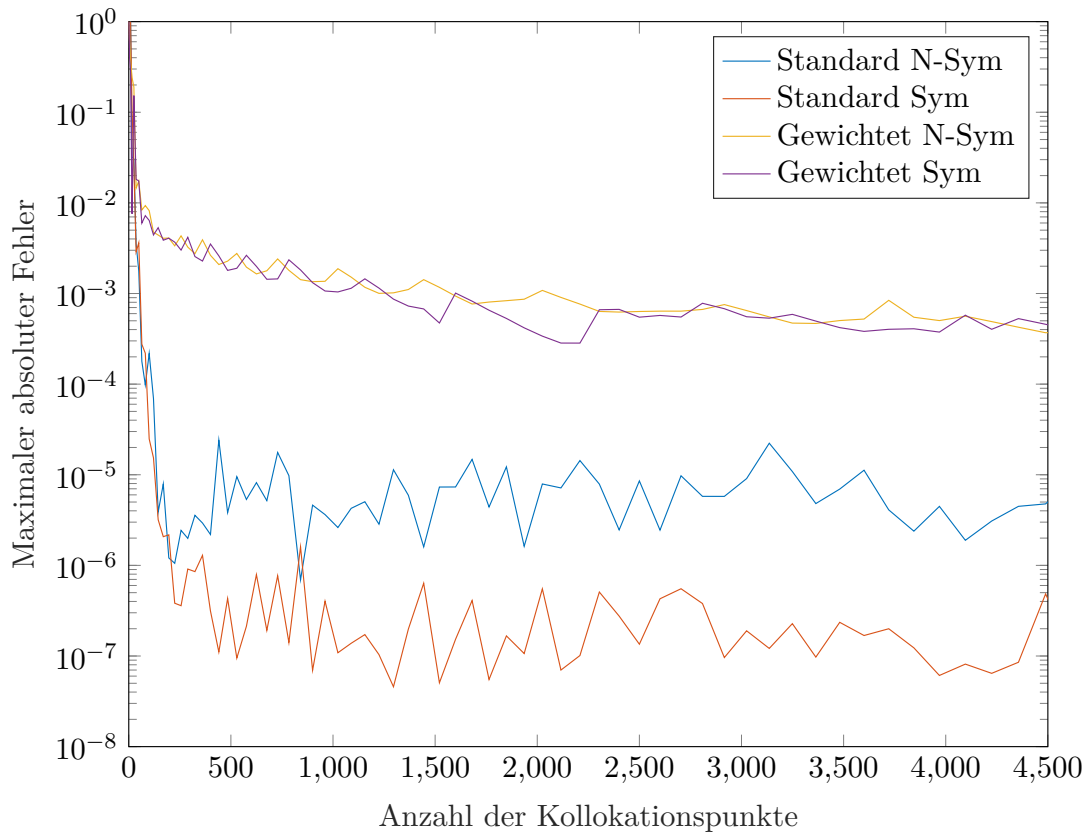


fig:error

Abbildung 6.3: Fehler bei Kollokationspunkten auf Gitter

Wir erkennen, dass alle Verfahren sehr schnell gute Ergebnisse liefern. Die beiden Standardverfahren liefern bereits mit nahezu 200 Kollokationspunkten ihre besten Ergebnisse 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 10^{-2} liefern, sich dann aber mit mehr Kollokationspunkten weiter verbessern, wenn auch ziemlich langsam. Gesamt erreichen die gewichteten Verfahren aber selbst mit 6000 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.

6.1.1.2 Zufällige Kollokationspunkte

Als nächstes schauen wir uns zufällig verteilte Kollokationspunkte an. In Abbildung 6.4 ist der Fehler bei unterschiedlich vielen zufällig verteilten Kollokationspunkten dargestellt.

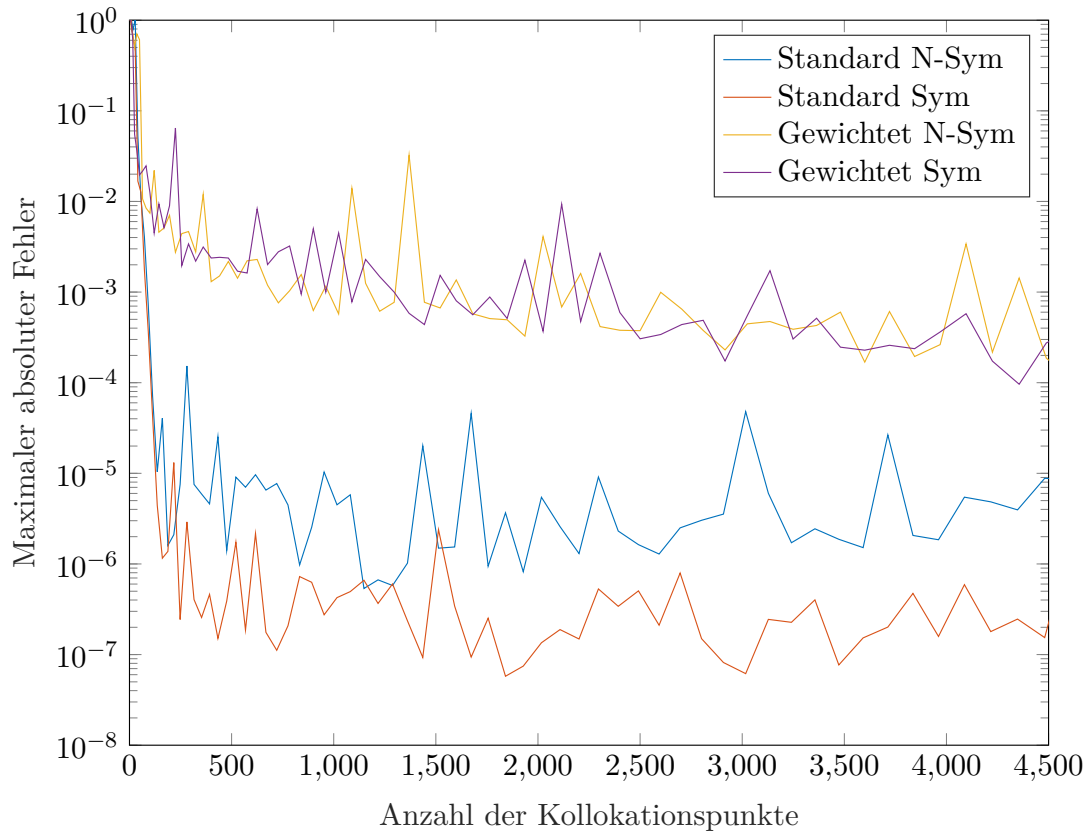


Abbildung 6.4: Fehler bei zufällig verteilten Kollokationspunkten

Auch hier stellt man fest, dass alle Verfahren vernünftige Ergebnisse liefern. Die Standardverfahren erreichen mit 200 Kollokationspunkten ihre besten Ergebnisse von rund 10^{-7} für die nicht-symmetrische Variante und 10^{-6} für die symmetrische und verbessern sich dann nicht mehr weiter. Die gewichteten Verfahren erreichen mit 200 Kollokationspunkten nur einen Fehler von rund 10^{-2} , verbessern sich aber mit mehr Kollokationspunkten noch leicht.

Vergleicht man die Fehler mit denen der Gitterpunktwahl, stellt man fest, dass diese sich in der gleichen Größenordnung bewegen. Allerdings weißt die Kurve der zufällig

gewählten Punkte mehrere Ausreißer nach oben auf. Diese sind auf eine zufällig schlechte Punktwahl zurückzuführen. Die zufälligen Punkte sind aber nie wesentlich besser als die Gitterpunkte, von daher lässt sich bezüglich des Fehlers kein Vorteil für zufällig gewählte Kollokationspunkte feststellen.

6.1.1.3 Greedy-Punktwahl

Zuletzt schauen wir uns in Abbildung 6.5 mit einer Greedy-Punktwahl gesetzte Kollokationspunkte an. Es ist zu beachten, dass bei der benutzten Implementierung bei den Standardverfahren auf dem Rand festgesetzte Kollokationspunkte benutzt werden. Deswegen beginnen die Graphen der beiden Standardverfahren erst bei 37.

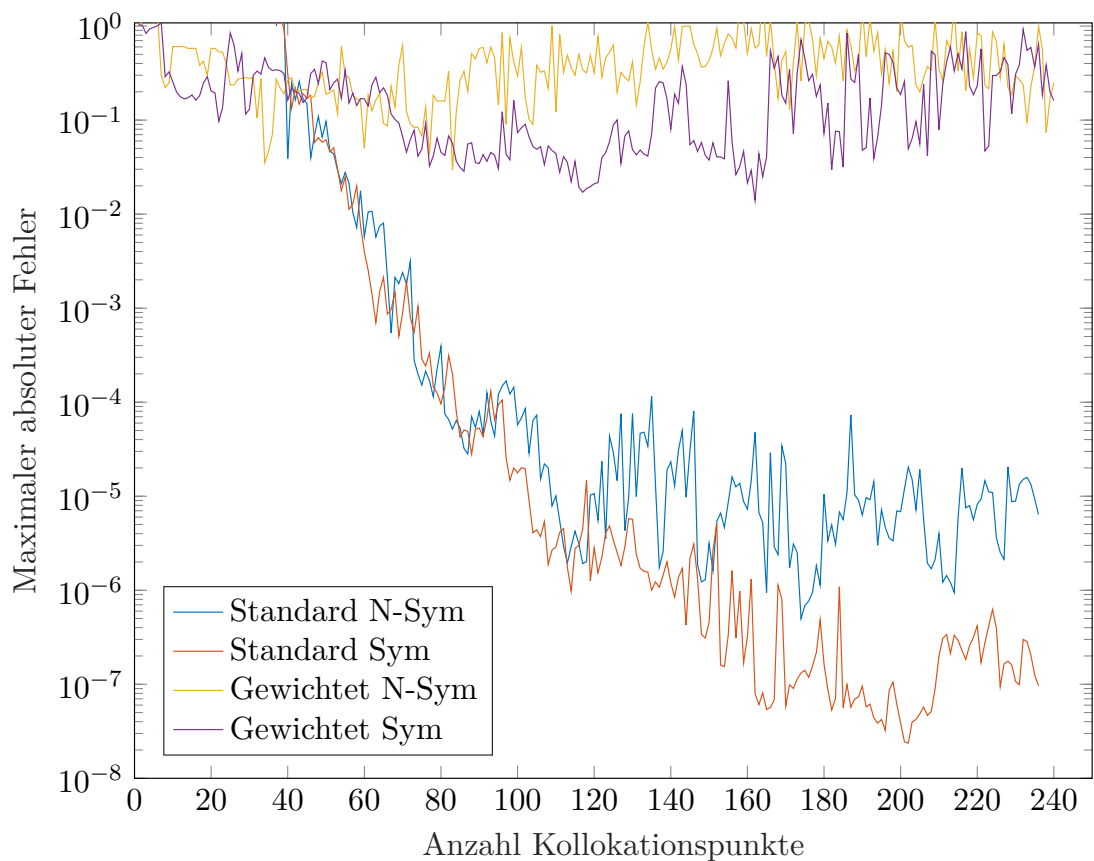


Abbildung 6.5: Fehler beim Greedy-Verfahren

fig:error-greedy

Wir erkennen, dass nur die Standardverfahren vernünftige Ergebnisse liefern. Diese pendeln sich nach ungefähr 110 Kollokationspunkten für das nicht-symmetrische Verfahren bei einem Fehler von rund 10^{-5} und nach ungefähr 160 Iterationen für das symmetrische bei einem Fehler von rund 10^{-7} ein. Damit benötigt die Greedy-Punktwahl jeweils 80 und 320 Kollokationspunkte weniger, um das gleiche Ergebnis wie 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 6.6 dargestellt.

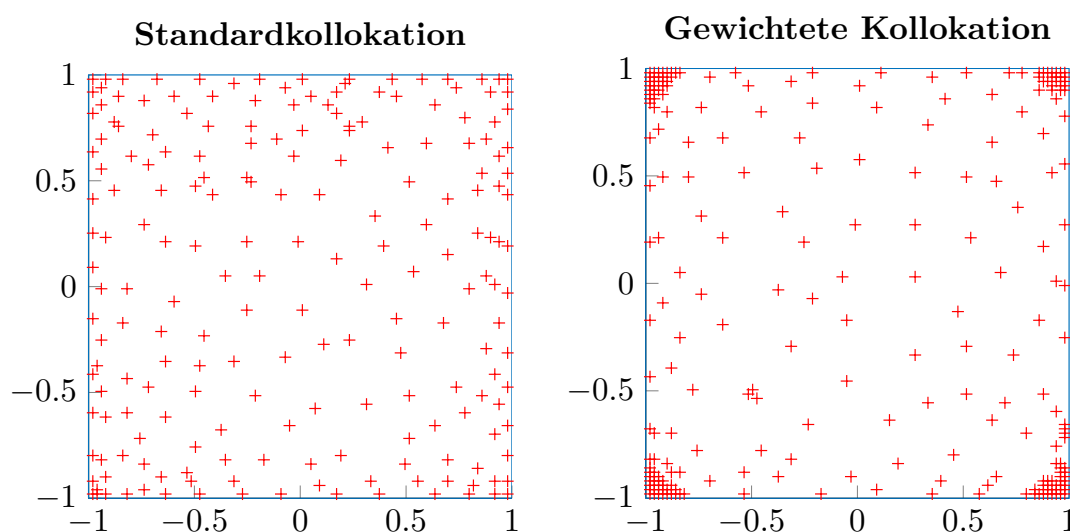


Abbildung 6.6: Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren

Man erkennt, dass die Kollokationspunkte im Standard Fall gleichmäßig über das Einheitsquadrat verteilt sind, sich im gewichteten Fall allerdings in den Ecken drängen. Dies führt zu einer in Abbildung 6.7 erkennbaren numerisch verrauschten Lösung. Das gewichtete Greedy-Verfahren ist demnach unbrauchbar.

6.1.2 Fehler auf dem Rand

Wir möchten nun überprüfen, ob die gewichtete Kollokation ihren Sinn erfüllt, d.h. ob die Lösung auf dem Rand auch wirklich Null ist. Dafür plotten wir eine mit dem

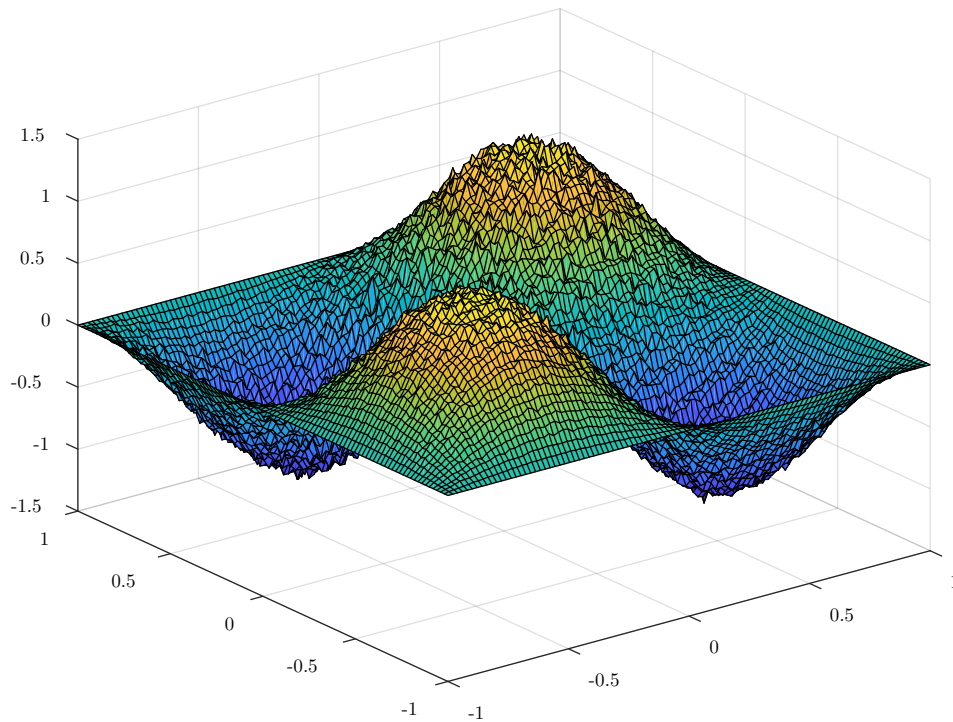


Abbildung 6.7: Lösung bei gewichtetem Greedy-Verfahren

greedy-verrauscht

Standardverfahren erstellte Lösung und eine mit dem gewichteten Verfahren erstellte Lösung in Abbildung 6.8 über einen Teil des Randes.

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

6.1.3 Testpunkte

Wir sind bisher nur auf die Wahl der Kollokationspunkte eingegangen, aber noch nicht auf die der Testpunkte. Dafür stellen wir den Fehler unserer numerischen Lösung in Abbildung 6.9 bei gleichbleibenden Kollokationspunkten, aber bei unterschiedlichen Anzahlen von Testpunkten dar. Diese sind auch hier wieder in einem Gitter angeordnet.

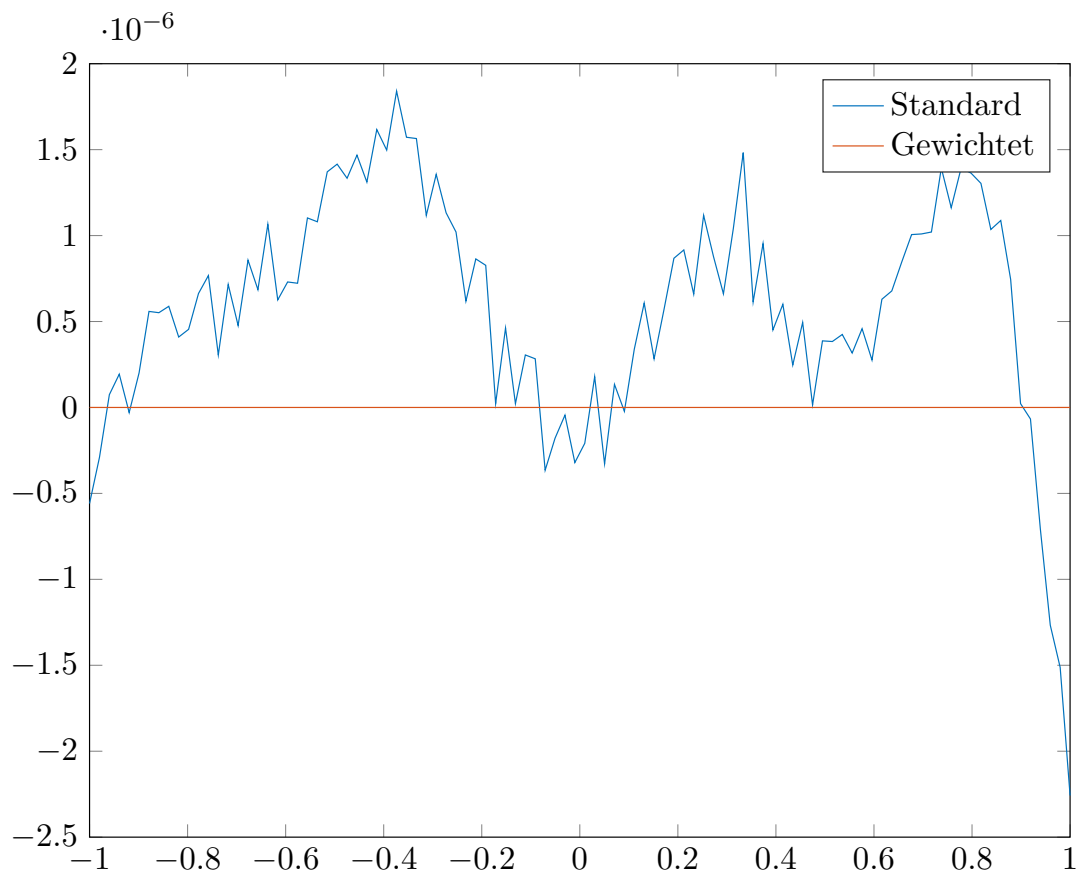


Abbildung 6.8: Rand bei gewichteter Kollokation

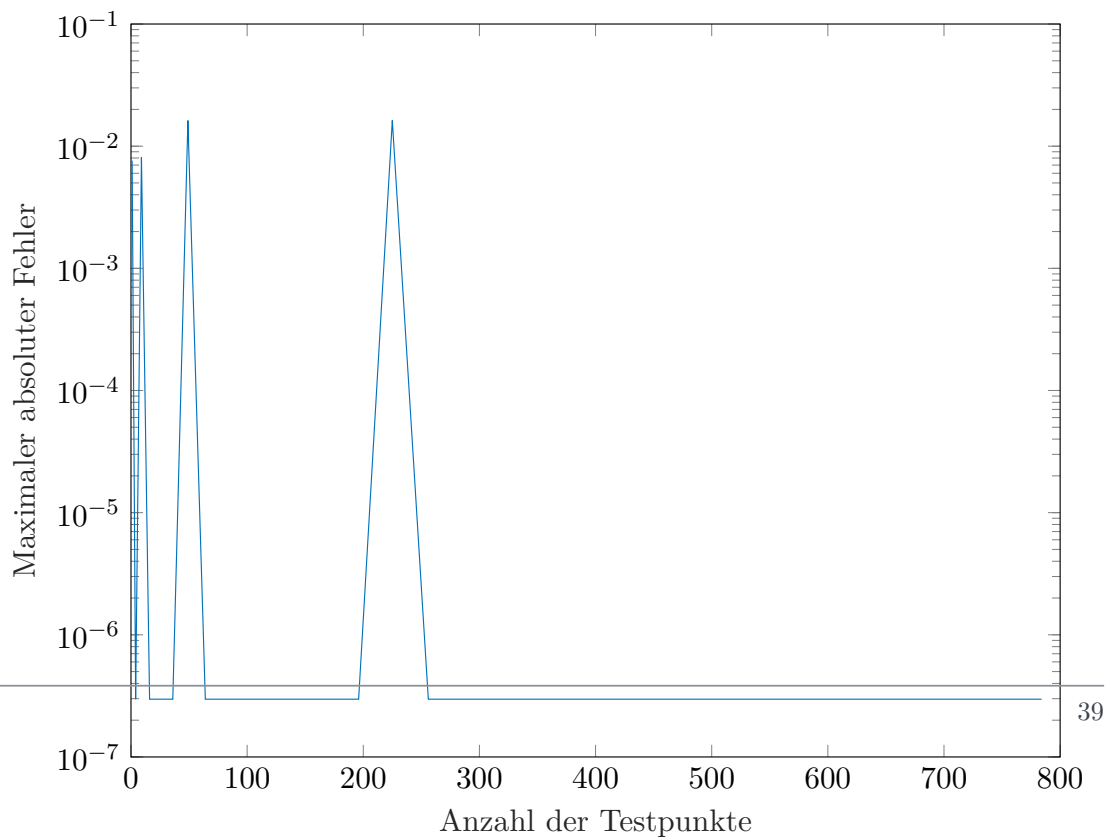


Abbildung 6.9: Fehler bei unterschiedlicher Anzahl an Testpunkten

Wir erkennen, dass der Fehler bis auf wenige Ausreißer konstant bleibt. Damit ist die Wahl der Testpunkte beinahe egal. Die großen Fehler entstehen genau dann, wenn alle Testpunkte mit den Kollokationspunkten zusammenfallen. Den hier auftretenden Effekt nennt man Überanpassung. Die Lösung wird dabei zu gut an die Testdaten angepasst und verliert dabei an Genauigkeit, wenn man das ganze Gebiet Ω betrachtet.

In Abbildung 6.10 ist der gewählte Parameter γ bei unterschiedlichen Testpunktanzahlen dargestellt. Dabei stellt man fest, dass genau dann, wenn ein großer Fehler auftritt

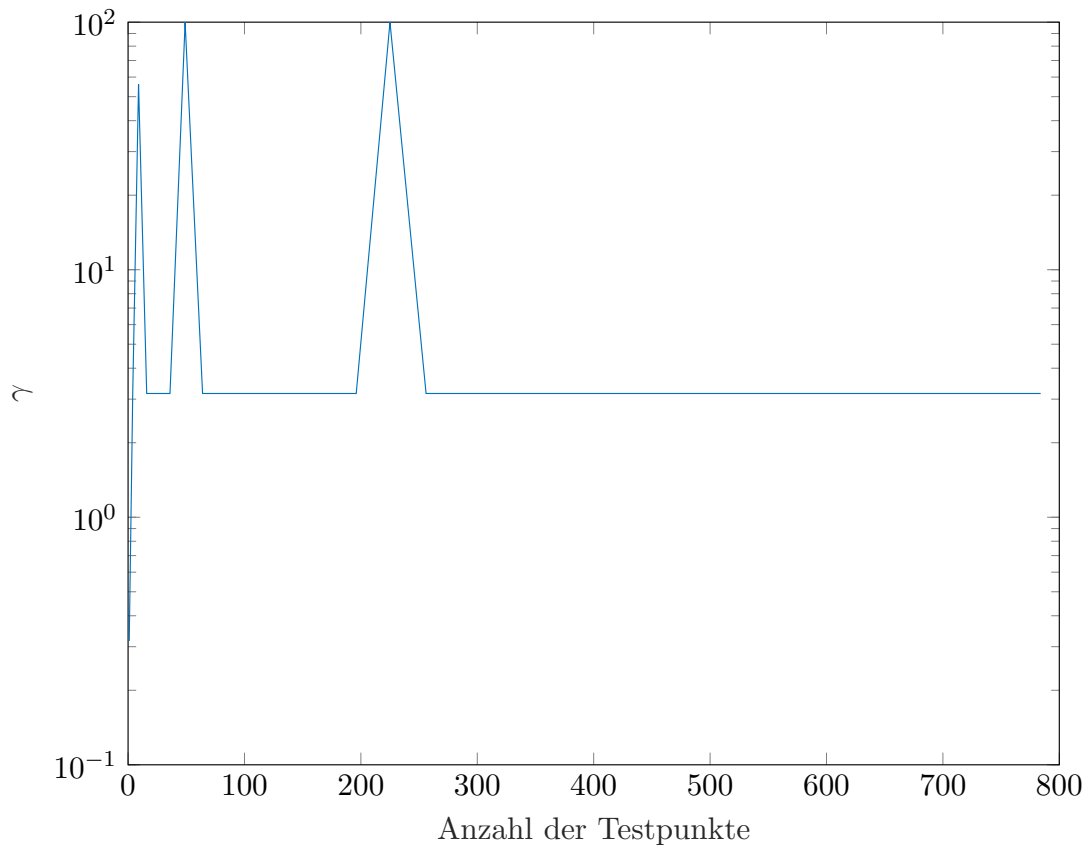


Abbildung 6.10: Gammawerte bei unterschiedlicher Anzahl an Testpunkten

g:testpunkte-gamma

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 Test- und Kollokationspunkte zusammenfallen, die Ansatzfunktionen so gewählt werden, dass sie, wenn möglich, nur Einfluss auf einen Testpunkt, nämlich den, an dem sie angesetzt werden, nehmen. Erkennbar ist dies in Abbildung 6.11.

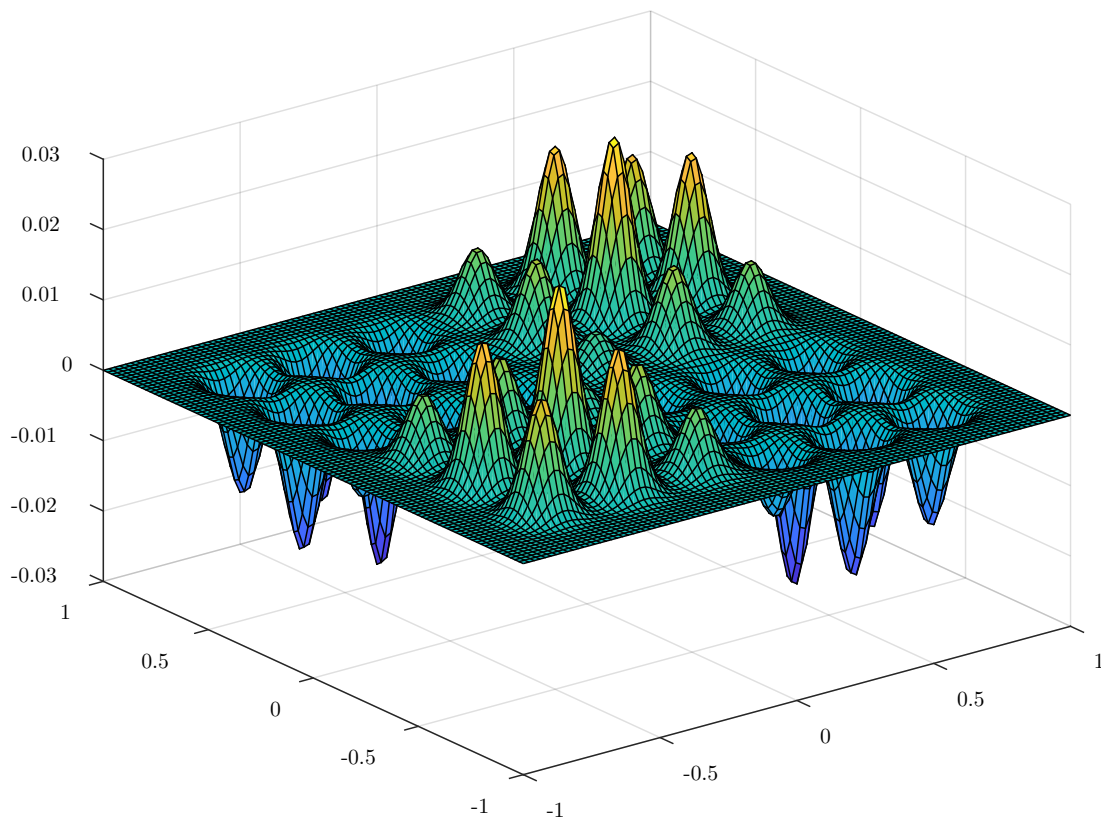


Abbildung 6.11: Lösung bei Überanpassung

overfitting

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

6.2 Parameterwahl und Kondition

Wir werden zunächst betrachten, wie sich der Parameter γ bei unterschiedlich vielen Kollokationspunkten verhält. Dafür wollen wir diese nur auf einem Gitter betrachten.

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 mehr-

fach 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 6.12 ist die Laufzeit bei unterschiedlich vielen auf einem Gitter verteilten Kollokationspunkte dargestellt.

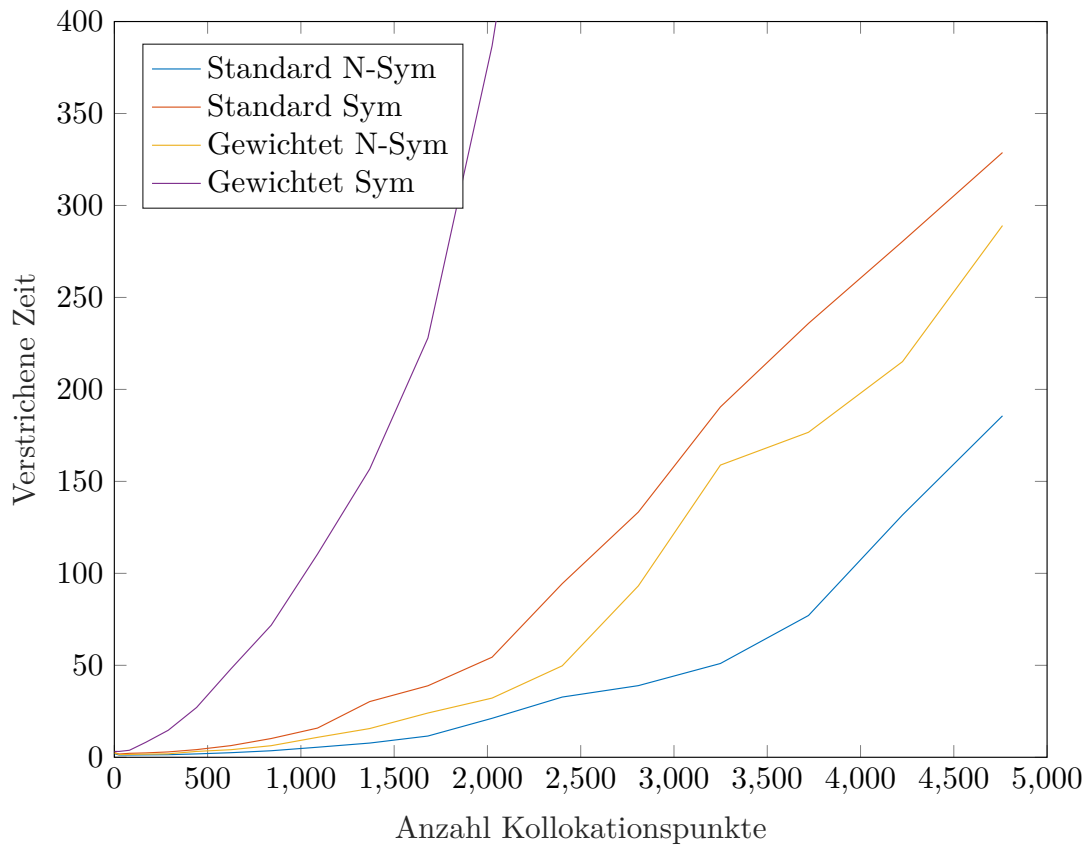


fig:Laufzeit

Abbildung 6.12: Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren

Wir sehen deutliche Unterschiede zwischen den verschiedenen Verfahren. Das Nichtsymmetrische 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 6.13 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.

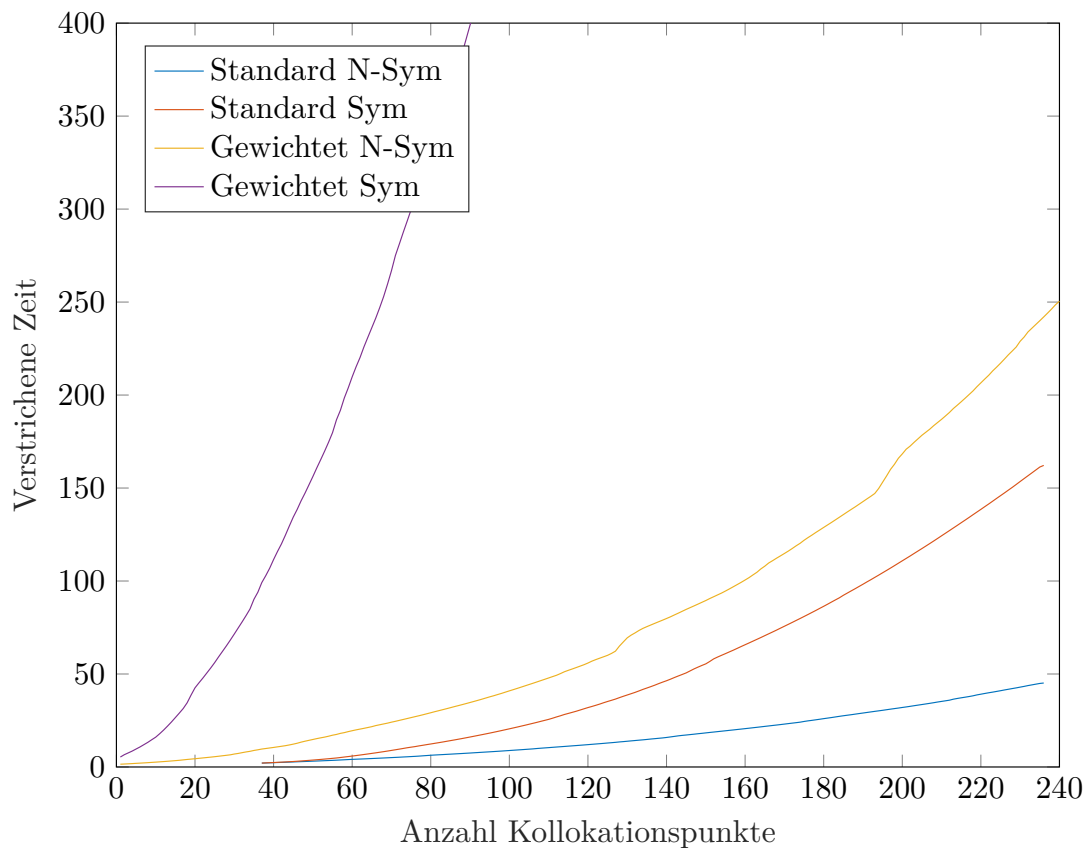


Abbildung 6.13: Laufzeit bei Greedy-Punktwahl

zeit-greedy

Wir erhalten wieder eine ähnliche 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.

Literatur

- [1] *Schur product theorem*. 30.07.2018. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Schur_product_theorem.
- [2] H. Wendland. *Scattered data approximation*. Bd. 17. Cambridge monographs on applied and computational mathematics. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- [3] G. Santin. *Approximation with Kernel Methods*. Stuttgart, 2017.
- [4] 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.