

Bachelorarbeit

Randwertprobleme mit gewichteter Kernkollokation

Der Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart

von

Daniel Koch

aus Leonberg

Entwurf

Prüfer: Prof. Dr. Bernard Haasdonk

Betreuer: Prof. Dr. Bernard Haasdonk

Immatrikulationsnummer: 2948791

Eingereicht am: 22. September 2018

Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation der Universität
Stuttgart.

IANS

September 2018

Bachelor's Thesis

Boundary Value Problems with Weighted Kernel Collocation

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

by

Daniel Koch

from Leonberg

Draft

First Examiner:	Prof. Dr. Bernard Haasdonk
Second Examiner:	Prof. Dr. Bernard Haasdonk
Student ID:	2948791
Submitted on:	22nd 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 Numerische Tests	1
1.1 Fehler	4
1.1.1 Absoluter Fehler	4
1.1.2 Fehler auf dem Rand	10
1.1.3 Validationspunkte	11
1.2 Parameterwahl und Kondition	14
1.3 Laufzeit	16
Literatur	21

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

1.1	Lösung der ersten PDE	2
1.2	Lösung der zweiten PDE	3
1.3	Kollokationspunkte	5
1.4	Fehler	6
1.5	Negativer Laplace der Gewichtsfunktion	7
1.6	Fehler bei zufällig verteilten Kollokationspunkten	8
1.7	Fehler beim Greedy-Verfahren	9
1.8	Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei partielle Differentialgleichung (PDE) 1	10
1.9	Lösung bei gewichtetem Greedy-Verfahren	11
1.10	Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 2	12
1.12	Fehler bei unterschiedlicher Anzahl an Testpunkten	12
1.11	Plot über den Rand	13
1.13	Gammawerte bei unterschiedlicher Anzahl an Testpunkten	14
1.14	Lösung bei Überanpassung	15
1.15	Gewählter Parameter γ	16
1.16	Fehler bei verschiedenen Parametern γ	17
1.17	Kondition bei verschiedenen Parametern γ	18
1.18	Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren	19
1.19	Laufzeit bei Greedy-Punktwahl	20

Tabellenverzeichnis

Liste der noch zu erledigenden Punkte

Numerische Tests

rischeTests

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

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

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

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

Sie hat die analytische Lösung

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

dargestellt in Abbildung 1.1. Wir wählen als Gewichtsfunktion w für Ω die Funktion aus Beispiel ??:

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

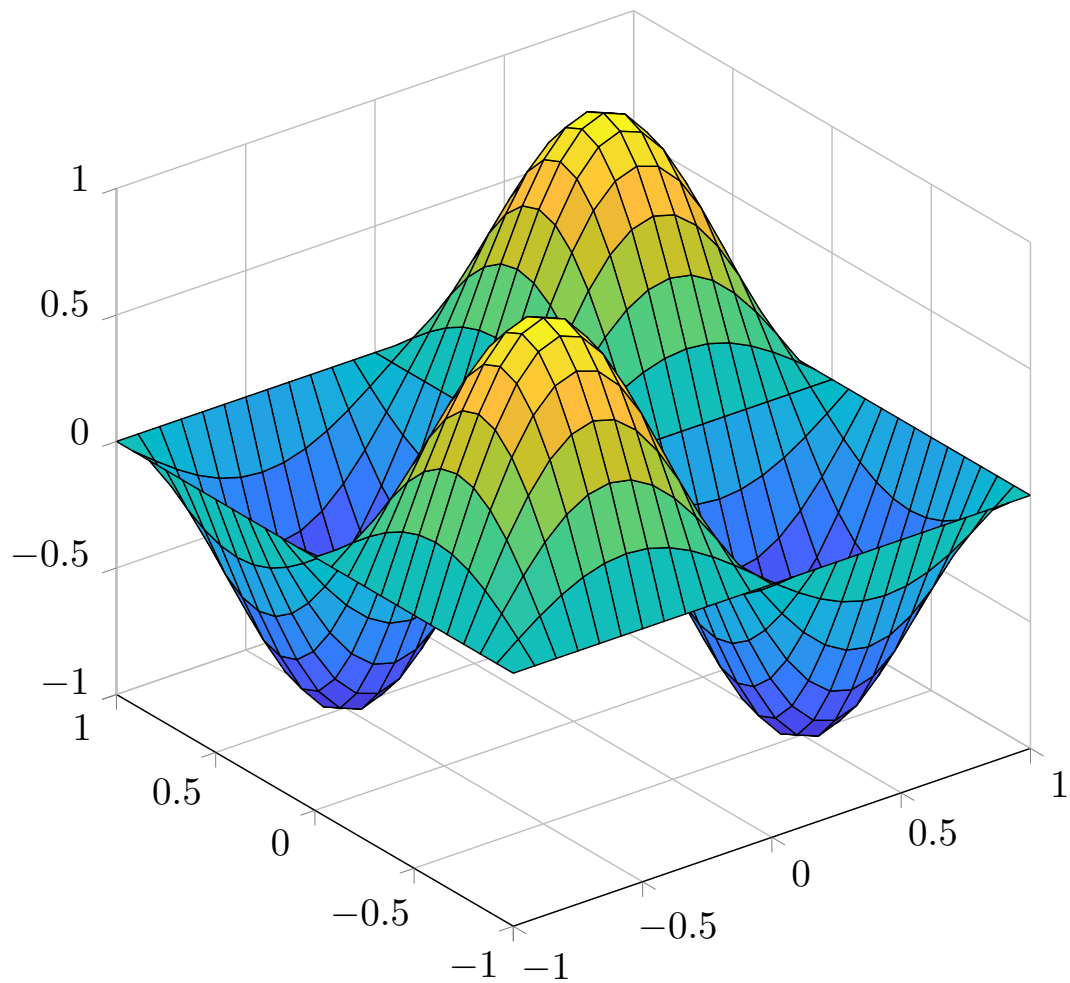
`fig:pde1sol`

Abbildung 1.1: Lösung der ersten PDE

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

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

Sie hat die analytische Lösung

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

dargestellt in Abbildung 1.2. Wir wählen als Gewichtsfunktion:

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

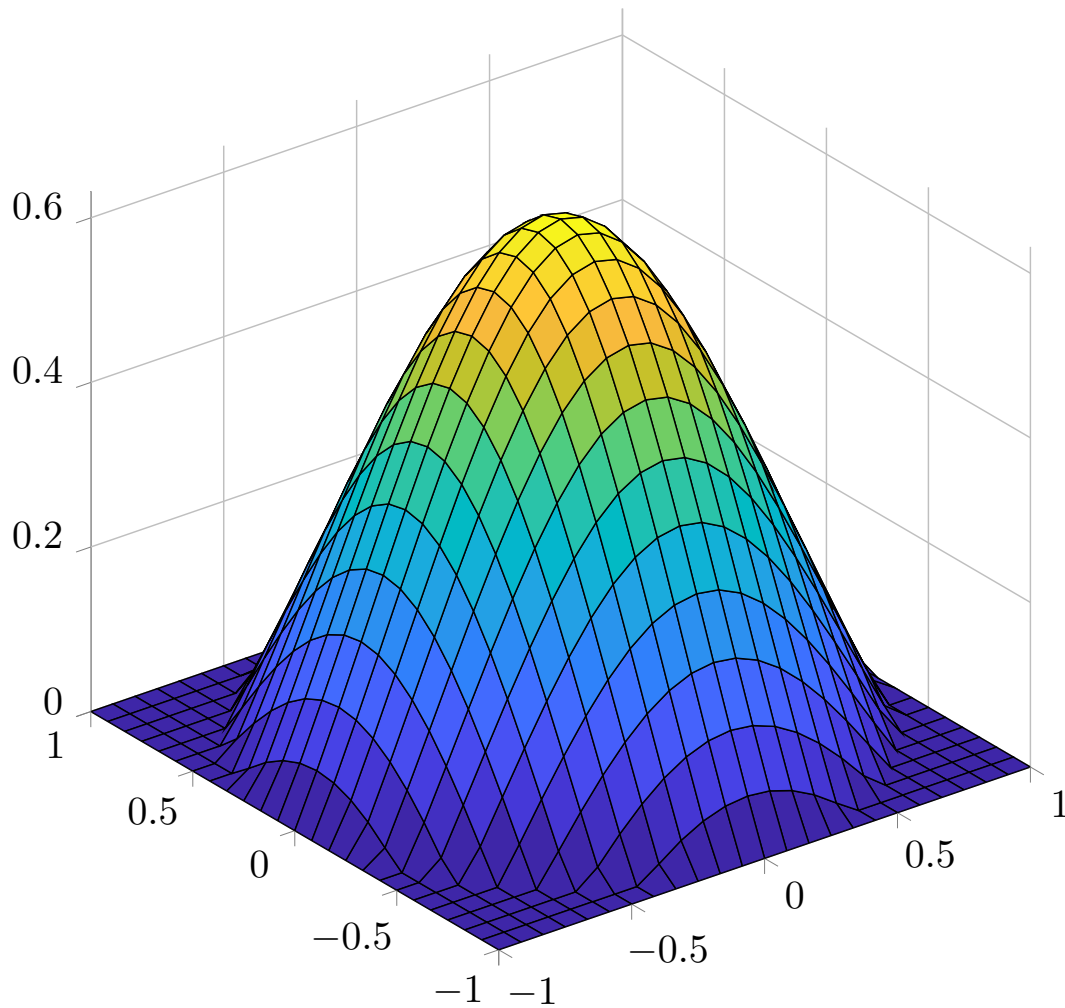


Fig:pde2sol

Abbildung 1.2: Lösung der zweiten PDE

Die Poisson-Gleichung werden wir mithilfe der Kernkollokation numerisch lösen. Dafür wählen wir den Gauß Kern aus Beispiel ?? . Aufgrund der fehlenden Praxisrelevanz werden wir die erste in Kapitel ?? vorgestellte Methode zur Fehlerberechnung in jeder Iteration nicht betrachten, sondern nur die im Residuum.

1.1 Fehler

1.1.1 Absoluter 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.

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

1.1.1.1 Kollokationspunkte als Gitter

Wir werden die Kollokationspunkte, so wie die Testpunkte, zunächst, wie in Abbildung 1.3 gezeigt, in einem Gitter anordnen.

Damit können wir uns anschauen, wie sich der Fehler bei Verfeinerung des Gitters verhält. Dieser ist in Abbildung 1.4 für die vier verschiedenen Verfahren und beide PDEs dargestellt.

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

Für die erste PDE liefern die Standardverfahren 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 4500 Kollokationspunkten nicht die Genauigkeit der Standardverfahren. Im Vergleich der symmetrischen und nicht-symmetrischen Verfahren

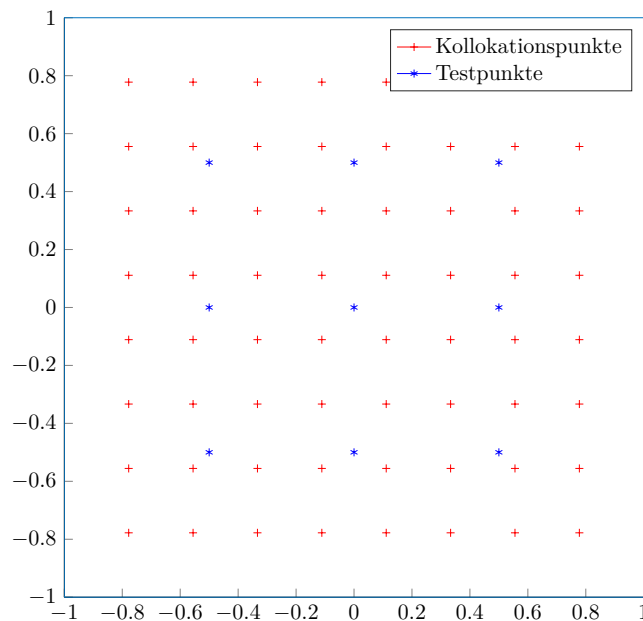


Abbildung 1.3: Kollokationspunkte

fig:Kollok

schneidet beim Standardverfahren das symmetrische leicht besser ab, beim gewichteten ist kein Unterschied erkennbar.

Ein Grund für das schlechtere Abschneiden der gewichteten Verfahren wird erkennbar, wenn man sich anschaut, wo der große Fehler angenommen wird. In Abbildung ?? ist der Testfehler über das Gebiet Ω dargestellt.

HIER DAS BILD

Man erkennt große Fehler in den Ecken des Gebietes. Diese kommen von der Gewichtsfunktion. Wendet man nämlich den Differentialoperator der PDE auf diese an, erhält man eine Funktion mit Singularitäten in den Ecken, wie in Abbildung 1.5 dargestellt. Diese Funktion kommt im Falle der nicht-symmetrischen Kollokation bei der Erstellung der Kollokationsmatrix vor, im symmetrischen Fall ist sie sogar Teil der Ansatzfunktionen.

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

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

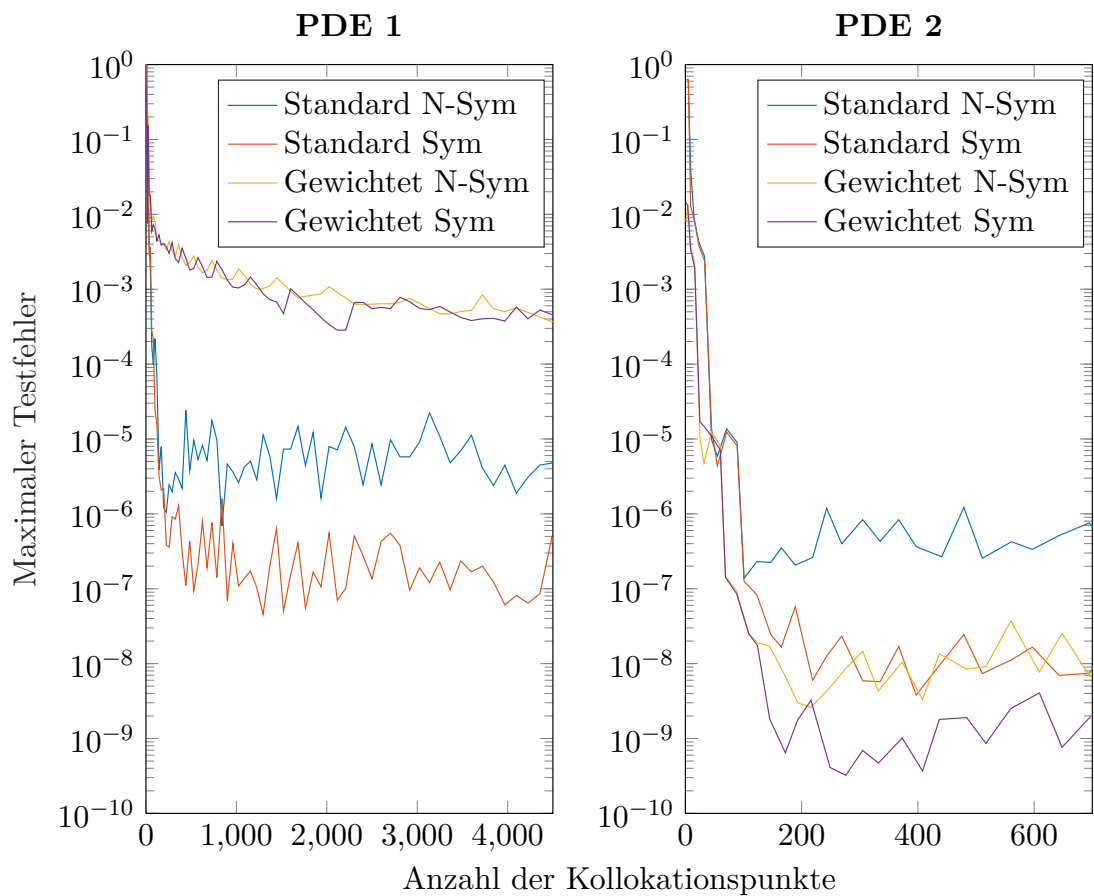


Abbildung 1.4: Fehler

g:error-grid-both

und hat damit keine Singularitäten.

Betrachten wir den Fehler der zweiten PDE, erhalten wir ein komplett anderes Bild als bei der PDE auf dem Quadrat. Die gewichteten Verfahren schneiden jetzt gleich oder gar deutlich besser ab als die Standardverfahren. Demnach sollten wir bei der Wahl der Gewichtsfunktionen darauf achten, dass in diesen und deren partiellen Ableitungen keine Singularitäten entstehen.

1.1.1.2 Zufällige Kollokationspunkte

Als nächstes schauen wir uns zufällig verteilte Kollokationspunkte an. In Abbildung 1.6 ist der Fehler bei unterschiedlich vielen zufällig verteilten Kollokationspunkten für beide PDEs dargestellt.

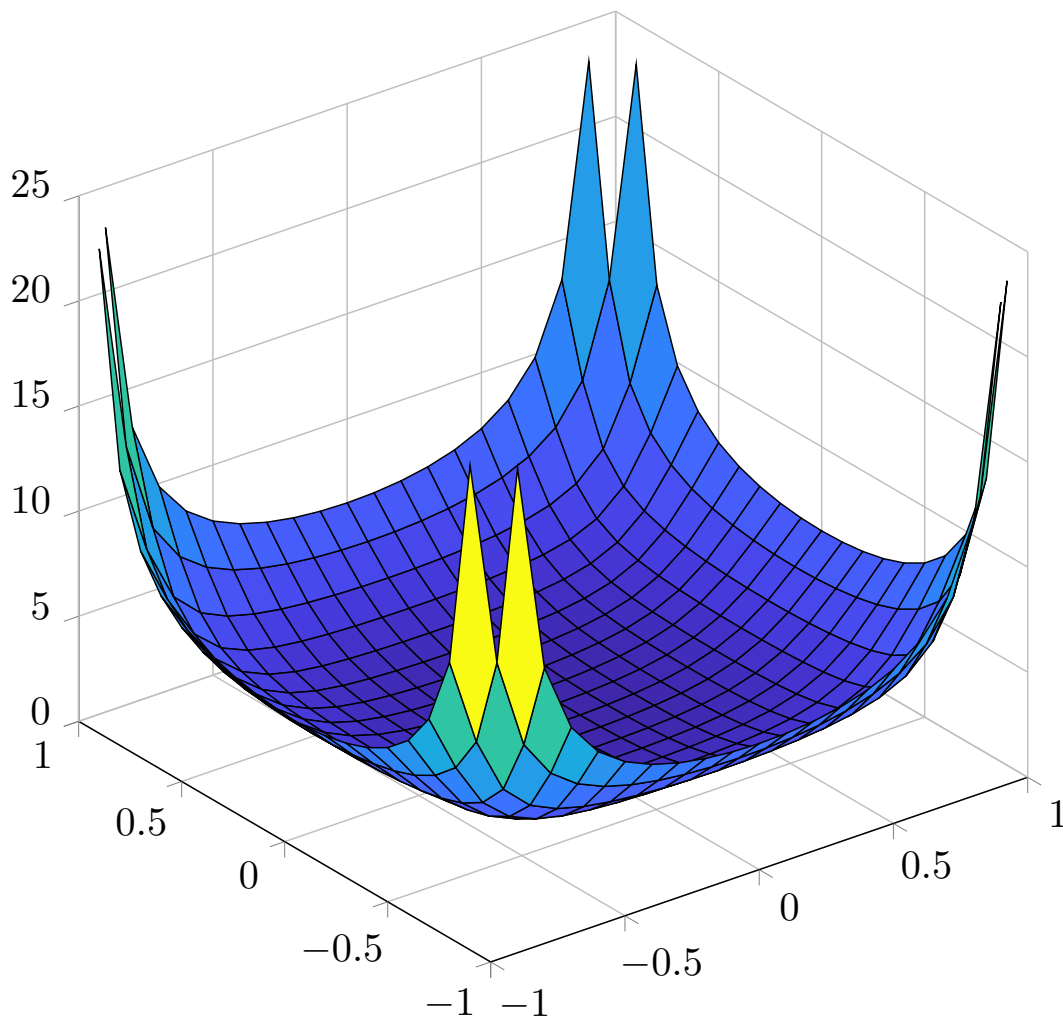


Fig:Gewicht

Abbildung 1.5: Negativer Laplace der Gewichtsfunktion

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 weist die Kurve der zufällig gewählten Punkte größere Schwankungen auf. Diese sind auf eine zufällig schlechte Punktwahl zurückzuführen. Die zufälligen Punkte sind aber nie wesentlich besser als die Gitterpunkte. Von daher lässt sich in niedrigen Dimensionen kein Vorteil für zufällig gewählte Kollokationspunkte feststellen. In höheren Dimensionen ist es aufgrund der hohen Punktzahl allerdings nahezu unmöglich ein Gitter über das Gebiet zu legen.

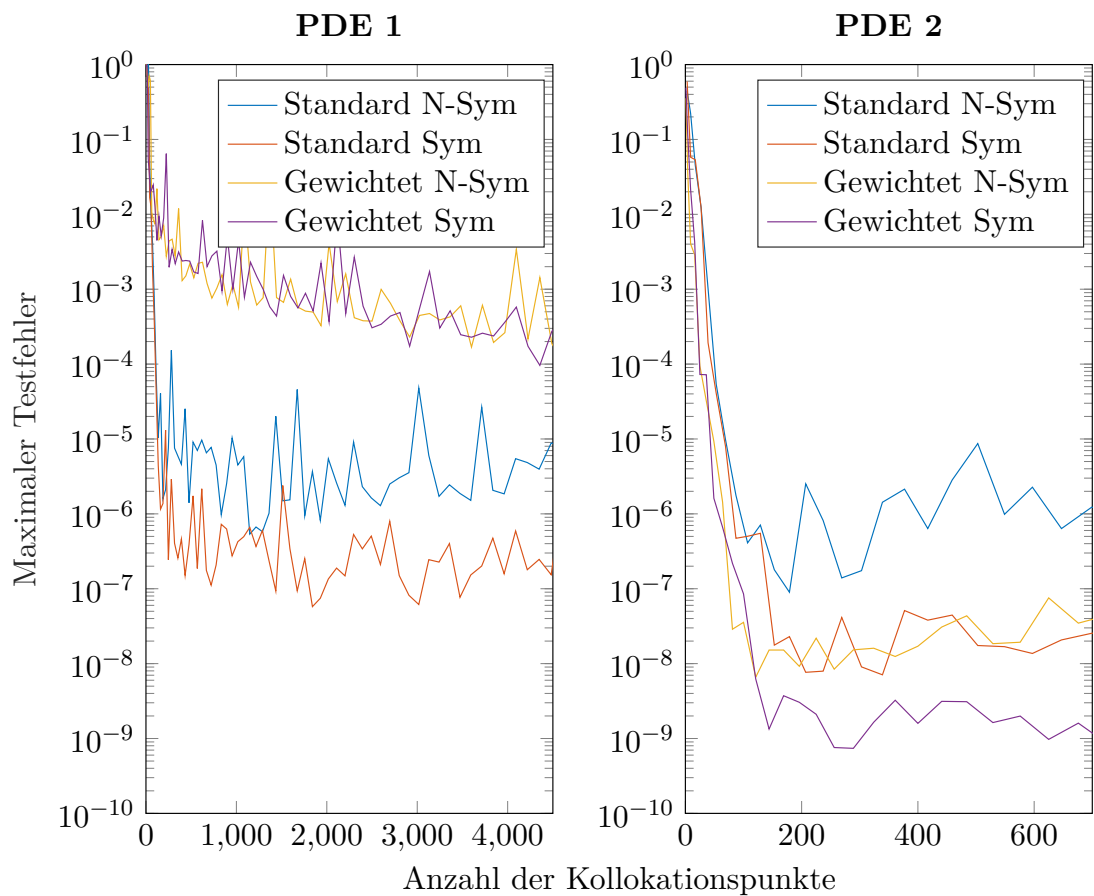


Abbildung 1.6: Fehler bei zufällig verteilten Kollokationspunkten

fig:error-random

Dort kann man dann davon ausgehen, mit den zufällig gewählten Punkten vernünftige Ergebnisse zu erhalten.

1.1.1.3 Greedy-Punktwahl

Zuletzt schauen wir uns in Abbildung 1.7 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 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-

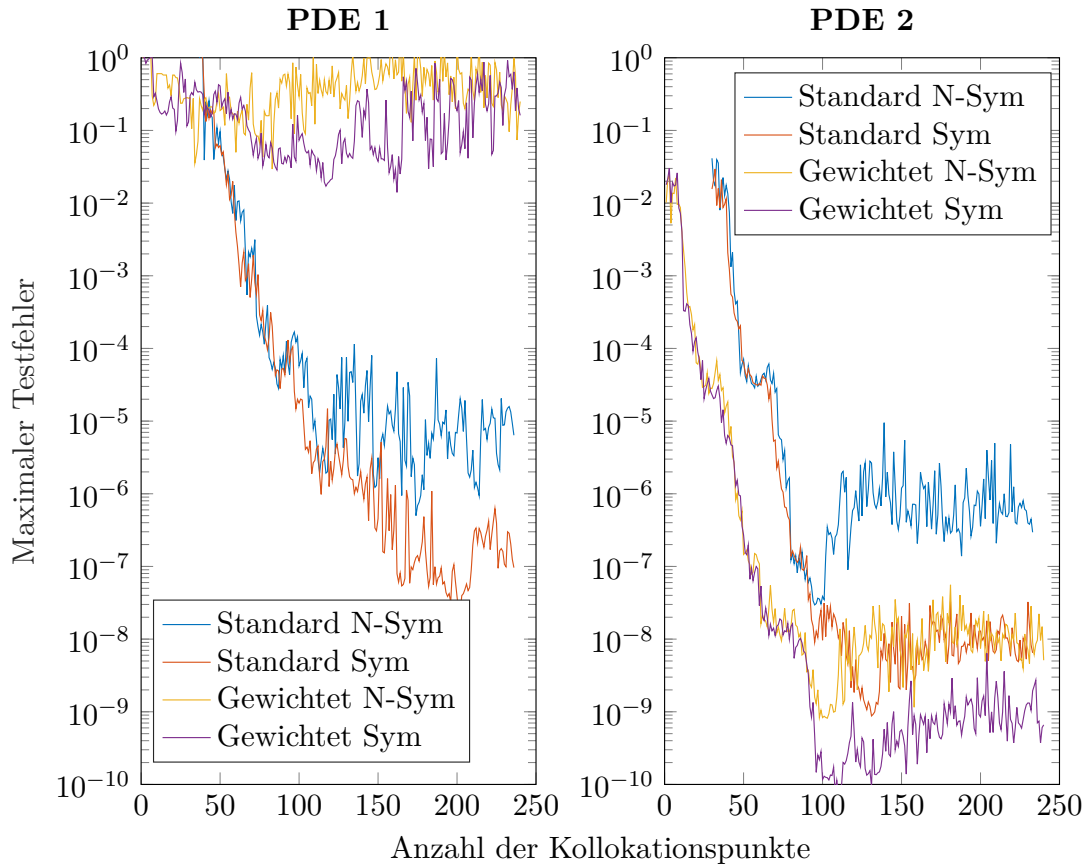


Abbildung 1.7: Fehler beim Greedy-Verfahren

error-greedy

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 1.8 dargestellt.

Man erkennt, dass die Kollokationspunkte im Standard Fall gleichmäßig über das Einheitsquadrat verteilt sind, sich im gewichteten Fall allerdings in den Ecken drängen. Dies kann, wie schon der größere Fehler 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

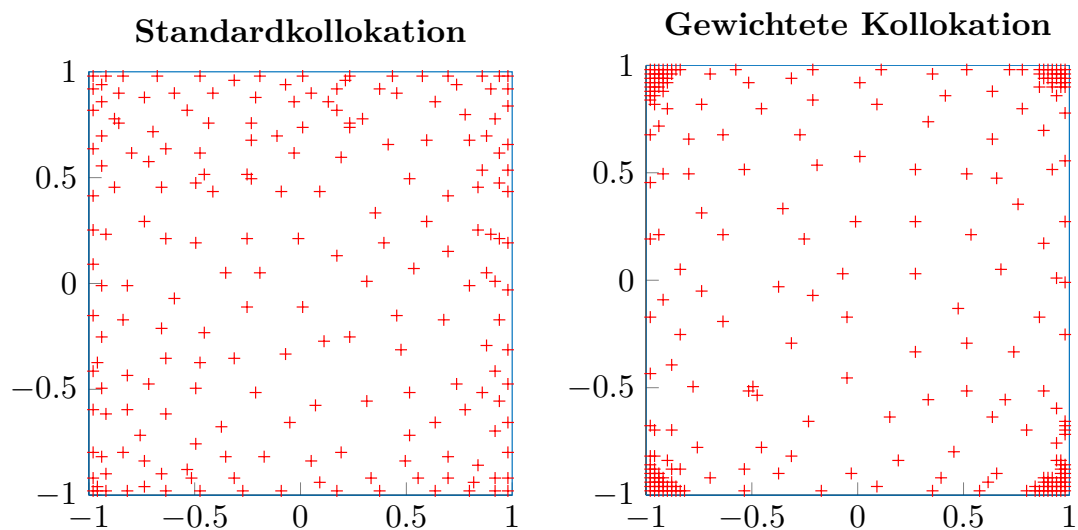
**fig:greedy-points**

Abbildung 1.8: Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 1

in die Ecken legt. Dies führt aber zu einer in Abbildung 1.9 erkennbaren numerisch verrauschten Lösung.

Wieder erhalten wir ein komplett anderes Bild, wenn wir die zweite PDE betrachten. Insbesondere liefern hier die gewichteten Verfahren vernünftige Ergebnisse. Dies lässt sich auf eine gleichmäßige Verteilung der Kollokationspunkte, erkennbar in Abbildung 1.10, 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.

1.1.2 Fehler auf dem Rand

Wir werden 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 Standardverfahren und eine mit dem gewichteten Verfahren erstellte Lösung der ersten PDE in Abbildung 1.11 über einen Teil des Randes.

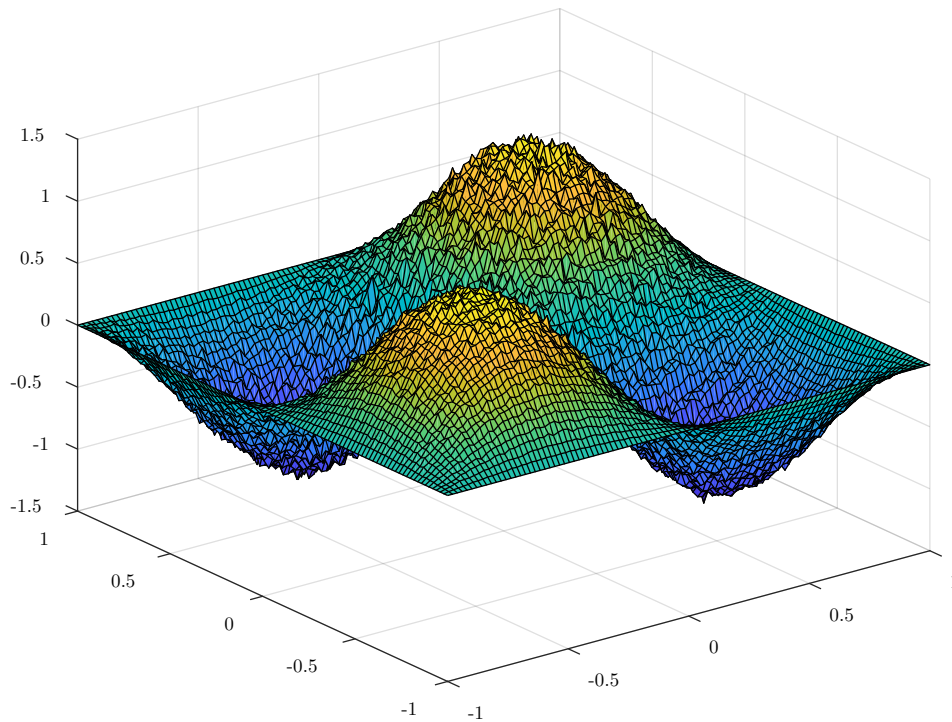


Abbildung 1.9: Lösung bei gewichtetem Greedy-Verfahren

-verrauscht

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.

1.1.3 Validationspunkte

Wir sind bisher nur auf die Wahl der Kollokationspunkte eingegangen, aber noch nicht auf die der Validationspunkte. Dafür stellen wir den Testfehler unserer numerischen Lösung der ersten PDE in Abbildung 1.12 bei gleichbleibenden Kollokationspunkten, aber bei unterschiedlichen Anzahlen von Validationspunkten dar. Diese sind auch hier wieder in einem Gitter angeordnet.

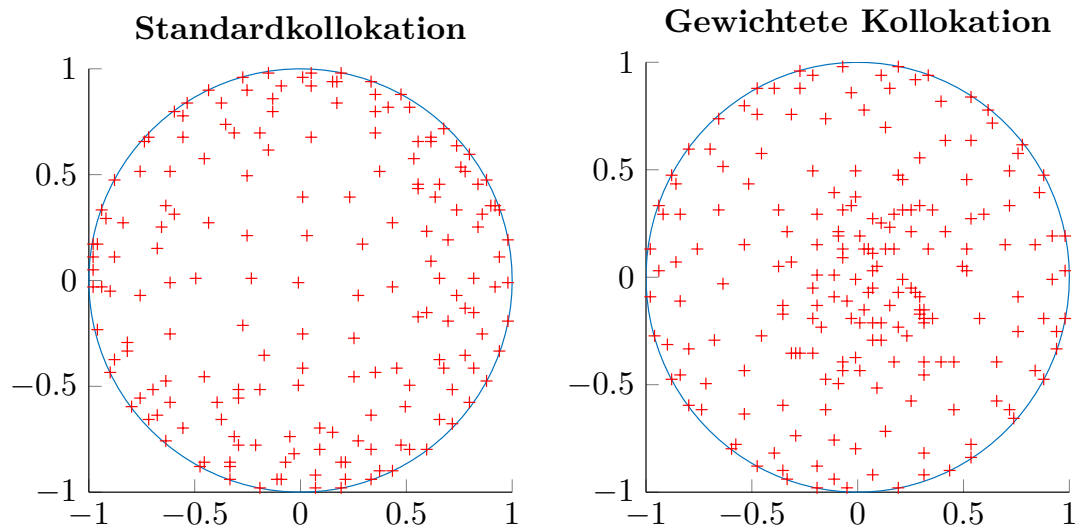


fig:greedy-points2

Abbildung 1.10: Kollokationspunkte beim Greedy-Verfahren bei PDE 2

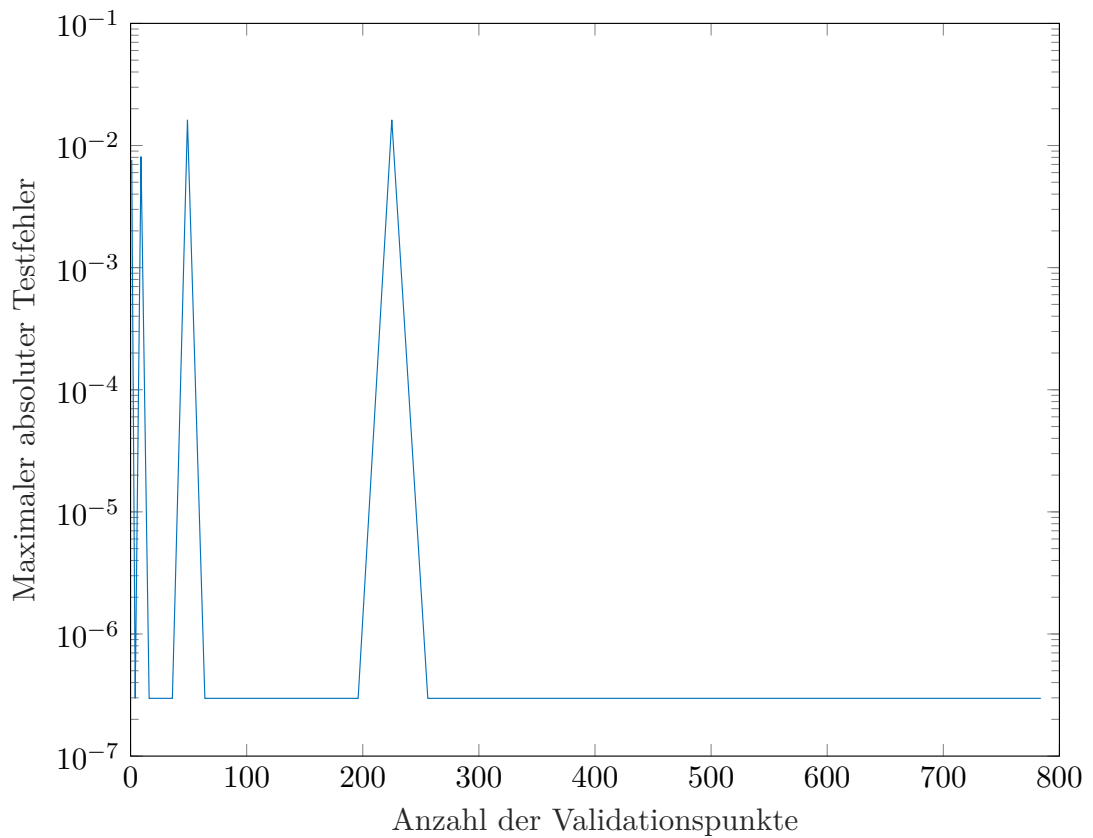


fig:testpunkte

Abbildung 1.12: Fehler bei unterschiedlicher Anzahl an Testpunkten

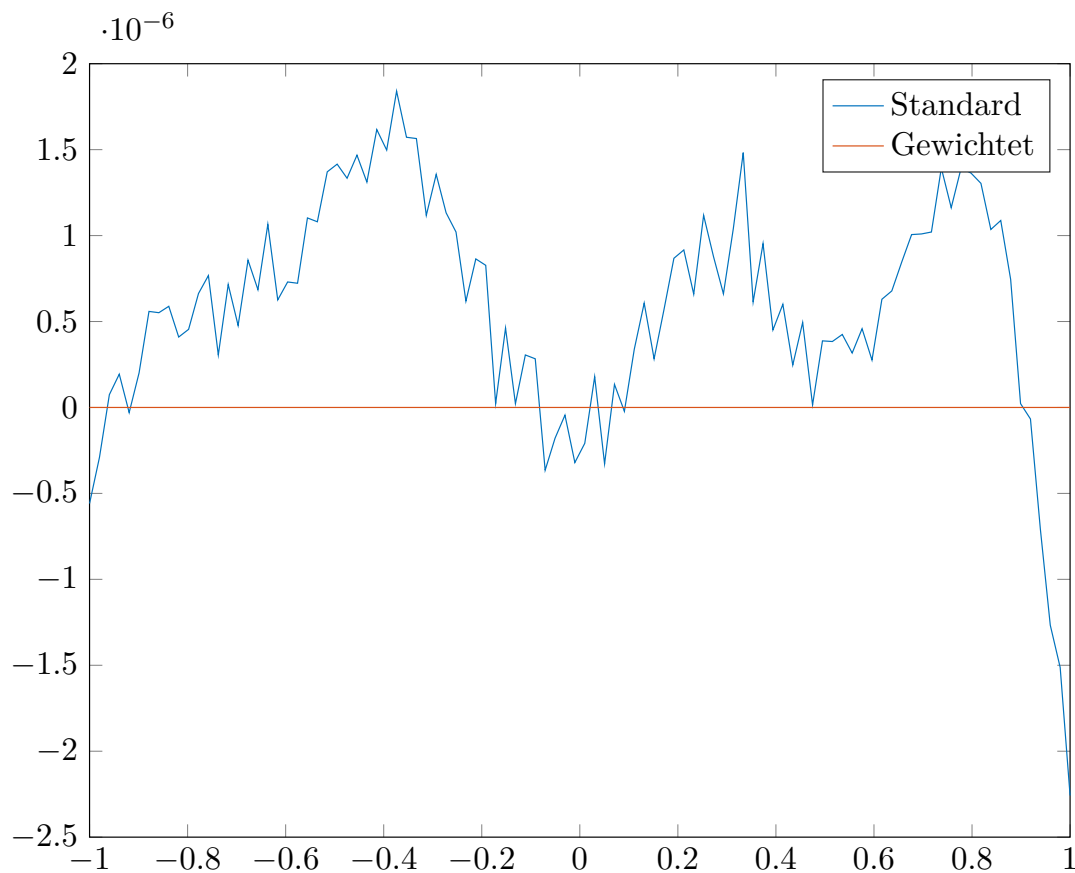


Abbildung 1.11: Plot über den Rand

id-vergleich

Wir erkennen, dass der Fehler bis auf wenige Ausreißer konstant bleibt. Demnach spielt die Wahl der Validationspunkte keine zu große Rolle. Die großen Fehler entstehen genau dann, wenn alle Validationspunkte mit den Kollokationspunkten zusammenfallen. Den hier auftretenden Effekt nennt man Überanpassung. Die Lösung wird dabei zu gut an die Kollokationspunkte angepasst und verliert dabei an Genauigkeit, wenn alle Testpunkte betrachtet.

In Abbildung 1.13 ist der gewählte Parameter γ bei unterschiedlichen Testpunktanzahlen dargestellt. Dabei stellt man fest, dass genau dann, wenn ein großer Fehler auftritt auch ein großes γ gewählt wird. Wir erinnern uns an Abbildung ??, dass ein großes γ einem schmalen „Hütchen“ der Kernfunktion entspricht. Das kann man so interpretieren, dass, wenn Test- und Kollokationspunkte zusammenfallen, die Ansatzfunktionen

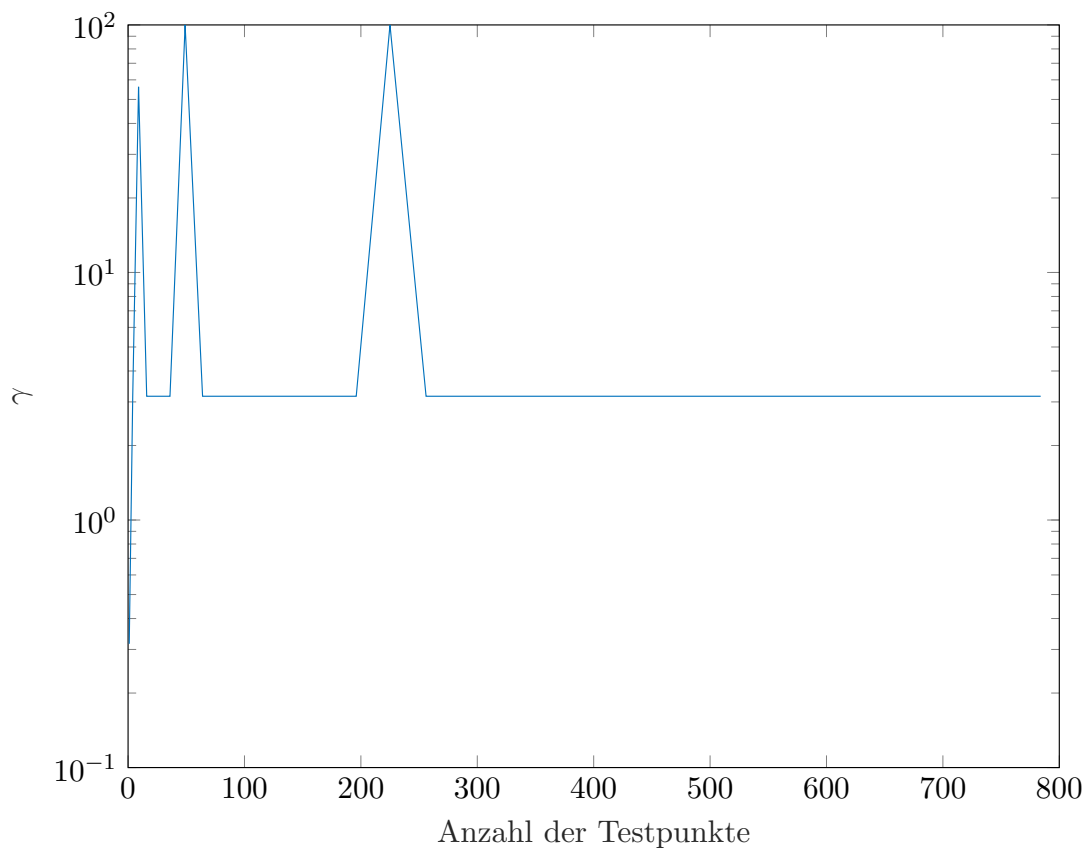


Abbildung 1.13: Gammawerte bei unterschiedlicher Anzahl an Testpunkten

g:testpunkte-gamma

so gewählt werden, dass sie, wenn möglich, nur Einfluss auf einen Testpunkt nehmen. Erkennbar ist dies in Abbildung 1.14.

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

1.2 Parameterwahl und Kondition

Wir werden in Abbildung 1.15 zunächst betrachten, wie sich der Parameter γ bei unterschiedlich vielen Kollokationspunkten verhält. Dafür betrachten wir diese aufgrund der gleichmäßigen Verringerung der Abstände auf einem Gitter verteilt.

Die gewichteten Verfahren zeigen das Verhalten, welches wir erwarten würden. Mit steigender Anzahl an Kollokationspunkten vergrößert sich der verwendete Parameter γ ,

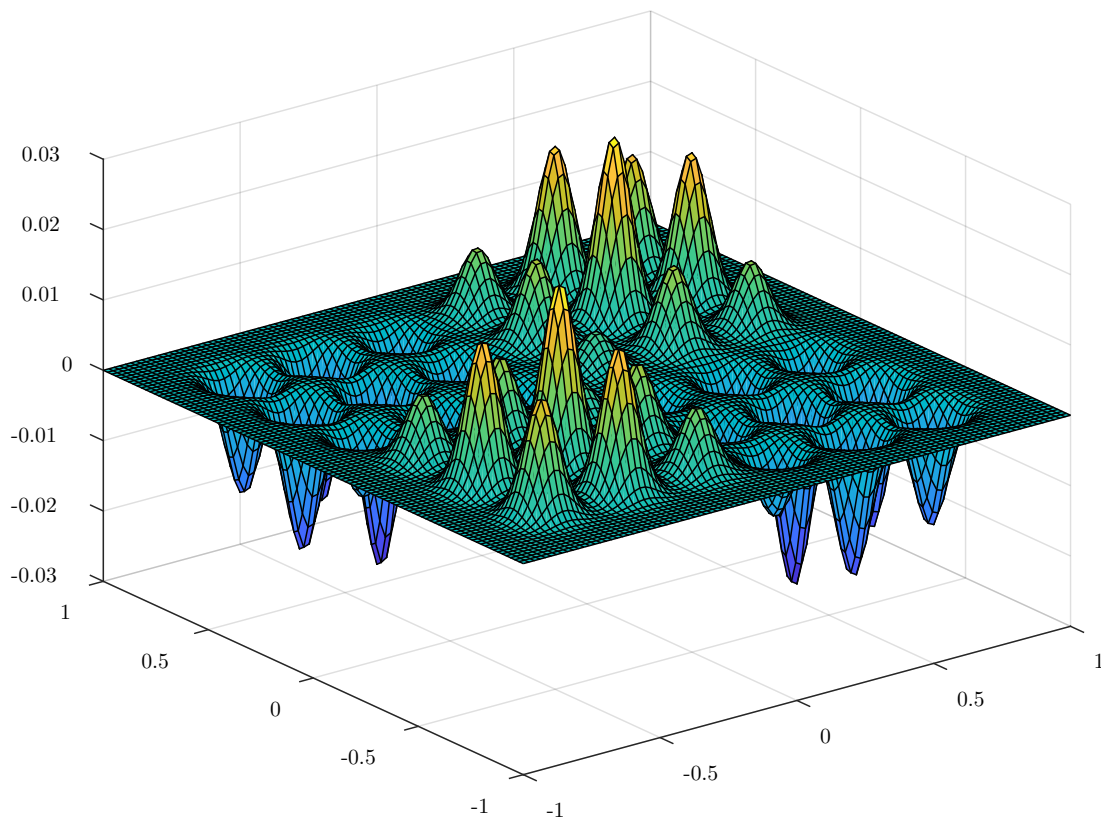


Abbildung 1.14: Lösung bei Überanpassung

overfitting

da dies in einem engeren „Hütchen“ des Kerns resultiert und dies zu den enger liegenden Kollokationspunkten passt. Die Standardverfahren zeigen am Anfang das gleiche Verhalten, haben aber schon früh, wie wir aus dem vorherigen Kapitel wissen, ihren besten Fehler erreicht und verändern dann auch ihren Parameter nicht mehr.

In Abbildung 1.16 ist bei gleichbleibenden Kollokationspunkten der Fehler bei unterschiedlichen Parametern γ dargestellt.

Daraus erkennt man, dass der Fehler groß ist, wenn γ entweder zu klein oder zu groß ist. Ist γ zu groß, haben wir zu kleine „Hütchen“, so können diese die PDE nur sehr lokal lösen. Der große Fehler für zu kleines γ lässt sich besser erklären, wenn man noch die Kondition hinzunimmt. Diese ist in Abbildung 1.17 dargestellt.

Die Kondition ist für kleine γ groß. Das kommt daher, dass jede Ansatzfunktion „Einfluss“ auf viele Kollokationspunkte hat. Mitunter das erklärt den großen Fehler für zu kleine γ . Für große γ ist die Kondition wesentlich besser, da jede Ansatzfunktion auf

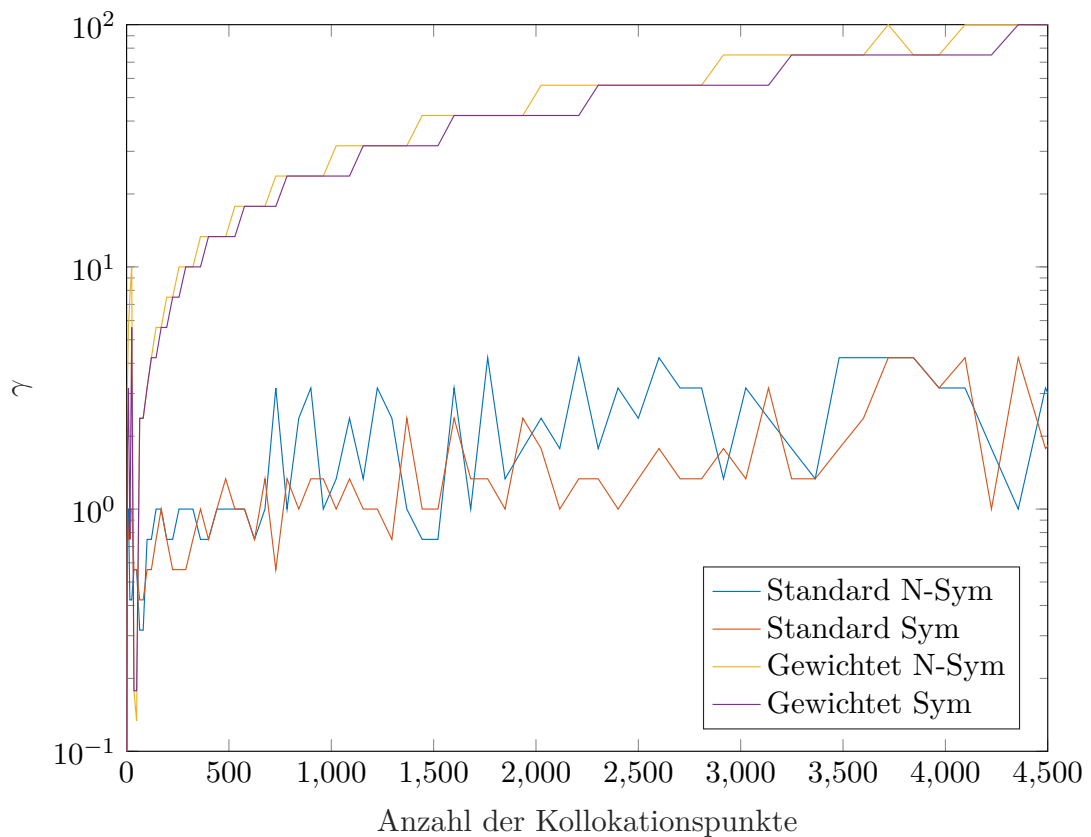


fig:gamma

Abbildung 1.15: Gewählter Parameter γ

weniger Kollokationspunkte deutlichen „Einfluss“ hat. Es lässt sich schließlich erkennen, dass der Fehler ungefähr dann am niedrigsten ist, wenn die Kondition anfängt besser zu werden.

1.3 Laufzeit

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

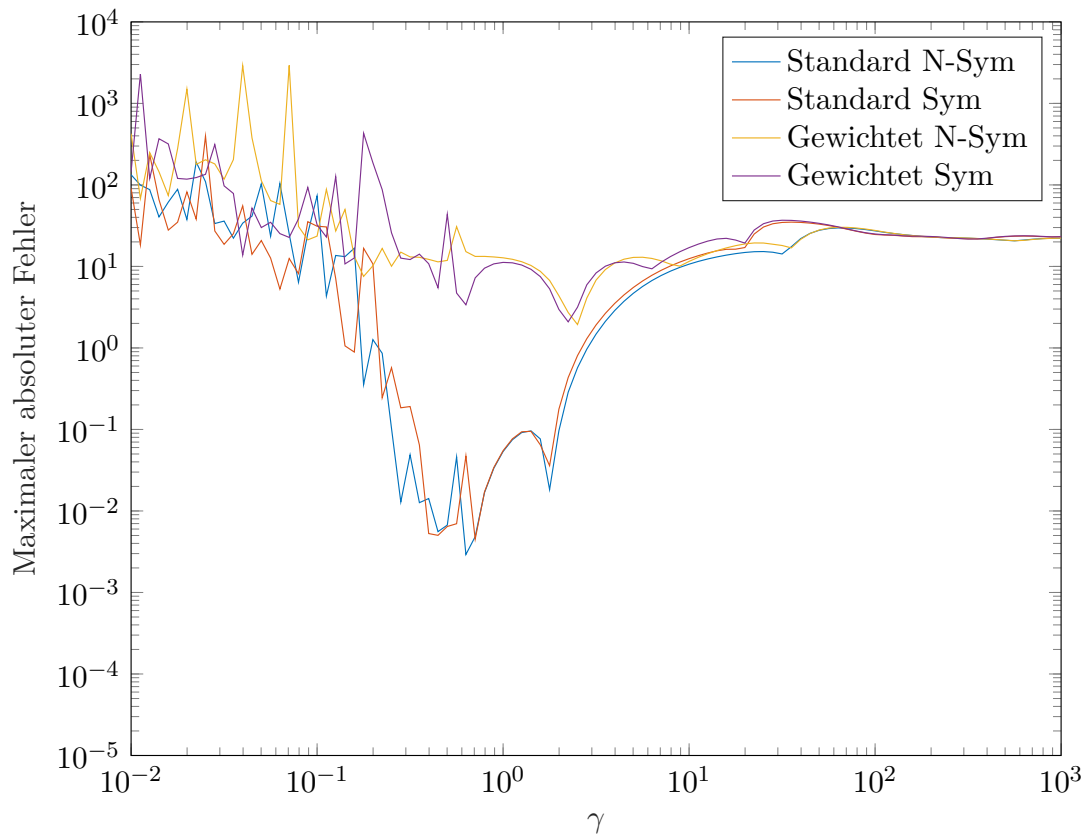


Abbildung 1.16: Fehler bei verschiedenen Parametern γ

wir weniger an den absoluten Zeitwerten interessiert sind, als an den relativen Vergleichswerten der einzelnen Verfahren.

In Abbildung 1.18 ist die Laufzeit bei unterschiedlich vielen auf einem Gitter verteilten Kollokationspunkte dargestellt.

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.

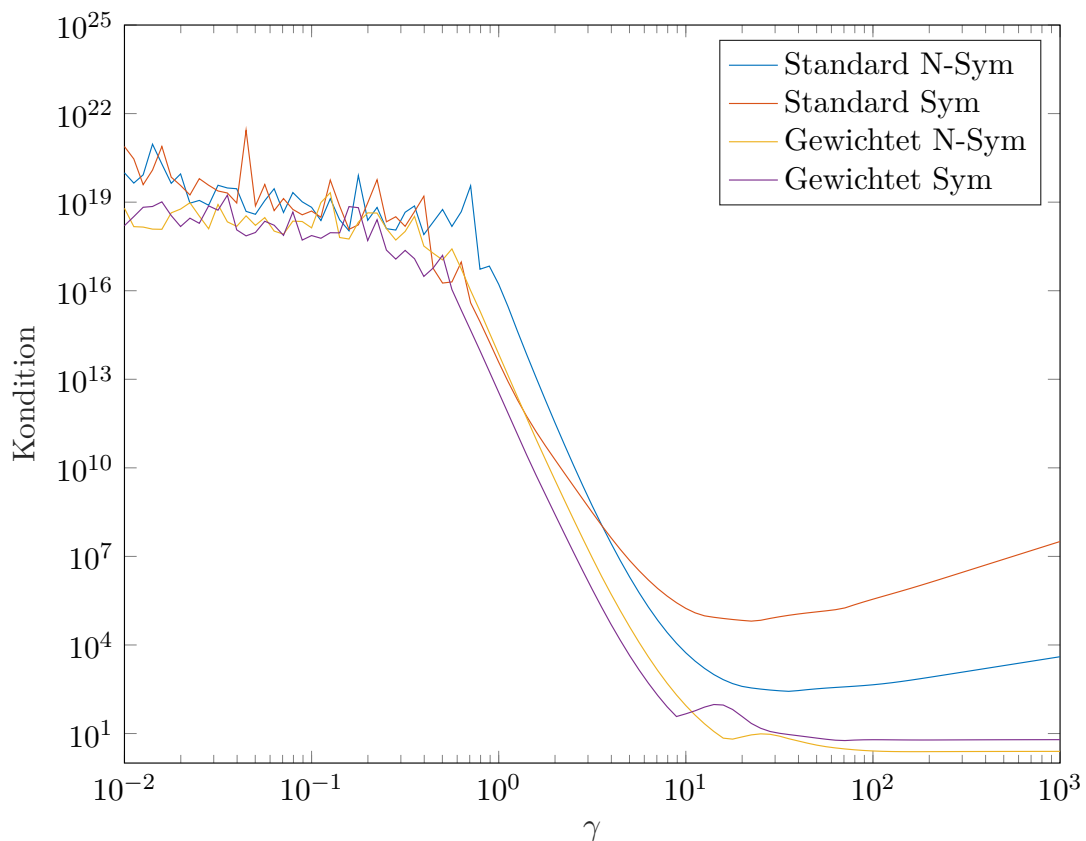


fig:kondition

Abbildung 1.17: Kondition bei verschiedenen Parametern γ

In Abbildung 1.19 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.

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.

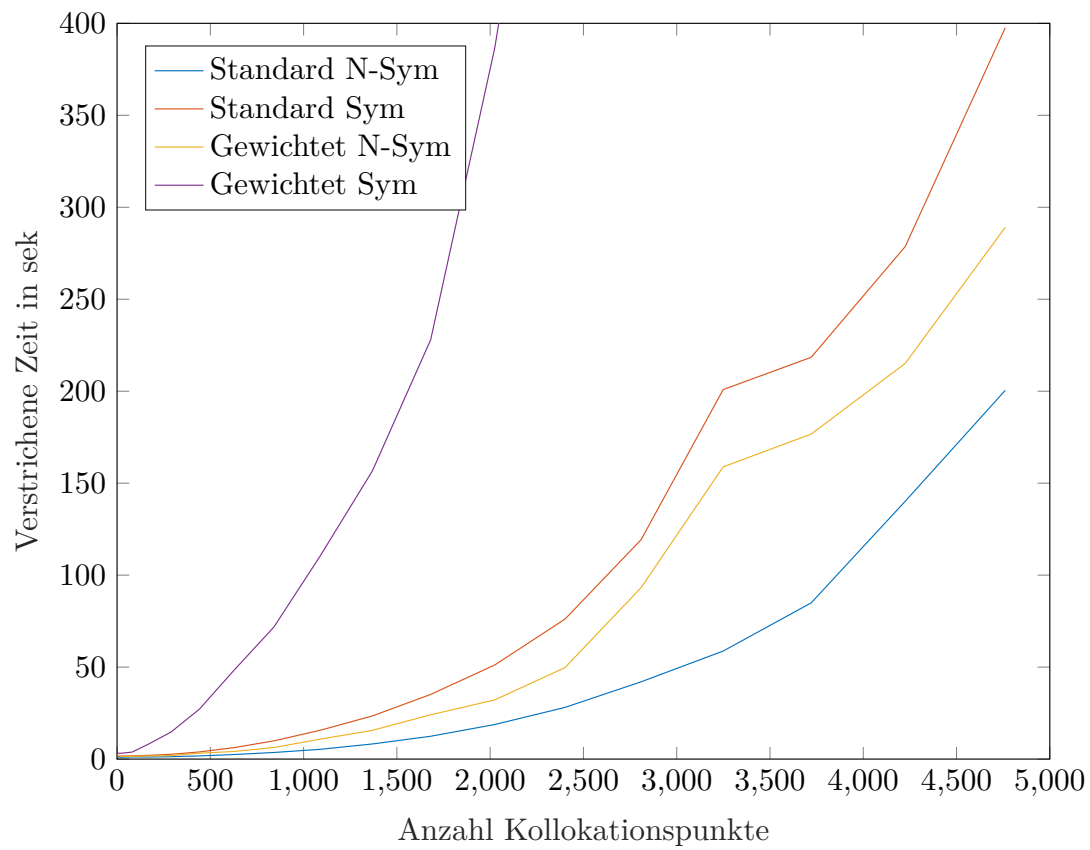
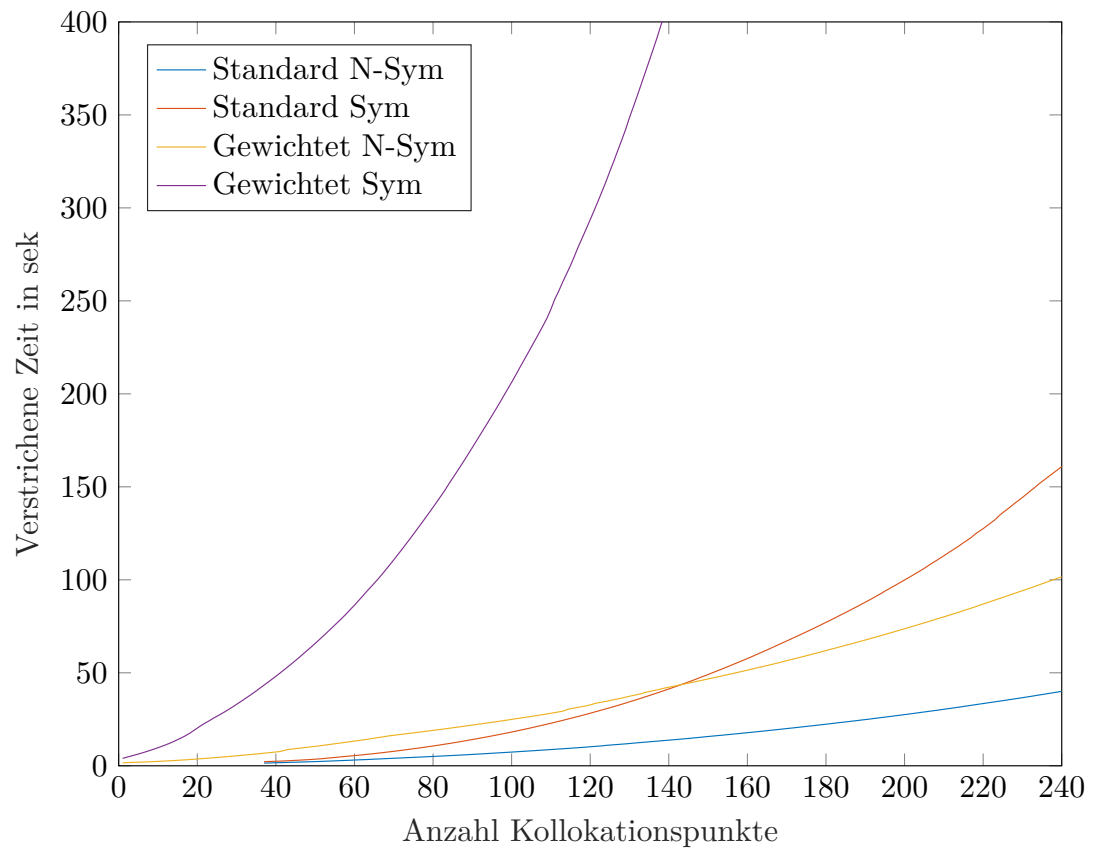


Abbildung 1.18: Laufzeit der unterschiedlichen Verfahren



g: Laufzeit-greedy

Abbildung 1.19: Laufzeit bei Greedy-Punktwahl

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.