

Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
Institut für Angewandte Mathematik

Ein
Partikel-Galerkin-Verfahren
mit Ansatzfunktionen der
Partition of Unity Method

Diplomarbeit

Marc Alexander Schweitzer

Aufgabensteller : Prof. Dr. Michael Griebel
Abgabedatum : 1. Dezember 1997

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Grundlegende Definitionen und Notationen	2
1.2	Das Galerkinverfahren	5
2	Konstruktion der Ansatz- und Testfunktionen für das Galerkinverfahren	7
2.1	Konstruktion der Partition der Eins	10
2.2	Lokale Approximationsräume	15
2.3	Globale Basen des PUM-Raums V^h	15
2.4	Verfeinerung des PUM-Raums V^h	17
3	Galerkinverfahren mit dem PUM-Raum V^h	19
3.1	Integration der Ansatzfunktionen	19
3.2	Eigenschaften der Steifigkeitsmatrizen	24
4	Diskretisierung von Randwerten	27
4.1	Dirichlet-Aufgaben	27
4.2	Neumann-Aufgaben	34
5	Lösen der entstehenden Gleichungssysteme	35
5.1	Löser für Sattelpunktprobleme	35
5.2	Löser für die Steifigkeitsmatrix	36
6	Diskretisierung von Evolutionsgleichungen	41
6.1	Gleichungen erster Ordnung	42
6.2	Gleichungen zweiter Ordnung	42
7	Numerische Experimente	45
7.1	Die Helmholtz-Gleichung	46
7.2	Der Laplace-Operator	64
7.3	Evolutionsgleichungen	70
8	Schlußbemerkungen	87
8.1	Zusammenfassung	87
8.2	Ausblick	88
	Literaturverzeichnis	89

Tabellenverzeichnis

7.1	Helmholtz, äquidistant, W_i linear, V_i^h linear, Fehlernormen	48
7.2	Helmholtz, äquidistant, W_i linear, V_i^h linear, Konvergenzordnungen	49
7.3	Helmholtz, äquidistant, W_i quadratisch, V_i^h linear, Fehlernormen	53
7.4	Helmholtz, äquidistant, W_i quadratisch, V_i^h linear, Konvergenzordnungen	54
7.5	Helmholtz, Halton, W_i quadratisch, V_i^h linear, Fehlernormen	57
7.6	Helmholtz, Halton, W_i kubisch, V_i^h linear, Fehlernormen	58
7.7	Helmholtz, Halton, W_i quadratisch, V_i^h linear, Konvergenzordnungen	63
7.8	Helmholtz, Halton, W_i kubisch, V_i^h linear, Konvergenzordnungen	64
7.9	Helmholtz, äquidistant, W_i quadratisch, V_i^h linear, Fehlernormen	65
7.10	Helmholtz, äquidistant, W_i quadratisch, V_i^h linear, Konvergenzordnungen	67
7.11	Helmholtz, Halton, W_i linear, p-Version, Fehlernormen	68
7.12	Helmholtz, Halton, W_i linear, p-Version, Konvergenzordnungen	70
7.13	Helmholtz, Halton, W_i linear, p-Version, Fehlernormen	71
7.14	Helmholtz, Halton, W_i linear, p-Version, Konvergenzordnungen	72
7.15	Laplace, äquidistant, W_i linear, V_i^h linear, Fehlernormen	72
7.16	Laplace, gradiert, W_i linear, V_i^h linear, Fehlernormen	75

Abbildungsverzeichnis

2.1	Nachbarschaft	11
3.1	Konstruktion des Spline-Gitters zur Integration	23
3.2	Konstruktion des Nachbar-Gitters zur Integration	24
7.1	Graph von $u(x, y) = \arctan(100(\frac{x+y}{\sqrt{2}} - 0.8)(x - x^2)(y - y^2))$	46
7.2	Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade	50
7.3	Die Funktion φ_i der Partition der Eins eines inneren Partikels x_i . Zur Konstruktion der Partition der Eins wurden quadratische Gewichte und eine äquidistante Punktfolge mit 256 Punkten verwendet.	51
7.4	Fehler $u - u_h$ für die Approximierende u_h bezüglich einer äquidistanten Punktfolge mit 256 Punkten	51
7.5	Die Ableitungen der Funktion φ_i eines inneren Partikels x_i zu einer äquidistanten Punktfolge mit 256 Punkten und quadratischen Gewichten.	52
7.6	Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade	55
7.7	Partikelverteilung für eine Haltonpunktfolge mit 256 Punkten	56
7.8	Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade	59
7.9	Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade	60
7.10	Die Funktion φ_i der Partition der Eins eines inneren Partikels x_i . Zur Konstruktion der Partition der Eins wurden quadratische Gewichte und eine Haltonpunktfolge mit 256 Punkten verwendet.	61
7.11	Fehler $u - u_h$ für die Approximierende u_h bezüglich einer Haltonpunktfolge mit 256 Punkten	61
7.12	Die Ableitungen der Funktion φ_i eines inneren Partikels x_i zu einer Haltonpunktfolge mit 256 Punkten und quadratischen Gewichten.	62
7.13	Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade	66
7.14	Die Basisfunktion $\varphi_i \psi_k^i(x, y) = \varphi_i(x, y) \mathcal{L}_2^i(x) \mathcal{L}_3^i(y)$	68
7.15	Ableitungen der Basisfunktion $\varphi_i \psi_k^i(x, y) = \varphi_i(x, y) \mathcal{L}_2^i(x) \mathcal{L}_3^i(y)$	69
7.16	Graph von $u(x, y) = e^{4(x+y)}$	70
7.17	Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade	73
7.18	Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade	74

7.19	Fehler $u - u_h$ in L^1 -Norm (a), L^2 -Norm (b) und L^∞ -Norm (c) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade, (*1) bezeichnen die mittels der gradierten Punktfolge ermittelten Graphen	76
7.20	Fehler $u - u_h$ und die jeweilige gradierte Partikelverteilung	77
7.21	Höhenlinien der Approximierenden und Partikelverteilung für das Konvektions-Problem	79
7.22	Startwert und die Approximierende nach 40 Zeitschritten	79
7.23	Höhenlinien der Approximierenden für das Konvektions-Problem	80
7.24	Höhenlinien der Approximierenden für das Diffusions-Problem mit konstanten Koeffizienten	82
7.25	Höhenlinien der Approximierenden für das Diffusions-Problem mit springenden Koeffizienten	83
7.26	Höhenlinien der Approximierenden für das Konvektions-Diffusions-Problem . . .	84

Kapitel 1

Einleitung

In vielen numerischen Simulationen physikalischer Phänomene wird ein großer Teil des gesamten Aufwands für technische Details benötigt, die mit der Erzeugung von Gittern zusammenhängen. Dazu gehören unter anderem die Gittergenerierung selbst, die Anpassung des Gitters an die (sich zeitlich verändernde) Gebietsgeometrie, die Adaption des Gitters an Singularitäten der Lösung und die Anpassung des Gitters an die Lösung bei zeitabhängigen Problemen. In der Lagrange-schen Sicht läßt sich die Anpassung des Gitters an die sich zeitlich verändernde Lösung durch die Bewegung des Gitters realisieren [BA94]. Die dadurch hervorgerufene Verformung des Gitters kann jedoch eine Verlangsamung oder sogar den Zusammenbruch der Berechnung zur Folge haben. In der Eulerschen Sicht wird das Gitter nicht bewegt, sondern es wird versucht, das Gitter durch lokale Verfeinerung und Vergröberung der Lösung anzupassen. Dieser Ansatz birgt in sich jedoch algorithmische Schwierigkeiten und ist zudem relativ aufwendig.

Um viele dieser Probleme und den mit ihnen verbundenen Aufwand zu umgehen, wurden in jüngerer Zeit die sogenannten *gitterlosen Diskretisierungsverfahren* und *Partikelmethoden* (weiter-) entwickelt. Diese Verfahren benötigen im Gegensatz zu herkömmlichen Diskretisierungsverfahren keine Gitter, sondern verwenden nur Punkte zur Diskretisierung zwischen denen keine starren Verbindungen bestehen. Ein Überblick über die in der Literatur zu findenden gitterlosen Verfahren liefern [DUA] und [BKOFK]. Diese Verfahren können in verschiedene Klassen eingeteilt werden. Einige Verfahren, wie beispielsweise die *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) Methode, verwenden die Punkte als *Kollokationspunkte*, um zu einer diskreten Problemstellung zu gelangen. Die reinen *Partikelmethoden* betrachten die *Dichte* der Punktverteilung als Näherung an die zu untersuchende Größe. Andere Verfahren verwenden die Punkte zur Konstruktion von Ansatz- und Testfunktionen für eine Diskretisierung nach dem Variationsprinzip [GR92]. Zu diesen Verfahren zählen die *Hp Clouds* von Duarte und Oden [DO95] und die *Partition of Unity Method* (PUM) von Babuška und Melenk [BM96], [BM97]. Weitere Vorteile von gitterlosen Methoden ergeben sich hinsichtlich der adaptiven Varianten der Verfahren. Da die Punkte untereinander unabhängig sind, läßt sich eine lokal feinere Auflösung durch einfache Hinzunahme von Punkten realisieren (h-Version). Auch eine lokale Erhöhung des Polynomgrads der Ansatzfunktionen erzeugt eine lokal feinere Auflösung (p-Version).

Das in dieser Arbeit untersuchte gitterlose Diskretisierungsverfahren verwendet als Variante der PUM die Punkte zur Konstruktion von Ansatz- und Testfunktionen, die dann über die Variationsformulierung der zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichung zu einem endlich-dimensionalen Gleichungssystem als diskreter Formulierung führen. Die Konstruktion der Ansatz- und Testfunktionen wird hierbei in zwei Schritten vollzogen. Die Punkte oder *Partikel* dienen jeweils als Aufpunkt eines lokalen Raums V_i^h , und sie werden zur Konstruktion einer *Partition der Eins* (PU) $\{\varphi_i\}$ verwendet, die die lokalen Räume V_i^h zu einem globalen Raum V^h von Ansatz-

und Testfunktionen zusammenfaßt.

$$V^h := \{ u^h \mid u^h = \sum_{i=1}^N \varphi_i v_i^h, v_i^h \in V_i^h \}$$

Durch die Unabhängigkeit der Partikel sind auch die lokalen Räume V_i^h untereinander unabhängig, so daß bekanntes Verhalten der Lösung einfach in den Raum der Ansatz- und Testfunktionen *konform* integriert werden kann. Die Partition der Eins kann beispielsweise mittels der *Moving Least Squares Method* (MLSM) konstruiert werden, siehe [DO95]. Die von uns verwendete PU wird mit der MLSM 0-ter Ordnung konstruiert, d.h. wir verwenden die bekannten *Shepard* Funktionen. Die Behandlung einer elliptischen partiellen Differentialgleichung mit diesem Verfahren läßt sich in folgende Schritte unterteilen:

- Konstruiere zu einer gegebenen Punktfolge $\{x_i\}$ eine Partition der Eins.
- Wähle zu jedem Punkt bzw. Partikel x_i einen Raum V_i^h und fasse diese Räume mit der Partition der Eins $\{\varphi_i\}$ zu einem Raum V^h zusammen.

$$V^h := \{ u^h \mid u^h = \sum_{i=1}^N \varphi_i v_i^h, v_i^h \in V_i^h \}$$

- Verwende den so konstruierten Raum V^h als Ansatz- und Testraum für das *Galerkinverfahren*.
- Löse das entstandene Gleichungssystem.

Bei der Untersuchung zeitabhängiger Probleme ist zusätzlich in jedem Zeitschritt die Bewegung der Partikel (zur Anpassung an die neue Geometrie etc.) durchzuführen. Da aber keine Abhängigkeiten oder starre Verbindungen unter den Partikeln existieren, ist diese Bewegung unproblematisch und nur von geringem Aufwand.

Der weitere Aufbau dieser Arbeit orientiert sich an diesen Schritten. In Abschnitt 2 wird der Raum der Ansatzfunktionen V^h konstruiert. Hierbei wird die Auswahl einer Basis von V^h erörtert. Anschließend wird in Abschnitt 3 das Galerkinverfahren mit diesen Ansatzfunktionen als Diskretisierungsverfahren vorgestellt. Dabei wird die Integration der schwachen Form der Differentialgleichung mit diesen Ansatz- und Testfunktionen untersucht. Die Diskretisierung von Randwerten mit dem Verfahren wird in Abschnitt 4 behandelt. Dirichlet-Randwerte stehen hierbei im Mittelpunkt, da die Dirichlet-Aufgabe zu Sattelpunktproblemen führt. Deshalb werden zu Beginn dieses Abschnitts kurz Sattelpunktprobleme untersucht. Das Lösen der durch die dargestellte Diskretisierung entstehenden Gleichungssysteme wird in Abschnitt 5 untersucht. Unser Ziel ist es, das Verfahren zur Diskretisierung von Evolutionsgleichungen einzusetzen, dementsprechend werden wir in Abschnitt 6 die diskreten Schemata für deren Behandlung mit dem Verfahren aus der Lagrangeschen Sicht herleiten. Schließlich werden in Abschnitt 7 die Ergebnisse unserer numerischen Experimente präsentiert. Da bei der Behandlung von Evolutionsgleichungen die Partikelpositionen in jedem Zeitschritt verändert werden, wollen wir bei der Konstruktion des Raumes V^h nur auf Eigenschaften der Funktionen $u^h \in V^h$ eingehen, die von der Partikelverteilung unabhängig sind.

1.1 Grundlegende Definitionen und Notationen

Hier nun einige Definitionen und Notationen, welche im Verlauf der Arbeit verwendet werden, siehe auch [WLO82], [BRA97].

Definition 1.1 Wir sagen $u \in L^2(\Omega)$ besitzt eine schwache Ableitung v k -ten Grades, falls $v \in L^2(\Omega)$, α ein Multi-Index mit $|\alpha| = k$ und

$$\langle \varphi, v \rangle_{L^2(\Omega)} = (-1)^{|\alpha|} \langle \partial^\alpha \varphi, u \rangle_{L^2(\Omega)} \quad \forall \varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$$

gilt. Wir schreiben dann $\partial^\alpha u := v$.

Definition 1.2 (Sobolev-Räume) Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ gegeben. Wir definieren für ganzzahliges $\alpha \in \mathbb{N}_0$ den Sobolev-Raum $H^\alpha(\Omega)$ als die Menge aller Funktionen $u \in L^2(\Omega)$, für welche die schwachen Ableitungen $\partial^\beta u$ nach Definition 1.1 für $|\beta| \leq \alpha$ existieren.

$$H^\alpha(\Omega) := \{ u \in L^2(\Omega) \mid \forall \beta \ |\beta| \leq \alpha \ \exists v \text{ nach Definition 1.1} \}$$

Auf $H^\alpha(\Omega)$ führen wir das Skalarprodukt

$$\langle u, v \rangle_{H^\alpha(\Omega)} := \sum_{|\beta| \leq \alpha} \langle \partial^\beta u, \partial^\beta v \rangle_{L^2(\Omega)}$$

ein. Für beliebiges $0 < \lambda < 1$ definieren wir den Raum

$$H^{\alpha+\lambda}(\Omega) := \{ u \in L^2(\Omega) \mid \langle u, v \rangle_{H^{\alpha+\lambda}(\Omega)} < \infty \},$$

wobei wir

$$\begin{aligned} \langle u, v \rangle_{H^{\alpha+\lambda}(\Omega)} &:= \\ \langle u, v \rangle_{H^\alpha(\Omega)} &+ \sum_{|\beta|=\alpha} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{(\partial^\beta u(x) - \partial^\beta u(y))(\partial^\beta v(x) - \partial^\beta v(y))}{|x - y|^{d+2\lambda}} \end{aligned}$$

als Skalarprodukt auf $H^{\alpha+\lambda}(\Omega)$ definieren.

Definition 1.3 Sei Φ eine bijektive Transformation des Gebietes $U \subset \mathbb{R}^d$ auf das Gebiet $V \subset \mathbb{R}^d$. Φ heißt (k, κ) -Diffeomorphismus, wobei $k \in \mathbb{N}_0$, $0 \leq \kappa < 1$ gelte, falls sowohl die Abbildungsfunktionen $\phi_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ von Φ zur Klasse $\mathcal{C}^{k, \kappa}(\bar{U})$, als auch die Abbildungsfunktionen $\psi_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ der Umkehrfunktion Φ^{-1} zur Klasse $\mathcal{C}^{k, \kappa}(\bar{V})$ gehören. Desweiteren fordern wir, im Fall $k > 1$, für die Jacobideterminante von Φ

$$0 < c \leq \left| \det \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x) \right| \leq C \quad \forall x \in \bar{\Omega},$$

wobei c, C von x unabhängige Konstanten sind.

Definition 1.4 Wir sagen, daß der Bereich $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (k, κ) -glatt ist, wenn wir für jedes $x \in \partial\Omega =: \Gamma$ eine Umgebung U_x mit folgenden Eigenschaften finden können:

1. U_x ist (k, κ) -diffeomorph zum Einheitswürfel $W^d := \{x \mid -1 < x_i < 1\}$. Es sei Φ_x dieser Diffeomorphismus.
2. $\Phi_x|_{U_x \cap \Gamma} \rightarrow W^r \cap \{x_r = 0\}$, bijektiv
3. $\Phi_x|_{U_x \cap \Omega} \rightarrow W^r \cap \{0 < x_r < 1\}$, bijektiv
4. $\Phi_x|_{U_x \cap (\mathbb{R}^d \setminus \Omega)} \rightarrow W^r \cap \{-1 < x_r < 0\}$, bijektiv

Satz 1.1 (Spursatz) *Es sei Ω beschränkt und (k, κ) -glatt, und es sei $\frac{1}{2} < l \leq k + \kappa$. Dann existiert ein linearer stetiger Spuroperator*

$$\text{Tr} : H^l(\Omega) \rightarrow H^{l-1/2}(\partial\Omega)$$

mit der Eigenschaft

$$\text{Tr}(\varphi) = \varphi|_{\partial\Omega} \quad \forall \varphi \in C^l(\bar{\Omega})$$

(bzw. $\forall \varphi \in C^{[l]+1}(\bar{\Omega})$ für $l \notin \mathbb{N}$).

Satz 1.2 (Inverses Theorem) *Es sei Ω beschränkt und (k, κ) -glatt, und es sei $\frac{1}{2} < l \leq k + \kappa$. Dann existiert ein linearer stetiger Fortsetzungsoperator*

$$F : H^{l-1/2}(\partial\Omega) \rightarrow H^l(\Omega)$$

mit der Eigenschaft

$$\text{Tr} \circ F(\varphi) = \varphi \quad \forall \varphi \in H^{l-1/2}(\partial\Omega).$$

Zu einem Differentialoperator

$$Lu = \nabla(A\nabla u)$$

läßt sich mit Hilfe der *Greenschen Formel*

$$\int_{\Omega} v(\nabla w) = - \int_{\Omega} (\nabla v) w + \int_{\partial\Omega} vw\nu$$

und der Wahl $w = A\nabla u$ die dem Differentialoperator zugehörige Bilinearform

$$a(u, v) := - \int_{\Omega} (\nabla v) \cdot (A\nabla u) + \int_{\partial\Omega} v(A\nabla u) \cdot \nu$$

definieren. Mit dieser lassen sich die *schwache Formulierung* einer Randwertaufgabe

$$a(u, v) = f(v)$$

und das zugehörige Variationsproblem

$$J(v) := \frac{1}{2}a(u, v) - f(v) \rightarrow \min$$

definieren. Wobei für ein homogenes *Dirichlet-Problem*

$$\begin{aligned} Lu &= f \quad \text{auf } \Omega, \\ u &= 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ und die rechte Seite $f(\cdot)$ durch

$$\begin{aligned} a(u, v) &= \int_{\Omega} (\nabla v) \cdot (A\nabla u) \\ f(v) &= \int_{\Omega} fv \end{aligned}$$

gegeben sind. Für ein *Neumann-Problem*

$$\begin{aligned} Lu &= f \quad \text{auf } \Omega, \\ A\nabla u \cdot \nu &= g \quad \text{auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

ergibt sich für die rechte Seite $f(\cdot)$

$$f(v) = \int_{\Omega} fv - \int_{\partial\Omega} vg.$$

1.2 Das Galerkinverfahren

Für die numerische Lösung von elliptischen Randwertaufgaben bietet sich der Übergang auf das zugehörige Variationsproblem an. Dieses wird dann als Minimierungsaufgabe in einem endlich-dimensionalen Unterraum $S_h \subset V(\Omega)$ gelöst.

$$J(v) := \frac{1}{2}a(u, v) - f(v) \rightarrow \min_{v \in S_h}$$

Es ist $u_h \in S_h$ Lösung des Minimumproblems, wenn gilt

$$a(u_h, v) = f(v) \quad \forall v \in S_h. \quad (1.1)$$

Hat man insbesondere eine Basis $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\}$ des Raumes S_h gegeben, dann ist

$$a(u_h, \psi_i) = f(\psi_i) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

zu (1.1) äquivalent. Der Ansatz

$$u_h := \sum_{i=1}^N \xi_i \psi_i$$

führt zu dem Gleichungssystem

$$\sum_{k=1}^N a(\psi_k, \psi_i) \xi_k = f(\psi_i) \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

das in Matrix-Vektor-Form als

$$Ax = f$$

mit

$$A_{ik} := a(\psi_k, \psi_i), \quad f_i := f(\psi_i), \quad x := (\xi_k)_k$$

geschrieben werden kann. Das folgende *Céa-Lemma* zeigt die Optimalität der Lösung in S_h .

Lemma 1.1 (Céa-Lemma) *Die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ erfülle:*

$$a(u, u) \geq \alpha \|u\|_V^2 \quad \text{und} \quad |a(u, v)| \leq C \|u\|_V \|v\|_V \quad \forall u, v \in V. \quad (1.2)$$

Ferner seien u bzw. u_h die Lösungen der Variationsaufgabe in V bzw. in $S_h \subset V$. Dann gilt

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{C}{\alpha} \inf_{v_h \in S_h} \|u - v_h\|_V.$$

Beweis: Für die Lösungen gilt nach oben

$$\begin{aligned} a(u, v) &= f(v) \quad \forall v \in V \\ a(u_h, v) &= f(v) \quad \forall v \in S_h. \end{aligned}$$

Da $S_h \subset V$ ergibt sich durch Subtraktion

$$a(u - u_h, v) = 0 \quad \forall v \in S_h.$$

Es sei jetzt $v_h \in S_h$. Mit $v_h - u_h =: v \in S_h$ ergibt sich sofort

$$a(u - u_h, v_h - u_h) = 0.$$

Und somit gilt, mit obigen Forderungen an die Bilinearform

$$\begin{aligned}
 \alpha \|u - u_h\|_V^2 &\leq a(u - u_h, u - u_h) \\
 &= a(u - u_h, u - v_h) + a(u - u_h, v_h - u_h) \\
 &= a(u - u_h, u - v_h) \\
 &\leq C \|u - u_h\|_V \|u - v_h\|_V.
 \end{aligned}$$

Nach Kürzen erhalten wir $\alpha \|u - u_h\|_V \leq C \|u - v_h\|_V$ und damit die Behauptung. □

Für Bilinearformen, die (1.2) erfüllen, läßt sich auch zeigen, daß die entstehenden Steifigkeitsmatrizen A positiv definit sind.

$$x'Ax = \sum_{i,k} x_i A_{ik} x_k = \sum_{i,k} x_i a(\psi_k, \psi_i) x_k = a\left(\sum_{k=1}^N x_k \psi_k, \sum_{i=1}^N x_i \psi_i\right) = a(u_h, u_h) \geq \alpha \|u_h\|_V^2$$

Kapitel 2

Konstruktion der Ansatz- und Testfunktionen für das Galerkinverfahren

Die Approximationseigenschaften einer *Finite Element Methode* (FEM) basieren auf zwei grundlegenden Eigenschaften von Polynomräumen, welche die Wahl dieser als Ansatzfunktionen stark beeinflussen:

- **Lokale Approximierbarkeit**
eine glatte Funktion läßt sich lokal durch Polynome approximieren, und
- **Konformität**
Polynomräume sind “groß” genug, um zusätzliche globale Forderungen über die Elementgrenzen hinweg zu erfüllen.

Wir erwarten demnach, daß ein Funktionenraum, welcher gute lokale Approximationseigenschaften besitzt und in dem Konformität über diese lokalen Grenzen hinweg erzielt werden kann, zu einer guten Finite Element Methode führt. Daher müssen wir bei der Konstruktion eines Funktionenraums V^h , den wir zur Diskretisierung verwenden wollen, darauf achten, daß in V^h lokal gut approximiert werden kann und gleichzeitig die Funktionen $v_h \in V^h$ der geforderten globalen Regularität genügen. Um die lokale Approximationseigenschaft in V^h zu erhalten, können wir von den Funktionen $v_h \in V^h$ fordern, daß sie stückweise polynomial sind.

$$v_h|_{\Omega_i} = p_i \quad p_i \in \Pi_k$$

Damit die Funktionen v_h der globalen Regularität genügen, ergeben sich hierbei zusätzliche Forderungen an die lokalen Polynome p_i in der Nähe des Randes ihres jeweiligen Definitionsbereichs. Um diese Forderungen zu umgehen, wollen wir einen anderen Weg einschlagen. Betrachten wir zunächst die geforderte Konformität in V^h . Dazu wollen wir eine Überdeckung $\{\Omega_i\}$ des Definitionsbereichs Ω von V^h betrachten. Auf diesen Ω_i seien Funktionen φ_i gegeben, die der geforderten Regularität genügen. Zusätzlich seien auf den Ω_i lokale Funktionenräume V_i^h mit guten Approximationseigenschaften gegeben. Dann erfüllen

$$v_h := \sum_i \varphi_i v_i^h$$

die mittels der Funktionen φ_i zusammengefaßten lokalen Funktionen v_i^h die Glattheitsanforderungen. Damit die φ_i die Approximationseigenschaften in V_i^h nicht beeinträchtigen, fordern wir von den Funktionen φ_i , daß sie eine Partition der Eins auf den Ω_i bilden. In Folge dessen kann man den Raum V^h der Ansatz- und Testfunktionen als

$$V^h := \left\{ u^h \mid u^h = \sum_{i=1}^N \varphi_i v_i^h, v_i^h \in V_i^h \right\}.$$

mit den geforderten Eigenschaften definieren. Die Freiheitsgrade in V^h lassen sich in zwei Gruppen unterteilen. Die einen dienen dazu, die Konformität in V^h zu gewährleisten, die anderen geben dem Raum V^h die Approximationseigenschaft. Durch diese Trennung der Freiheitsgrade ergibt sich die Unabhängigkeit der lokalen Räume V_i^h , so daß diese dem Problem angepaßt gewählt werden können, ohne dabei die Konformität in V^h zu verletzen. Auf diesen Aspekt wollen wir allerdings nicht weiter eingehen. Um obige Beschreibung formalisieren zu können, wollen wir folgende Notationen einführen, siehe auch [MEL92], [MEL95], [BM96] und [BM97].

Definition 2.1 (Partition der Eins) *Eine der Überdeckung $\{\Omega_i\}$ untergeordnete Partition der Eins ist eine Menge von Lipschitz Funktionen $\{\varphi_i\}$, für die gilt*

$$\sum_i \varphi_i \equiv 1 \quad \text{auf } \Omega, \quad (2.1)$$

$$0 \leq \varphi_i \quad \text{für alle } i, \quad (2.2)$$

$$\text{supp}(\varphi_i) \subset \bar{\Omega}_i \quad \text{für alle } i. \quad (2.3)$$

Definition 2.2 *Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine offene Menge, $\{\Omega_i\}$ sei eine offene Überdeckung von Ω mit der Eigenschaft*

$$\exists M \in \mathbb{N} \quad \forall x \in \Omega \quad 0 < \text{card}\{i \mid x \in \Omega_i\} \leq M. \quad (2.4)$$

Es sei $\{\varphi_i\}$ eine der Überdeckung $\{\Omega_i\}$ untergeordnete Partition der Eins mit den Eigenschaften

$$\varphi_i \in \mathcal{C}^k(\mathbb{R}^n) \quad (2.5)$$

$$\|\varphi_i\|_{L_\infty} \leq C_\infty, \quad (2.6)$$

$$\|\nabla \varphi_i\|_{L_\infty} \leq \frac{C_{\text{grad}}}{\text{diam}(\Omega_i)}, \quad (2.7)$$

für alle i , wobei C_∞ und C_{grad} Konstanten seien. Dann bilden die Funktionen φ_i eine $(k, M, C_\infty, C_{\text{grad}})$ Partition der Eins bezüglich der Überdeckung $\{\Omega_i\}$.

Die Regularität der Partition der Eins, d.h. der Parameter k , ist für die Konformität entscheidend. Die weiteren Anforderungen werden gestellt, damit der Übergang von den lokalen Funktionen zu der globalen Lösung ohne Verlust der lokalen Approximationsgüte geschehen kann, siehe Satz 2.1.

Definition 2.3 (PUM-Raum) *Es sei $\{\Omega_i\}$ eine offene Überdeckung von $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ und $\{\varphi_i\}$ sei eine dieser Überdeckung untergeordnete $(k, M, C_\infty, C_{\text{grad}})$ Partition der Eins. Desweiteren seien $V_i^h \subset H^1(\Omega_i \cap \Omega)$ gegeben. Dann heißt der Raum*

$$V^h := \{\varphi_i v_i^h \mid v_i^h \in V_i^h\} \subset H^1(\Omega)$$

PUM-Raum des Grades k . Die Räume V_i^h werden als lokale Approximationsräume bezeichnet.

Satz 2.1 *Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ gegeben. Es seien $\{\Omega_i\}$, $\{\varphi_i\}$ und V_i^h wie in Definition 2.3. Es sei $u \in H^1$ die zu approximierende Funktion. Es gelte, daß auf jedem Ω_i u durch ein $v_i^h \in V_i^h$ so approximiert werden kann, daß*

$$\begin{aligned} \|u - v_i^h\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)} &\leq \epsilon_1(i), \\ \|\nabla(u - v_i^h)\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)} &\leq \epsilon_2(i) \end{aligned}$$

gelten. Dann gelten für

$$u^h := \sum_i \varphi_i v_i^h \in V^h \subset H^1(\Omega)$$

die Abschätzungen

$$\begin{aligned} \|u - u^h\|_{L^2(\Omega)} &\leq \sqrt{M} C_\infty \left(\sum_i \epsilon_1^2(i) \right)^{1/2}, \\ \|\nabla(u - u^h)\|_{L^2(\Omega)} &\leq \sqrt{2M} \left(\sum_i \left[\left(\frac{C_{grad}}{\text{diam}(\Omega_i)} \right)^2 \epsilon_1^2(i) + C_\infty^2 \epsilon_2^2(i) \right] \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Beweis: Entscheidend für den Beweis ist die Forderung (2.4) an die Überdeckung. Damit gilt für Funktionen $u_i \in H^1(\Omega)$, die $\text{supp}(u_i) \subset \Omega_i$ erfüllen, und für $u \in H^1(\Omega)$

$$\begin{aligned} \sum_i \|u\|_{H^k(\Omega_i \cap \Omega)}^2 &\leq M \|u\|_{H^k(\Omega)}^2 \\ \left\| \sum_i u_i \right\|_{H^k(\Omega)}^2 &\leq M \sum_i \|u_i\|_{H^k(\Omega_i \cap \Omega)}^2 \end{aligned}$$

für $k = 0, 1$. Betrachte dazu

$$\sum_i \int_{\Omega_i \cap \Omega} |u|^2 = \sum_i \int_{\Omega} \chi_{\Omega_i} |u|^2 = \int_{\Omega} \sum_i \chi_{\Omega_i} |u|^2 \leq \int_{\Omega} M |u|^2,$$

und

$$\int_{\Omega} \left(\sum_i u_i \right)^2 \leq \int_{\Omega} M \sum_i |u_i|^2 \leq M \sum_i \|u_i\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)}^2.$$

Aufgrund dieser Abschätzungen gilt jetzt

$$\begin{aligned} \|u - u^h\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \left\| \sum_i \varphi_i(u - u_i) \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq M \sum_i \|\varphi_i(u - u_i)\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)}^2 \\ &\leq M C_\infty^2 \sum_i \|u - u_i\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)}^2, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \|\nabla(u - u^h)\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \left\| \sum_i \nabla(\varphi_i(u - u_i)) \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &= \left\| \sum_i \nabla \varphi_i(u - u_i) \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \sum_i \varphi_i \nabla(u - u_i) \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\quad + 2 \left\| \sum_i \nabla \varphi_i(u - u_i) \right\|_{L^2(\Omega)} \left\| \sum_i \varphi_i \nabla(u - u_i) \right\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq 2 \left\| \sum_i \nabla \varphi_i(u - u_i) \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2 \left\| \sum_i \varphi_i \nabla(u - u_i) \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq 2M \sum_i \|\nabla \varphi_i(u - u_i)\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)}^2 + 2M \sum_i \|\varphi_i \nabla(u - u_i)\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)}^2 \\ &\leq 2M \sum_i \left(\frac{C_{grad}^2}{(\text{diam}(\Omega_i))^2} \epsilon_1^2(i) + C_\infty^2 \epsilon_2^2(i) \right). \end{aligned}$$

□

Bemerkung 2.1

Satz 2.1 zeigt, daß durch die Zusammenfassung lokaler Funktionen mittels einer PU nach Definition 2.2 die lokalen Fehlerordnungen verlustfrei auf ganz Ω übertragen werden. Das Problem bei der Anwendung dieses Satzes ist die Tatsache, daß die lokalen Fehler $\epsilon(i)$ nur grob abgeschätzt werden können. Nach Lemma 1.1 erhalten wir die Bestapproximierende $u^h \in S_h = V^h$ als Lösung beim gewählten Ansatz, so daß wir uns zur Abschätzung des Fehlers auf eine beliebige Funktion $v^h \in V^h$ zurückziehen können. Betrachten wir daher v^h , die Zusammenfassung der *lokal-optimalen* Funktionen, so erhalten wir für diese lokalen Fehler $\epsilon_k(i)$ eine Fehlerabschätzung. Das Verfahren wählt allerdings *nicht* die lokal-optimalen Funktionen $\hat{v}_i^h \in V_i^h$ aus, sondern berücksichtigt bei der Konstruktion der lokalen Funktionen v_i^h auch deren Wechselwirkung mit den Funktionen $v_j^h \in V_j^h$ für alle j mit $\Omega_j \cap \Omega_i \neq \emptyset$. Das Verfahren verwendet also mehr Information als der lokale Raum V_i^h liefert und wählt die lokalen Funktionen in Hinblick auf ihr globales Verhalten aus. Deswegen erwarten wir für die vom Verfahren konstruierte globale Funktion u^h ein besseres Verhalten auf Ω als wir für v^h zeigen können. In welchem Ausmaß sich dies positiv auf die Konvergenzordnungen des Verfahrens auswirkt ist jedoch unklar. Es ist allerdings zu erwarten, daß sich die lokalen Ordnungen als untere Grenze der globalen Fehlerentwicklung heranziehen lassen.

2.1 Konstruktion der Partition der Eins

Nach Definition 2.3 benötigen wir zur Konstruktion eines PUM-Raums eine Überdeckung des Gebietes und eine der Überdeckung untergeordnete Partition der Eins. Da der Konstruktion der Ansatz- und Testfunktionen $v^h \in V^h$ eine Punktfolge zugrunde liegt, haben wir die Überdeckung $\{\Omega_i\}$ bezüglich dieser Punktfolge zu bestimmen.

2.1.1 Von Partikeln zu einer Überdeckung

Die offensichtlichen Forderungen an die Konstruktion einer Überdeckung zu einer vorgegebenen Punktfolge $\{x_i \mid i = 1, \dots, N\}$ sind

$$\bar{\Omega} \subset \bigcup_{i=1}^N \Omega_i, \quad (2.8)$$

$$x_i \in \Omega_i \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.9)$$

Die Forderung (2.7) an die PU schränkt die Wahl der Gestalt der Ω_i ein. Um (2.7) zu erfüllen, muß es möglich sein, in jedes Ω_i einen Kreis mit Radius $r = C \text{diam}(\Omega_i)$ einzubeschreiben. Desweiteren wird durch die Überdeckung der Parameter M (2.4) der PU festgelegt. Dieser Parameter beschreibt punktweise die *Nachbarschaftsrelationen* der Ω_i untereinander, d.h. wieviele Ω_i diesen Punkt überdecken und somit wieviele Ω_i dort *Nachbarn* sind.

Definition 2.4 *Gilt für zwei Elemente Ω_i, Ω_j einer Überdeckung $\{\Omega_k\}$ von Ω $\Omega_i \cap \Omega_j \neq \emptyset$, so wollen wir die ihnen zugrundeliegenden Partikel x_i, x_j als Nachbarn bezeichnen. Die Menge aller Nachbarn eines Partikels x_i wollen wir mit*

$$N_i = \{x_j \mid \Omega_i \cap \Omega_j \neq \emptyset\}$$

bezeichnen.

Definition 2.5 *Gilt für ein Element Ω_i einer Überdeckung $\{\Omega_k\}$ von Ω , daß dieses Element den Rand des Gebiets überlappt $\Omega_i \cap \partial\Omega \neq \emptyset$, so wollen wir das zugrundeliegende Partikel x_i als randnahe bezeichnen. Die Menge aller randnahen Partikel x_i wollen wir mit*

$$R^h = \{x_i \mid \Omega_i \cap \partial\Omega \neq \emptyset\}$$

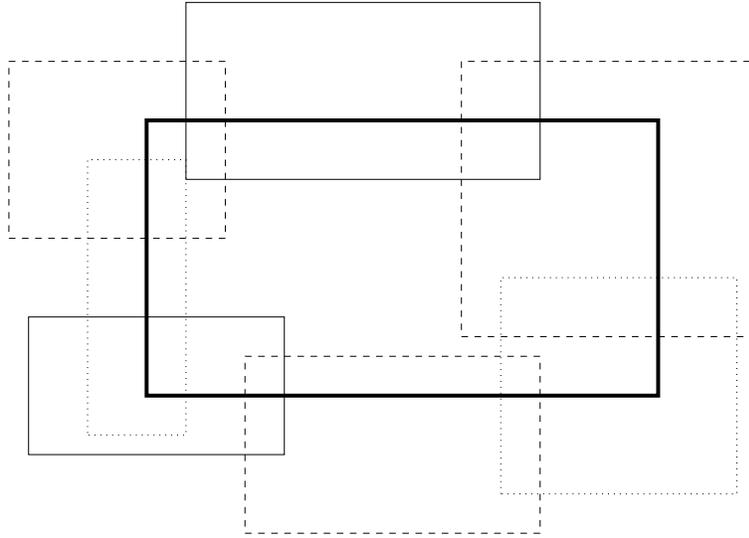


Abbildung 2.1. Nachbarschaft

bezeichnen.

An den Mengen N_i läßt sich die Besetzungsstruktur und Besetzungsdichte der entstehenden Steifigkeitsmatrizen beim Galerkinansatz mit dem PUM-Raum direkt ablesen. Denn die Matrixeinträge

$$a_{ij} = a(\psi_j, \psi_i)$$

verschwinden nur dann nicht, wenn die Supports Ω_i, Ω_j der Funktionen ψ_i, ψ_j einen nicht leeren Schnitt haben. Daher sind nur für benachbarte Partikel nicht verschwindende Matrixeinträge möglich. Die Kontrolle der Mengen N_i und somit der Überdeckung $\{\Omega_i\}$ ist daher für die Beschränkung des Aufwands notwendig.

Bemerkung 2.2

Bei einer gitterbasierten Methode sind die Supports der Ansatz- und Testfunktionen als Vereinigung von benachbarten Gitterzellen definiert. Im Fall eines äquidistanten Gitters haben demzufolge alle Mengen N_i eine analoge Struktur und die gleiche Mächtigkeit. Da hierbei auch alle Basisfunktionen ähnlich sind, entsteht die bekannte "Stern"-Struktur der Steifigkeitsmatrix.

Die Konstruktion einer Überdeckung zu einer gegebenen Punktfolge ist in vielen gitterlosen Verfahren notwendig. Daher gibt es verschiedene Algorithmen, die diese Aufgabe lösen. In [DO95] wird der folgende Algorithmus, der seinen Ursprung in der SPH Methode hat, verwandt.

1. Setze für alle $i = 1, \dots, N$ die Supports Ω_i so, daß $\text{diam}(\Omega_i) = 0$ gilt.
2. Wähle zu jedem Partikel x_i ein in diesem Partikel zentriertes Suchquadrat der Kantenlänge R , wobei R eine gewählte obere Grenze für $\text{diam}(\Omega_i)$ sei. Bestimme die Menge $S_{i,R}$ aller Partikel x_j , die in diesem Suchquadrat liegen. Gilt $S_{i,R} = \{x_i\}$, vergrößere R und bestimme die Menge $S_{i,R}$ für dieses R .
3. Bestimme unter den Partikeln $x_k \in S_{i,R}$ das Partikel $x_j \neq x_i$ mit geringstem Abstand zu x_i . Setze Ω_j so, daß $x_i \in \Omega_j$ gilt.

Zu berücksichtigen ist bei diesem Algorithmus allerdings die Tatsache, daß er nur für bestimmte Partikelverteilungen in dieser einfachen Fassung eine Überdeckung liefert. Sind beispielsweise keine Partikel auf dem Rand des Gebiets zu finden, so ist es möglich, daß der Rand nicht überdeckt wird. Oder verwendet man obigen Algorithmus zur Konstruktion einer Überdeckung zu einer Punktfolge mit mehreren Häufungspunkten, so kann es sein, daß nur disjunkte Umgebungen der Häufungspunkte überdeckt werden. Es ist daher notwendig, die Punktfolge x_i um eine Hilfspunktfolge ξ_k zu ergänzen, welche die oben erwähnten Probleme ausschließt. Wir erhalten dann den Algorithmus:

1. Setze für alle $i = 1, \dots, N$ die Supports Ω_i so, daß $\text{diam}(\Omega_i) = 0$ gilt. Definiere $Q := \{x_i\} \cup \{\xi_k\}$.
2. Wähle zu jedem $y \in Q$ ein in y zentriertes Suchquadrat der Kantenlänge R , wobei R eine gewählte obere Grenze für $\text{diam}(\Omega_i)$ sei. Bestimme die Menge $S_{y,R}$ aller Partikel x_j , die in diesem Suchquadrat liegen. Gilt $y = x_i$ und $S_{y,R} = \{y\}$, oder $y = \xi_l$ und $S_{y,R} = \emptyset$, vergrößere R und bestimme die Menge $S_{y,R}$ für dieses R .
3. Bestimme unter den Partikeln $x_k \in S_{y,R}$ das Partikel $x_j \neq y$ mit geringstem Abstand zu y . Setze Ω_j so, daß $y \in \Omega_j$ gilt.

Bei einer effizienten Bestimmung der Mengen $S_{y,R}$ kann dieser Algorithmus mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(\text{card}(Q) \log N)$ realisiert werden. Die Klasse der Bisektionsalgorithmen bietet eine weitere Strategie zur Bestimmung einer Überdeckung. Dabei wird das Grundgebiet in "Patches" aufgeteilt, so daß immer das gesamte Gebiet verteilt wird und somit obige Probleme nicht auftreten können. Ein Bisektionsalgorithmus, der eine möglichst gleichmäßige Verteilung des Gebiets auf die Partikel realisiert, versucht gleichzeitig das Gebiet Ω und die Anzahl der Partikel zu halbieren. Auf diese Art werden die Mengen N_i "minimal" konstruiert. Bei den meisten Bisektionsalgorithmen wird jedoch nur das Gebiet (bzw. eine Zelle der Zerlegung) in jedem Schritt halbiert, wobei die Anzahl der Punkte in den Zellen die weiteren Halbierungen steuert. Daher können bei diesen Algorithmen Zellen entstehen, die kein Partikel x_i enthalten. Die Zuordnung dieser Zellen zu einem Überdeckungselement Ω_i - für das $x_i \in \Omega_i$ gilt - ist nur bedingt motivierbar. Bei dem Entwurf eines angepaßten Bisektionsalgorithmus sollte daher das Auftreten leerer Zellen vermieden werden. In unseren Experimenten haben wir einen einfachen Algorithmus verwendet, der nur eine Überdeckung liefert, ohne dabei speziell auf die Kontrolle der Nachbarschaften N_i einzugehen. Der oben beschriebene Algorithmus aus [DO95] wurde dazu etwas verändert. Wir haben als Menge Q die Knoten eines feinen äquidistanten Gitters eingesetzt und $R = 2 \text{diam}(\Omega)$ als Kantenlänge des Suchquadrats gewählt, so daß wir für jedes $y \in Q$ ganz Ω absuchen. Zur Wahl der Geometrie der Ω_i , ist die beim Galerkinansatz notwendige Integration der Ansatz- und Testfunktionen zu beachten. Eine allgemeine Geometrie der Ω_i führt zu komplizierten Integrationsgebieten $\Omega \cap \Omega_i \cap \Omega_j$. Da wir uns zur Integration über diese Gebiete auf ein Standard Gebiet - beispielsweise $[-1, +1]^d$ - zurückziehen wollen, ist eine entsprechende Transformation zu konstruieren. Bei der Wahl $\Omega_i = B_{h_i}(x_i)$ in x_i zentrierter Bälle als Überdeckungselemente Ω_i sind die Schnitte $\Omega_i \cap \Omega_j$ geometrisch komplexer und schwer zu parametrisieren, deshalb ist die Konstruktion einer solchen Transformation bereits bei dieser Wahl der Ω_i erschwert. Desweiteren wird die Bestimmung der Nachbarschaften N_i und der Entwurf einer Datenstruktur zur effizienten Auswertung der Partition der Eins durch allgemeine Geometrien erschwert. Setzen wir achsenparallele Rechtecke als Ω_i ein, haben die Schnitte $\Omega_i \cap \Omega_j$ dieselbe einfache Geometrie. In Folge dessen haben wir in dieser Untersuchung achsenparallele Rechtecke als Ω_i eingesetzt.

2.1.2 Von einer Überdeckung zu einer Partition der Eins

Nachdem die Überdeckung gewählt ist, muß eine ihr untergeordnete Partition der Eins angegeben werden. Wir verwenden in dem Verfahren eine nach Shepard konstruierte Partition der Eins. Für

diese Konstruktion benötigt man eine Menge von Funktionen $\{W_i\}$, deren Supports $\{\Omega_i\}$ eine Überdeckung des Gebiets liefern. Nehmen wir also an, daß wir auf der konstruierten Überdeckung $\{\Omega_i\}$ Funktionen $\{W_i\}$ definiert haben. Dann lassen sich mit diesen W_i die Funktionen

$$\varphi_i := \frac{W_i}{\sum_j W_j}$$

definieren. Diese $\{\varphi_i\}$ bilden offensichtlich für jede Menge nicht negativer Lipschitz Funktionen $\{W_i\}$ eine Partition der Eins nach Definition 2.1. Die Funktionen $\{\varphi_i\}$ erben bei diesem Ansatz ihre Eigenschaften von den gewählten Funktionen $\{W_i\}$, daher lassen sich mit diesem Ansatz Partitionen beliebiger Regularität konstruieren, denn

$$\left(W_i \in \mathcal{C}^k(\mathbb{R}^n) \quad \wedge \quad \forall x \sum_i W_i(x) \neq 0 \right) \Rightarrow \varphi_i \in \mathcal{C}^k(\mathbb{R}^n).$$

Sind alle W_i nicht negativ auf ihren Supports $\text{supp}(W_i) = \overline{\Omega_i}$ und besitzen keine Nullstellen im Inneren Ω_i , dann ist die Bedingung $\forall x \sum_i W_i(x) \neq 0$ bereits durch die Forderung (2.4) erfüllt. Um jedoch auch unsere Zusatzforderungen aus Definition 2.2 zu erfüllen, müssen die Gewichte W_i so gewählt werden, daß (2.7) erfüllt wird.

$$\begin{aligned} \|\nabla \varphi_i\|_{L^\infty} &= \left\| \frac{\nabla W_i \sum_i W_i - W_i \sum_i \nabla W_i}{(\sum_i W_i)^2} \right\|_{L^\infty} \\ &\leq \frac{\|\nabla W_i \sum_i W_i\|_{L^\infty} + \|W_i \sum_i \nabla W_i\|_{L^\infty}}{|\sum_i W_i|^2} \\ &\stackrel{!}{\leq} \frac{C_{grad}}{\text{diam } \Omega_i} \end{aligned}$$

Bemerkung 2.3

Die Effizienz der Auswertung der Funktionen $\{\varphi_i\}$ hängt wiederum eng mit der Kontrolle der Nachbarschaften zusammen, denn man hat die Summation im Nenner nur für die Gewichte der Nachbarn $x_k \in N_i$ auszuführen.

Bemerkung 2.4

Bilden die $\{W_i\}$ bereits eine PU, so wird diese durch den Ansatz reproduziert, d.h. es gilt $\varphi_i = W_i$. Ein Beispiel hierfür ist die Wahl der Hutfunktionen auf einem äquidistanten Gitter. Damit ist die Standard FE Methode ein Spezialfall unseres Ansatzes.

Die Wahl der W_i wird nur von der gewünschten Regularität eingeschränkt. Man kann auf allen Ω_i unterschiedliche W_i einsetzen, doch werden diese Unterschiede durch die *Normalisierung* nach Shepard wieder ausgemittelt. Beispielsweise gilt unabhängig von den gewählten W_i für eine minimale Überdeckung, d.h. $M = 1$,

$$\varphi_i = \frac{W_i}{\sum_j W_j} = \frac{W_i}{W_i} \equiv 1.$$

Es ist also nur bedingt möglich, bestimmtes lokales Verhalten der Lösung auf Ω_i über die W_i zu simulieren. Daher haben wir auf allen Ω_i eine Transformierte W_i einer Referenzfunktion W eingesetzt. Diese Referenzfunktion W wurde aufgrund der rechteckigen Gestalt der Ω_i als Tensorprodukt

aus 1-D Funktionen S angesetzt. Damit ergeben sich die W_i wie folgt:

$$\begin{aligned}\Omega_i &:= \prod_{k=1}^d [x_i^k - h_i^k, x_i^k + h_i^k] \\ S &: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \\ W &: \prod_{k=1}^d [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \\ W &: (x^k)_k \mapsto \prod_{k=1}^d S(x^k) \\ \psi_i &: \Omega_i \rightarrow \prod_{k=1}^d [0, 1] \\ \psi_i &: (x^k)_k \mapsto \left(\frac{x - x_i^k + h_i^k}{2h_i^k} \right)_k \\ W_i(x) &:= W \circ \psi_i(x)\end{aligned}$$

Als Ausgangsfunktion S werden verschiedene normierte B-Splines eingesetzt.

$$S_1(x) = 2 \begin{cases} x & : 0 < x \leq \frac{1}{2} \\ 1 - x & : \frac{1}{2} < x \leq 1 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

$$S_2(x) = 6 \begin{cases} x^2 & : 0 < x \leq \frac{1}{3} \\ \frac{1}{9} + \frac{2}{3}(x - \frac{1}{3}) - 2(x - \frac{1}{3})^2 & : \frac{1}{3} < x \leq \frac{2}{3} \\ (1 - x)^2 & : \frac{2}{3} < x \leq 1 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

$$S_3(x) = 16 \begin{cases} x^3 & : 0 < x \leq \frac{1}{4} \\ \frac{1}{64} + \frac{3}{16}(x - \frac{1}{4}) + \frac{3}{4}(x - \frac{1}{4})^2 - 3(x - \frac{1}{4})^3 & : \frac{1}{4} < x \leq \frac{2}{4} \\ \frac{1}{64} + \frac{3}{16}(\frac{3}{4} - x) + \frac{3}{4}(\frac{3}{4} - x)^2 - 3(\frac{3}{4} - x)^3 & : \frac{2}{4} < x \leq \frac{3}{4} \\ (1 - x)^3 & : \frac{3}{4} < x \leq 1 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

Mit diesen Splines S_k lassen sich jetzt $\varphi_i \in \mathcal{C}^{k-1}$ konstruieren, und somit Lösungen $u_h \in \mathcal{C}^{k-1}$ berechnen.

2.2 Lokale Approximationsräume

Das Verfahren erlaubt die Verwendung beliebiger lokaler Approximationsräume, die unabhängig voneinander gewählt werden können. Damit läßt sich spezielles lokales Verhalten - wie bekannte Singularitäten oder lokal hochfrequentes Verhalten der Lösung - in den Raum der Ansatzfunktionen übertragen. Da die Konformität mittels der PU und die Approximationseigenschaft des Raums V^h über die lokalen Räume V_i^h erreicht werden, ist es möglich, diese speziell angepaßten Ansatzräume *konform* zu konstruieren. Dies läßt sich mit einer Standard FE Methode in der Regel nur *nicht-konform* realisieren.

In dieser Arbeit soll der Ansatz mit dem PUM-Raum allerdings als Partikelverfahren untersucht werden, d.h. es sollen keinerlei Voraussetzungen an die Partikelverteilung gestellt werden. Daher können diese Eigenschaften des Ansatzes nicht ausgenutzt werden. Um lokales Verhalten in den PUM-Raum zu übertragen, ist das Einfügen von Partikeln in dem jeweiligen Bereich notwendig, da diese als Aufpunkte der speziellen lokalen Räume V_i^h benötigt werden. Damit wird die Wahl der V_i^h bei unserer Untersuchung nur durch die notwendige Realisierung der Approximationseigenschaft getroffen. Als lokale Räume werden daher Polynomräume eingesetzt. Es kommen in dieser Untersuchung als V_i^h ausschließlich Transformierte eines Referenzraumes Π zum Einsatz. Der Referenzraum Π wird aufgrund der rechteckigen Gestalt der Ω_i als Produkt von 1-D Polynomräumen angesetzt. Dabei gibt es die Möglichkeit, einen Raum Π_k^1 der "vollständigen" Polynome in mehreren Variablen oder auch den Tensorproduktraum Π_k^2 zu konstruieren.

$$\begin{aligned} \psi_i : \Omega_i &\rightarrow [-1, 1]^d \\ \Pi_k^1([-1, 1]^d, \mathbb{R}) &= \text{span}\{x^\alpha \mid |\alpha| = 0, 1, \dots, k\} \\ \Pi_k^2([-1, 1]^d, \mathbb{R}) &= \text{span}\left\{\prod_{l=1}^d x_l^{j_l} \mid j_l = 0, 1, \dots, k\right\} \\ V_i^h(\Omega_i, \mathbb{R}) &:= \{p \mid p = \hat{p} \circ \psi_i \quad \hat{p} \in \Pi_k^m\} \end{aligned}$$

Babuška und Melenk haben in ihren Arbeiten [MEL92], [MEL95], [BM96], [BM97] den oben erwähnten Aspekt des Ansatzes untersucht. Dabei wurden Räume harmonischer Polynome für die V_i^h verwendet.

2.3 Globale Basen des PUM-Raums V^h

Nachdem die Partition der Eins konstruiert und die lokalen Approximationsräume gewählt sind, stellt sich die Frage nach der Auswahl einer Basis des Ansatzraumes V^h . Um zu untersuchen, unter welchen Umständen die Funktionen $\varphi_i \psi_k^i$ eine Basis von V^h bilden, wobei die Funktionen ψ_k^i eine Basis von V_i^h seien, sei folgende 1-D Situation mit $h = 1/(n+1)$ gegeben.

$$\begin{aligned} x_j &= jh \quad j = 0, 1, \dots, n \\ \varphi_j(x) &= \begin{cases} 1 + \frac{x-x_j}{h} & : x \in (x_j - h, x_j] \\ 1 - \frac{x-x_j}{h} & : x \in (x_j, x_j + h] \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \\ V_0^h &= \text{span}\{x, x^2, \dots, x^n\} \\ V_j^h &= \text{span}\{1, x - x_j, (x - x_j)^2, \dots, (x - x_j)^n\} \end{aligned}$$

Mit dieser ergibt sich als PUM-Raum

$$V^h = \text{span}\{\varphi_0(x)x^n, \varphi_j(x)(x - x_j)^n\},$$

für $j = 1, \dots, n$, $m = 1, \dots, p$ und $k = 0, \dots, p$. Dieser Raum entspricht $\hat{\Pi}_0^{p+1}$, dem Raum der stückweisen Polynome vom Grade $p + 1$ die in $x = 0$ verschwinden. Wählen wir $p = 1$ und betrachten

$$\sum_i \varphi_i \sum_k c_k^i \psi_k^i = 0.$$

Auf dem Intervall $(0, h)$ leben nur die Funktionen $\varphi_0(x)x$, $\varphi_1(x)$ und $\varphi_1(x)(x - h)$. Da die PU in diesem Beispiel explizit gegeben ist, läßt sich damit die Linearkombination dieser Funktionen bestimmen, die auf $(0, h)$ die Nullfunktion darstellt.

$$\begin{aligned} \varphi_0(x)x &= \begin{cases} x - \frac{x^2}{h} & : x \in [0, h] \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \\ \varphi_1(x) &= \begin{cases} 1 + \frac{x-h}{h} & : x \in (0, h] \\ 1 - \frac{x-h}{h} & : x \in (h, 2h] \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \\ \varphi_1(x)(x-h) &= \begin{cases} (x-h) + \frac{(x-h)^2}{h} & : x \in (0, h] \\ (x-h) - \frac{(x-h)^2}{h} & : x \in (h, 2h] \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

Wir sehen, daß wir auf $(0, h)$ nur lineare und quadratische Funktionen definiert haben. Betrachten wir eine Linearkombination dieser, so bleibt

$$\alpha \left(x - \frac{x^2}{h} \right) + \beta \left(1 + \frac{x-h}{h} \right) + \gamma \left((x-h) + \frac{(x-h)^2}{h} \right) = 0$$

zu lösen, um die Nullfunktion auf $(0, h)$ mit diesen Funktionen zu konstruieren. Es ergibt sich

$$x \left(\alpha + \frac{\beta}{h} - \gamma \right) + x^2 \left(\frac{\gamma}{h} - \frac{\alpha}{h} \right) = 0.$$

Diese Gleichung ist für die Wahl α beliebig, $\gamma = \alpha$ und $\beta = 0$ erfüllt. Damit können wir auf $(0, h)$ die Nullfunktion aus diesen Funktionen konstruieren. Der freie Koeffizient α sorgt dafür, daß auf dem nächsten Intervall $(h, 2h)$ eine analoge Situation entsteht. Da auf dem letzten Intervall ebenfalls der volle Raum $\{1, x\}$ verwendet wird, läßt sich diese Argumentation bis auf das letzte Intervall ausdehnen. Insgesamt erhält man daher die lineare Abhängigkeit der Funktionen $\varphi_i \psi_k^i$.

Diesem Beispiel nach tritt bei der Verwendung von Polynomen als lokale Funktionen und einer PU aus stückweisen Polynomen das Problem auf, daß durch die Überlappung der einzelnen Ω_i die lokalen Approximationsräume auf den Schnitten $\Omega_i \cap \Omega_j$ durch die Produktbildung die gleichen Funktionen erzeugen. In einer allgemeineren Situation ist dies selten der Fall, da dazu alle Ω_i , deren Gewichte W_i sowie die Partikelverteilung exakt aufeinander abgestimmt sein müssen. Jedoch ist es möglich, daß eine lineare Abhängigkeit numerisch bereits sichtbar wird, obwohl formal noch keine lineare Abhängigkeit vorliegt. Damit erhielte man eine sehr schlecht konditionierte Steifigkeitsmatrix, deren Behandlung mit iterativen Lösern aufwendig wäre. Mit einer Forderung an die Überdeckung und die lokalen Basen läßt sich diese lineare Abhängigkeit jedoch ausschließen: *Es gelte für die Überdeckung, daß in jedem Ω_i ein offenes $\Omega_i \neq \emptyset$ enthalten ist, auf dem die PU Funktion identisch 1 ist, d.h. auf diesen Ω_i gelte $M = 1$. Fordert man weiterhin von den lokalen Basen $\{\psi_k^i\}$, daß sie auf diesen Ω_i linear unabhängig sind, dann bilden die Funktionen $\{\varphi_i \psi_k^i\}$ eine Basis des Raumes V^h .* Es wird für eine beliebige Partikelverteilung wohl nicht möglich sein, dieser Forderung an die Überdeckung zu genügen. Allerdings sind diese Forderungen nur hinreichende Bedingungen. Durch diese Forderung wird aber ersichtlich, daß ein geringes Überlappen der Ω_i die Wahl der Funktionen $\{\varphi_i \psi_k^i\}$ als Basis begünstigt. Daher ist die Kontrolle der N_i auch für die

einfache Auswahl einer Basis “notwendig”. Die Forderung an die lokalen Basen wird, wenn die $\hat{\Omega}_i$ bekannt sind, leicht zu erfüllen sein, da eine Transformation stabiler Basen auf diese $\hat{\Omega}_i$ bzw. auf eine Teilmenge dieser Bereiche für deren Erfüllung ausreicht. In unserer Untersuchung der p-Version des Verfahrens haben wir die Forderung an die Überdeckung nicht erfüllt und somit auch die Forderung an die lokalen Basen vernachlässigt. Allerdings haben wir nur eine auf den erhöhten Polynomgrad zurückzuführende Verschlechterung der Konditionen der Steifigkeitsmatrizen beobachtet.

2.4 Verfeinerung des PUM-Raums V^h

Durch die Aufteilung der Freiheitsgrade in die lokalen Räume V_i^h und die Partition der Eins φ_i bei der Konstruktion des PUM-Raumes, lassen sich auch zwei verschiedene Verfeinerungsstrategien verfolgen.

2.4.1 Die h-Version des Verfahrens

Das Hinzufügen von Partikeln x_i verkleinert die Überdeckungselemente Ω_j der benachbarten Partikel x_j , so daß in unserem Fall durch globales Hinzufügen von Partikeln die entsprechenden h_i “halbiert” werden können. Satz 2.1 zeigt, daß dadurch ein zur *h-Version* der herkömmlichen Finite Element Methode analoges Verfahren entsteht. Haben wir beispielsweise lokal Fehler von quadratischer Ordnung,

$$\epsilon_1(i) \leq c_i h_i^2 \|u\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)},$$

wobei $h_i = \text{diam}(\Omega_i)$ definiert ist, läßt sich der globale Fehler durch

$$\begin{aligned} \|u - u^h\|_{L^2(\Omega)} &\leq \sqrt{MC_\infty} \left(\sum_i (c_i h_i^2 \|u\|_{L^2(\Omega \cap \Omega_i)})^2 \right)^{1/2}, \\ &\leq MC_\infty C \left(\max_i h_i \right)^2 \|u\|_{L^2(\Omega)}, \end{aligned}$$

abschätzen. Da zwischen den Partikeln x_i keinerlei starre Verbindungen bestehen, läßt sich das Hinzufügen von Partikeln zur Verbesserung der Approximierenden u_h auch nur lokal in Bereichen großer lokaler Fehler durchführen. Durch dieses Vorgehen läßt sich eine *h-adaptive* Version des Verfahrens implementieren. Für die Konvergenzuntersuchung einer h-adaptiven Verfahrensvariante ist obige Abschätzung zu grob. Durch die adaptive Verfeinerung besteht die Möglichkeit, daß der maximale Ω_i -Durchmesser nicht reduziert wird, so daß obige Abschätzung zu einer Abschätzung gegen eine Konstante degeneriert.

Bemerkung 2.5

Da wir durch beliebiges Hinzunehmen von Partikeln die Reduktion des maximalen Ω_i -Durchmesser nicht gewährleisten können, ist obige Abschätzung für die von uns angestrebte Untersuchung von Evolutionsgleichungen, bzw. schon für die Untersuchung des Verfahrens auf irregulären Partikelverteilungen, zu grob.

2.4.2 Die p-Version des Verfahrens

Als Alternative zum Hinzufügen von Partikeln zur Verbesserung der Approximierenden u_h , kann man auch die lokalen Räume V_i^h vergrößern, d.h. eine Verbesserung der lokalen Approximationsgüte zur Verfeinerung verwenden. Satz 2.1 zeigt, daß sich diese Verbesserung der lokalen Approximationseigenschaft auf den ganzen Raum V^h ausdehnt. Es entsteht bei diesem Vorgehen ein Verfahren, welches sich analog zu einer *p-Version* der FE Methode verhält. Gilt beispielsweise für die lokalen Fehler

$$\epsilon_1(i) \leq c_i p_i^{-\mu_i} \|u\|_{H^k(\Omega \cap \Omega_i)},$$

so erhalten wir die Abschätzung

$$\|u - u^p\|_{L^2(\Omega)} \leq MC_\infty C \max_i (p_i^{-\mu_i}) \|u\|_{H^k(\Omega)}$$

für den globalen Fehler. Die Unabhängigkeit der Partikel x_i überträgt sich auf die lokalen Räume V_i^h , so daß auch hier eine *adaptive* Verfahrensvariante implementiert werden kann.

Verwendet man lokal *hierarchische Basen* ψ_k^i , z.B. Monome, so überträgt sich diese Hierarchie auf die globalen Funktionen $\varphi_i \psi_k^i$. Daher ist der Aufwand bei der p-Version des Verfahrens gering, denn alle bereits berechneten Werte können weiterverwendet werden. Desweiteren läßt sich durch eine *vektorierte* Implementierung der Aufwand erheblich reduzieren. Mit einer vektorisierten Implementierung sei hier gemeint, daß alle Integrationen der schwachen Form, die auf dem gleichen Integrationsgebiet durchzuführen sind, simultan ausgeführt werden. In Abschnitt 3.1.2 wird ein Quadraturschema vorgestellt, das nur durch die Partition der Eins und den Operator definiert ist, so daß für alle Matrixeinträge

$$a(\varphi_i \psi_k^i, \varphi_j \psi_l^j) \quad k = 1, \dots, n_i \quad l = 1, \dots, n_j$$

die gleiche Stützstellenverteilung verwendet wird. Aus diesem Grund sind für alle Integrale die Funktionen φ der Partition der Eins und deren Ableitungen $\nabla \varphi_i$ an denselben Stellen auszuwerten. Da die Auswertungen dieser Funktionen relativ aufwendig sind, kann durch die Reduktion der Anzahl dieser Auswertungen der Aufwand erheblich verringert werden.

2.4.3 Die hp-Version des Verfahrens

Die Verfeinerungsstrategien beeinflussen sich gegenseitig nicht, somit sind sie gleichzeitig anwendbar. Um die Konvergenzeigenschaften eines solchen Verfahrens abzuschätzen, sind die lokalen Fehler durch eine Funktion beider Parameter p und h zu beschränken. Haben wir beispielsweise lokal eine Abschätzung

$$\epsilon_1(i) \leq c_i h_i^{\nu_i} p_i^{-\mu_i} \|u\|_{H^k(\Omega \cap \Omega_i)},$$

so erhalten wir mit Satz 2.1

$$\|u - u^{hp}\|_{L^2(\Omega)} \leq MC_\infty C \max_i (h_i^{\nu_i} p_i^{-\mu_i}) \|u\|_{H^k(\Omega)}$$

für den globalen Fehler. Es entsteht demnach bei der gleichzeitigen Verfeinerung der h und p Komponenten eine Verfahrensvariante, deren Konvergenzverhalten vergleichbar zur *hp*-Version der FE Methode ist. Hat man desweiteren adäquate *Fehlerschätzer* [VE96] zur Verfügung, so kann auch dieses Verfahren adaptiv implementiert werden.

Kapitel 3

Galerkinverfahren mit dem PUM-Raum V^h

Das Galerkinverfahren basiert auf der Variationsformulierung der Differentialgleichung. Es werden Ansatzfunktionen ψ_i gewählt, die eine Lösung $u_h = \sum_i u_i \psi_i$ des Minimierungsproblems aufspannen. Diese Lösung erfüllt die schwache Form der Differentialgleichung. Da endlich-dimensionale Unterräume $S_h = \{\sum_i u_i \psi_i\}$ betrachtet werden, ergibt sich für lineare Differentialoperatoren ein lineares Gleichungssystem

$$A_h \hat{u} = \hat{f}.$$

Die Matrixeinträge a_{ij} sind hierbei gegeben durch

$$a_{ij} = a(\psi_i, \psi_j),$$

und für die Einträge des Vektors der rechten Seite \hat{f} gilt

$$f_i = \int_{\Omega} f \psi_i. \quad (3.1)$$

Beim Laplace-Operator ergeben sich demnach Matrixeinträge der Form

$$a_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \psi_i \nabla \psi_j. \quad (3.2)$$

Ein Matrixelement ist also das Integral eines Produkts von Ableitungen der Ansatzfunktionen. Bei gitterbasierten Ansatzräumen für ein Galerkinverfahren besteht die Möglichkeit, diese Integration durch Transformation auf ein Referenzelement unter der Ausnutzung der Ähnlichkeit der Basisfunktionen zu umgehen, so daß nur wenige Integrale wirklich berechnet werden müssen. Dabei sind die Transformationen aufgrund der Struktur des Gitters einfache Bewegungen des Raums. Diese Strategie ist bei der Verwendung der oben konstruierten Ansatzfunktionen nicht sinnvoll. Da die Ω_k sich beliebig überlappen, sind die einzelnen Ansatzfunktionen nicht ähnlich. Die Konstruktion einer Transformation ist daher für die Funktionen des PUM-Raums erheblich komplexer als für gitterbasierte Ansatzfunktionen.

3.1 Integration der Ansatzfunktionen

In diesem Abschnitt werden die unterschiedlichen Möglichkeiten, die Integration von (3.2) und (3.1) auszuführen, untersucht. Dabei wird zuerst eine Untersuchung der analytischen Integration durchgeführt, an die sich die Konstruktion eines Quadraturschemas für die numerische Berechnung der Integrale anschließt. Bei dem Entwurf dieses Schemas nutzen wir die von uns gemachten Einschränkungen an die Geometrie der Ω_i für die Zerlegung der Integrationsgebiete in Zellen, auf denen Standard Quadraturformeln eingesetzt werden können.

3.1.1 Analytische Integration der Ansatzfunktionen

Wie oben bereits bemerkt, ist die Integration der Basisfunktionen des Ansatzraums nicht trivial durchführbar. Die allgemeine Gestalt der Ansatzfunktionen macht eine analytische Integration nur in Spezialfällen möglich. Es gilt

$$\nabla\varphi_i = \frac{\nabla W_i \cdot \sum_j W_j - W_i \cdot \sum_j \nabla W_j}{(\sum_j W_j)^2}.$$

Daher ergeben sich für den Laplace-Operator die Matrixeinträge

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla\varphi_i \nabla\varphi_k &= \\ \int_{\Omega} \frac{(\nabla W_i \cdot \sum_j W_j - W_i \cdot \sum_j \nabla W_j) \cdot (\nabla W_k \cdot \sum_j W_j - W_k \cdot \sum_j \nabla W_j)}{(\sum_j W_j)^4}. \end{aligned}$$

Die Integranden sind demnach rationale Funktionen in W_i und ∇W_i . Diese Beobachtung bestärkt die Wahl (stückweise-) polynomialer Gewichte, denn dadurch ergeben sich die Integranden zu stückweise rationalen Funktionen. Für diese Klasse von Funktionen existieren immer Stammfunktionen solange außerhalb der Singularitäten integriert wird. Dies ist durch die Forderungen an die Überdeckung bereits gewährleistet. Werden auch lokal Polynomräume verwendet, so kann die Existenz einer Stammfunktion für alle auftretenden Integranden beim Laplace-Operator garantiert werden. Betrachten wir dazu den Laplace-Operator in einer Dimension unter Verwendung eines linearen Splines als Gewichtsfunktion W_i . Um eine Stammfunktion des Integranden zu bestimmen, werden wir uns auf die Intervalle I_k einschränken müssen, auf denen alle W_i konstante Koeffizienten haben, denn nur auf einem solchen Intervall sind die Funktionen φ_i rational.

$$\begin{aligned} \varphi_i|_{I_k} &= \frac{a_i x + b_i}{\sum_{j \in N_i} (a_j x + b_j)} \\ &= \frac{a_i x + b_i}{\left(\sum_{j \in N_i} a_j\right) x + \left(\sum_{j \in N_i} b_j\right)} \\ &= \frac{a_i x + b_i}{A_i x + B_i} \end{aligned}$$

Mit der Forderung $\sum_j W_j \neq 0$, gilt $x = -\frac{B_i}{A_i} \notin I_k$, damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi_i}{dx} \Big|_{I_k} &= \frac{a_i(A_i x + B_i) - A_i(a_i x + b_i)}{(A_i x + B_i)^2} \\ &= \frac{a_i B_i - A_i b_i}{(A_i x + B_i)^2}, \end{aligned}$$

und es existiert

$$\int_{I_k} \varphi_i' \varphi_j' = \int_{I_k} \frac{(a_i B_i - A_i b_i)(a_j B_j - A_j b_j)}{(A_i x + B_i)^2 (A_j x + B_j)^2}.$$

Zur Integration einer rationalen Funktion bedarf es der Kenntnis einer Nullstellenzerlegung des Nenners, da diese zur Bestimmung einer Partialbruchzerlegung benötigt wird. Nachdem man die Koeffizienten A_i , B_i , A_j und B_j bestimmt hat, ist in diesem Beispiel eine Nullstellenzerlegung des Nenners gegeben. Folglich läßt sich hier eine Partialbruchzerlegung durchführen. Zu diesen Partialbrüchen bestimmt man dann Stammfunktionen und damit das Integral auf diesem Intervall I_k .

Verwendet man als lokale Räume V_i^h Polynome, so ist der Partialbruchzerlegung eine Polynomdivision voranzustellen. Die Bestimmung einer Nullstellenzerlegung des Nenners ist in mehreren Dimensionen und beim Einsatz von Splines höherer Ordnung als Gewichte erschwert. Darüberhinaus ergeben sich in mehreren Dimensionen auch Probleme mit der Bestimmung der Stammfunktionen. Da alle Operationen bei diesem Vorgehen *symbolisch* durchzuführen sind, treten zusätzlich auch algorithmische Schwierigkeiten auf. Zudem ist der Aufwand sehr groß, denn alle aufgezählten Schritte sind auf jeder Zelle I_k auszuführen. Ein weiterer Nachteil bei der Verwendung dieser Integration ist, daß man sich durch diese Integration auf die ausschließliche Verwendung von Polynomen für die lokalen Räume V_i^h festgelegt hat. Damit ist diese Integration für einen realistischen Einsatz des Verfahrens ungeeignet. Es bleibt also eine numerische Quadraturformel zu entwickeln, die ausreichend genaue Ergebnisse effizient für "allgemeine" Differentialoperatoren liefert.

Bemerkung 3.1

Die Forderung $\sum_j W_j \neq 0$ garantiert, daß wir außerhalb der Nullstellen des Nenners bleiben, doch ist auch die Integration in der Nähe einer solchen Singularität schwierig. Dieses Problem wird durch die schärfere Forderung (2.7) behandelt. Die Beschränkung der Gradienten der Funktionen der Partition der Eins läßt sich beispielsweise durch die Forderungen

$$\sum_i W_i(x) \geq C_1 \text{diam}(\Omega_j) \quad x \in \Omega_j \cap \Omega \quad (3.3)$$

und

$$\|\nabla W_i\|_{L^\infty} \leq C_2$$

erreichen. Man garantiert hierdurch einen minimalen Abstand zur Singularität und fordert eine gewisse Glattheit der verwendeten Gewichte W_i .

3.1.2 Numerische Quadratur der Ansatzfunktionen

Um eine effiziente, aber genügend genaue numerische Quadratur zu implementieren, ist die exakte Bestimmung jenes Teils des Integrationsgebietes nötig, auf welchem der Integrand nicht verschwindet. Es gilt

$$\int_{\Omega} \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j = \int_{\Omega \cap \Omega_i \cap \Omega_j} \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j,$$

daher ist eine Quadraturformel zu konstruieren, die auf diesen Schnitten genügend genaue Ergebnisse produziert. In unserer Situation sind die Ω_i alle achsenparallele Rechtecke, daher sind deren Schnitte untereinander auch Rechtecke (den Schnitt mit dem Grundgebiet wollen wir bei dieser Untersuchung vernachlässigen). Die Verwendung einer einfachen Quadraturformel auf dem Schnitt $\Omega_i \cap \Omega_j$ ist nicht ausreichend, denn global sind die Funktionen $\{\varphi_i\}$ von geringer Regularität. Zieht man sich jedoch in 1-D auf obige Zerlegung I_k zurück, dann ergeben sich wiederum rationale Funktionen als Integranden, die außerhalb ihrer Singularitäten zu integrieren sind. Diese Zerlegungselemente I_k werden in mehreren Dimensionen Vereinigungen von Rechtecken bzw. Quadern sein. Die Integration über diese Elemente läßt sich durch die Aufspaltung der Elemente in Rechtecke bzw. Quader noch vereinfachen. Die einfachste Methode, dieses zu implementieren, ist die Konstruktion eines Gitters, auf dessen Zellen die Koeffizienten aller W_i konstant sind. Auf diesen Zellen kann man jetzt eine Quadraturformel verwenden, die Integrale rationaler Funktionen ausreichend genau berechnet. Der Gesamtaufwand bei diesem Quadraturschema ist durch die Anzahl der Zellen I_k und dem Aufwand der auf den I_k eingesetzten Quadraturformeln gegeben. Die Anzahl der Zellen I_k der Zerlegung läßt sich durch die Mächtigkeit der Menge $N_i \cup N_j$ und der Ordnungen der zu $x_k \in N_i \cup N_j$ gehörenden Gewichtsfunktionen W_k abschätzen, denn diese Gewichte treten alle im Integranden auf. Damit wird deutlich, daß die Mengen N_i entscheidenden Einfluß auf den Aufwand bei dieser Integration haben.

Die numerische Quadratur läßt sich in zwei Schritte aufteilen. Der erste ist die Bestimmung des Integrationsgitters, welches zu jedem Partikelpaar (i, j) bestimmt werden muß. Allerdings ist diese Gitterkonstruktion symmetrisch, d.h. das Gitter zu (i, j) entspricht dem Gitter zu (j, i) , so daß die Gitter nur für die untere Hälfte der Matrix berechnet werden müssen. Der zweite Schritt ist die Quadratur des Integranden auf den Zellen des Gitters mit einer entsprechend gewählten Quadraturformel und die Summation dieser Werte.

Es wurden zwei unterschiedliche Gitter realisiert. Das erste ist das in Abbildung 3.1 dargestellte Gitter, welches durch alle Nachbarn und den Definitionsintervallen der Gewichte erzeugt wird (Spline-Gitter). Das zweite Gitter vernachlässigt die Definitionsintervalle bzw. die Ordnung des Splines, d.h. es wird ausschließlich durch die Nachbarn erzeugt (Nachbar-Gitter), siehe Abbildung 3.2. Beide Gitter können einem allgemeinen Differentialoperator weiter angepaßt werden. Zum Beispiel sind Sprünge in Koeffizientenfunktionen des Operators mittels der Hinzunahme weiterer Gitterlinien auflösbar. Zur Bestimmung dieser Gitter wurde folgender Algorithmus verwendet:

- (1) Bestimme den Schnitt der Überdeckungselemente Ω_i, Ω_j der Partikel x_i, x_j mit dem Grundgebiet Ω .

$$\Omega_{i,j} = \Omega_i \cap \Omega_j \cap \Omega$$

- (1.1) Bestimme die Grenzen der Definitionsintervalle der Gewichte W_i und W_j , die in den Schnitt $\Omega_{i,j}$ fallen. Füge diese Kanten in das Gitter ein.

- (2) Bestimme die Vereinigung der Nachbarschaften $N_{i,j} = N_i \cup N_j$. Bestimme für alle $x_k \in N_{i,j}$ den Schnitt $\Omega_{i,j,k} = \Omega_k \cap \Omega_{i,j}$. Falls gilt $\Omega_{i,j,k} \neq \emptyset$, füge die Kanten des Randes $\partial\Omega_{i,j,k}$ des Schnittes als Gitterlinien ein.

- (2.1) Falls gilt $\Omega_{i,j,k} \neq \emptyset$, bestimme die Grenzen der Definitionsintervalle der Gewichte W_k , die in den Schnitt $\Omega_{i,j,k}$ fallen. Füge diese in das Gitter ein.

- (3) Bestimme globale Kanten, die in den Schnitt $\Omega_{i,j}$ fallen. Füge diese in das Gitter ein.

Die Schritte (*.1) werden nur im Fall des Spline-Gitters abgearbeitet. Die Vernachlässigung der Ordnung des Splines führt zu Gittern mit weniger Zellen. Bei Verwendung der gleichen Quadraturformel auf den Gitterzellen ergibt sich demnach beim der Quadratur auf dem Nachbar-Gitter ein geringerer Aufwand als auf dem Spline-Gitter. Die Ordnung des Gewichts zu vernachlässigen ist durch die Tatsache, daß ein Spline höherer Ordnung eine höhere globale Regularität produziert, motivierbar. Bei einem Ansatz mit Splines höherer Ordnung ist demnach ein Vergleich der Integrationen mit beiden Gittern in bezug auf deren Aufwand und Genauigkeit interessant. Die Gitter weisen neben der unterschiedlichen Zellenanzahl allerdings auch qualitative Unterschiede auf. Wird als Gewichtsfunktion W_i das Tensorprodukt von linearen Splines eingesetzt, so erhält man eine Partition der Eins $\{\varphi_i\}$ mit $\varphi_i \in C^0$. Die Ableitungen dieser PU haben Sprünge, die jeweils auf den Grenzen der Definitionsintervalle des Splines liegen. Für eine ausreichend genaue Quadratur ist die Verwendung von Stützstellen außerhalb dieser Sprünge notwendig. Bei dem Spline-Gitter liegen alle Sprünge auf den Kanten der Zellen, deshalb wird bei der Verwendung einer offenen Quadraturformel auf diesen Zellen nie in den Sprüngen ausgewertet. Bei dem Nachbar-Gitter hingegen ist die Lage der Sprünge nicht bekannt, daher kann bei diesem Gitter unabhängig von der Wahl der Quadraturformel keine Aussage darüber getroffen werden, ob in den Sprüngen ausgewertet werden muß. Als Quadraturformel haben wir Tensorprodukte von Gauß-Legendre-Formeln auf den Zellen verwendet. Für die Berechnung der Integrale der rechten Seite

$$f_{ik} = \int_{\Omega} \varphi_i \psi_k^i f = \int_{\Omega \cap \Omega_i} \varphi_i \psi_k^i f$$

verwenden wir die oben dargestellten Gitter für die Diagonalelemente der Matrix, d.h. die Gitter zu den Partikelpaaren (i, i) .

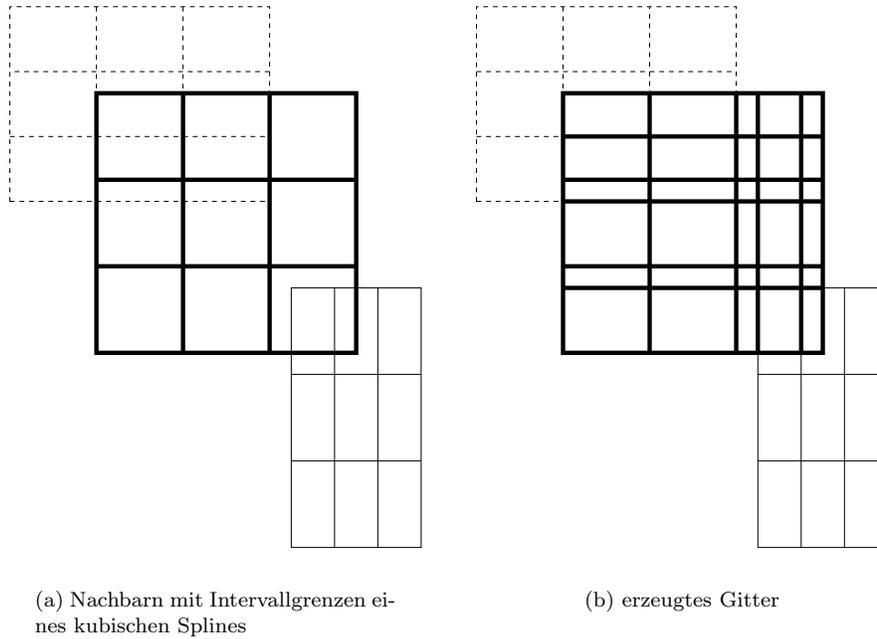


Abbildung 3.1. Konstruktion des Spline-Gitters zur Integration

Bemerkung 3.2

Eine weitere Reduktion des Aufwands bei der Integration ist nötig, da hier der Hauptanteil der Rechenzeit anfällt. Für mehrdimensionale Anwendungen ist die Verwendung eines *Dünnen Gitters* anstelle eines Tensorprodukts der Quadraturformeln auf den Zellen des Gitters sinnvoll [BO], [ZE91]. Desweiteren werden bei dem Spline-Gitter zuviele Zellen erzeugt. Die Einschränkung auf eine Zerlegung mit den oben erwähnten Eigenschaften bei geringerer Zellenanzahl ist für einen effizienten Einsatz des Verfahrens notwendig. Das Spline-Gitter ist nur einfacher zu implementieren als eine minimale Zerlegung mit obigen Eigenschaften. Allerdings liefert es wesentlich mehr Zellen als eine minimale Zerlegung hätte, so daß dadurch ein erheblicher Mehraufwand entsteht.

Bemerkung 3.3

Die Integration der Matrixeinträge zu einer Funktion $\varphi_i \psi_k^i$ mit $\psi_k^i \neq 1$ ist in der Regel weniger problematisch als die Integration der Einträge zu φ_i , denn die Multiplikation mit einer lokalen Basisfunktion $\psi_k^i \neq 1$ glättet. Eventuell vorhandene Sprünge des Gradienten $\nabla \varphi_i$ werden jedoch an $\nabla(\varphi_i \psi_k^i)$ vererbt, so daß man auch bei der Bestimmung der Einträge zu Basisfunktionen höherer Ordnung die Quadratur auf der oben konstruierten Zellenzerlegung ausführen "muß". Um die höhere Glattheit dieser Funktionen zur Reduktion des Aufwands zu nutzen, könnte man zur Quadratur dieser auf den Zellen eine Quadraturformel geringerer Ordnung einsetzen. Dies würde jedoch bedeuten, daß zusätzliche Auswertungen der Funktionen φ_i und $\nabla \varphi_i$ anfallen. Berücksichtigt man, daß eine Auswertung dieser Funktionen in der Regel erheblich aufwendiger als die Auswertung einer lokalen Basisfunktion ist, so ergibt sich eine wesentlich effektivere Methode zur Reduktion des Aufwands. Da zur Bestimmung der Matrixeinträge zur Funktion $\varphi_i \cdot 1$ die Funktionen φ_i und $\nabla \varphi_i$ bereits bezüglich der feinsten Stützstellenverteilung ausgewertet werden müssen, ist es sinnvoll diese Werte zur Berechnung aller anderen Integrale, die auf demselben Gebiet bestimmt werden müssen, zu verwenden. Man setzt also die feinste Stützstellenverteilung zur Bestimmung aller Integrale ein, hat aber pro Stützstelle alle lokalen Basisfunktionen ψ_k^i , φ_i sowie $\nabla \varphi_i$ nur einmal

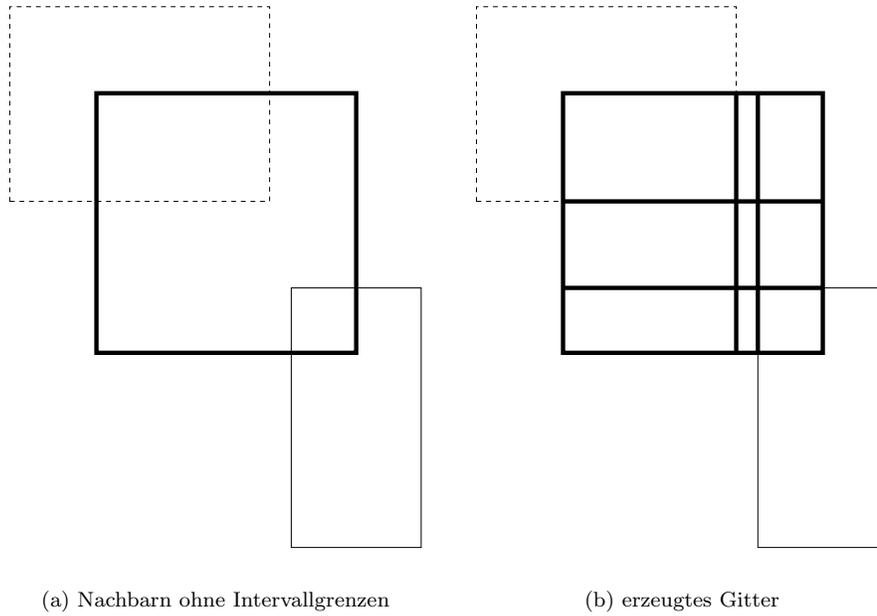


Abbildung 3.2. Konstruktion des Nachbar-Gitters zur Integration

auszuwerten. Würde man obigen Ansatz verwenden, so erhielte man für jede lokale Basisfunktion ψ_k^i eine eigene Stützstellenverteilung. Daher hätte man zu jeder Funktion ψ_k^i die Funktionen φ_i und $\nabla\varphi_i$ in diesen Stützstellen erneut auszuwerten. Es entstünde demnach ein wesentlich größerer Aufwand, und die Integrale würden mit geringerer Ordnung bestimmt werden. Aus diesen Gründen haben wir den beschriebenen *vektorierten* Ansatz gewählt.

Bemerkung 3.4

Aufgrund der Unabhängigkeit der lokalen Räumen, ist desweiteren die Aufstellung der Steifigkeitsmatrix vollständig *parallel* realisierbar. Übergibt man beispielsweise für alle x_i und jeden Nachbarn $x_j \in N_i$ die Daten der Partikel $x_k \in N_i \cup N_j$ an einen Prozessor, so kann dieser unabhängig von anderen Berechnungen in oben dargestellter vektorisierter Weise alle Quadraturen auf $\Omega \cap \Omega_i \cap \Omega_j$ ausführen. Als Daten werden dazu benötigt

- die Überdeckungselemente Ω_k ,
- die Gewichtsfunktionen W_k ,
- und die lokalen Basen $\{\psi_l^i\}$ und $\{\psi_l^j\}$.

Mit den von uns gemachten Einschränkungen langt es demnach aus, die Ordnung des verwendeten Splines, die Ω_k für $x_k \in N_i \cup N_j$ sowie die lokalen Basen $\{\psi_l^i\}$ und $\{\psi_l^j\}$ an den jeweiligen Prozessor zu übergeben. Ein weiterer Austausch an Daten ist nicht nötig, demzufolge ist der Kommunikationsaufwand gering. Da der Aufwand der Quadratur mit der Mächtigkeit der Mengen $N_i \cup N_j$ skaliert, ist für die Lastbalancierung wiederum der Überdeckungsalgorithmus mitentscheidend.

3.2 Eigenschaften der Steifigkeitsmatrizen

Durch den Galerkinansatz werden Operatoreigenschaften, wie die Symmetrie oder Definitheit, unabhängig vom gewählten Raum der Ansatzfunktionen auf das diskrete Gleichungssystem übertra-

gen. Für andere Eigenschaften des Gleichungssystems sind neben dem Operator auch die gewählten Ansatzfunktionen verantwortlich. Betrachten wir dazu den Laplace-Operator auf $(0, 1)$ und untersuchen wir die entstehende Steifigkeitsmatrix $A = (a_{ij})$ auf die *L-Matrix* Eigenschaft.

$$a_{ij} \begin{cases} > 0 & : i = j \\ \leq 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (3.4)$$

Offensichtlich gilt für alle nicht konstanten Funktionen $\psi \in H^1(\Omega)$

$$\int_{\Omega} |\nabla \psi|^2 > 0,$$

daher erfüllen die Diagonaleinträge a_{ii} der Steifigkeitsmatrix A

$$a_{ii} > 0.$$

Betrachten wir ein Element a_{ij} außerhalb der Diagonalen. Dazu wählen wir auf demselben Überdeckungselement Ω_i unterschiedliche lokale Funktionen.

$$a_{ij} = \int_{\Omega \cap \Omega_i} \nabla \varphi_i \nabla (\varphi_i x)$$

Für diesen Term ergibt sich

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \int_{\Omega_i} \nabla \varphi_i (\nabla \varphi_i x + \varphi_i \nabla x) \\ &= \int_{\Omega_i} \left(|\nabla \varphi_i|^2 x + \nabla \left(\frac{1}{2} \varphi_i^2 \right) \nabla x \right) \\ &= \int_{\Omega_i} \left(|\nabla \varphi_i|^2 x - \left(\frac{1}{2} \varphi_i^2 \right) \Delta x \right) \\ &= \int_{\Omega_i} |\nabla \varphi_i|^2 x \\ &> 0. \end{aligned}$$

Die entstandene Steifigkeitsmatrix ist demnach keine L-Matrix. Der Einsatz lokaler Räume verursacht, daß wir zum Diagonaleintrag qualitativ ähnliche Einträge außerhalb der Diagonale vorfinden können. Diese Erkenntnis und die Konstruktion der Ansatzfunktionen legen nahe, die Steifigkeitsmatrizen als *Blockmatrizen* zu verstehen. Dabei sind durch die "Trennung" der Freiheitsgrade in die lokalen Approximationsräume und die Partikel, in denen diese Räume aufgehängt sind, zwei verschiedene *Blockstrukturen* implizit gegeben. Betrachten wir

$$A = \begin{pmatrix} L_{1,1} & L_{1,2} & \cdots & L_{1,S} \\ L_{2,1} & L_{2,2} & \cdots & L_{2,S} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{S,1} & L_{S,2} & \cdots & L_{S,S} \end{pmatrix},$$

wobei wir die $L_{i,k}$ einerseits als *lokale Blöcke*

$$\begin{pmatrix} a(\varphi_i v_1^{h,i}, \varphi_k v_1^{h,k}) & a(\varphi_i v_1^{h,i}, \varphi_k v_2^{h,k}) & \cdots & a(\varphi_i v_1^{h,i}, \varphi_k v_M^{h,k}) \\ a(\varphi_i v_2^{h,i}, \varphi_k v_1^{h,k}) & a(\varphi_i v_2^{h,i}, \varphi_k v_2^{h,k}) & \cdots & a(\varphi_i v_2^{h,i}, \varphi_k v_M^{h,k}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a(\varphi_i v_M^{h,i}, \varphi_k v_1^{h,k}) & a(\varphi_i v_M^{h,i}, \varphi_k v_2^{h,k}) & \cdots & a(\varphi_i v_M^{h,i}, \varphi_k v_M^{h,k}) \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

andererseits aber auch als *Partikelblöcke*

$$\left(\begin{array}{cccc} a(\varphi_1 v_i^{h,1}, \varphi_1 v_k^{h,1}) & a(\varphi_1 v_i^{h,1}, \varphi_2 v_k^{h,2}) & \cdots & a(\varphi_1 v_i^{h,1}, \varphi_N v_k^{h,N}) \\ a(\varphi_2 v_i^{h,1}, \varphi_1 v_k^{h,1}) & a(\varphi_2 v_i^{h,2}, \varphi_2 v_k^{h,2}) & \cdots & a(\varphi_2 v_i^{h,2}, \varphi_N v_k^{h,N}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a(\varphi_N v_i^{h,N}, \varphi_N v_k^{h,N}) & a(\varphi_N v_i^{h,N}, \varphi_2 v_k^{h,2}) & \cdots & a(\varphi_N v_i^{h,N}, \varphi_N v_k^{h,N}) \end{array} \right) \quad (3.6)$$

definieren können. Diese zwei Blockstrukturen erzeugen Steifigkeitsmatrizen A mit unterschiedlichen Eigenschaften. Für einen Operator mit Partikelblockstruktur (3.6) gilt beispielsweise, daß die Diagonalblöcke ihre Eigenschaften wieder durch den Galerkinansatz vom Operator erben. Sie entsprechen einer Steifigkeitsmatrix, die mit einem PUM-Raum mit eindimensionalen V_i^h konstruiert wurde. Betrachten wir dazu den Laplace-Operator und wählen für alle $V_i^h = \{1, p^i = x - x_i\}$, dann ist die Steifigkeitsmatrix als 2×2 Blockmatrix gegeben. Als Diagonalblöcke $L_{i,i}$ erhalten wir

$$L_{1,1} = \begin{pmatrix} \nabla \varphi_1 \nabla \varphi_1 & \cdots & \nabla \varphi_1 \nabla \varphi_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \nabla \varphi_N \nabla \varphi_1 & \cdots & \nabla \varphi_N \nabla \varphi_N \end{pmatrix}$$

und

$$L_{2,2} = \begin{pmatrix} \nabla (\varphi_1 p^1) \nabla (\varphi_1 p^1) & \cdots & \nabla (\varphi_1 p^1) \nabla (\varphi_N p^N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \nabla (\varphi_N p^N) \nabla (\varphi_1 p^1) & \cdots & \nabla (\varphi_N p^N) \nabla (\varphi_N p^N) \end{pmatrix}.$$

Da $\sum_i \varphi_i \equiv 1$ gilt, verschwinden alle Zeilensummen des Blocks $L_{1,1}$. Dieser Block ist daher semi-definit. Der Block $L_{2,2}$ hingegen ist positiv definit, da der Laplace-Operator für nicht konstante Funktionen auf H^1 eine Norm definiert und wir mit diesen Funktionen $\varphi_i p^i$ (im allgemeinen) die Konstante nicht darstellen können. Andere Eigenschaften der Blöcke werden hier durch Eigenschaften der Partition der Eins und somit der Überdeckung erzeugt. Betrachten wir eine Steifigkeitsmatrix mit der Blockstruktur der lokalen Blöcke (3.5), so wird erkennbar, daß diese Diagonalblöcke eine Art lokale Steifigkeitsmatrix bilden. Da wir lokal die Konstante durch die Multiplikation mit der Partition der Eins nicht aufbauen können, ergibt sich für den Laplace-Operator, daß alle Diagonalblöcke bei dieser Blockstruktur positiv definit sind. Die weiteren Eigenschaften dieser Blöcke werden durch die gewählten lokalen Basen bestimmt. Kennt man also bestimmte Eigenschaften der gewählten Überdeckung oder der lokalen Basen, so lassen sich für das Lösen der Steifigkeitsmatrizen angepaßte Blocklösungsverfahren verwenden.

Durch die Anordnung der Partikel, d.h. durch die gewählte Indizierung, werden die Mengen N_i und damit auch die Besetzungsstruktur der Steifigkeitsmatrix beeinflusst. Ordnet man die Partikel so an, daß die Nachbarschaften N_i möglichst "Intervalle" in $\{1, 2, \dots, N\}$ sind, lassen sich in der Steifigkeitsmatrix *Bandstrukturen* feststellen. Die Partikelblöcke (3.6) weisen bei einer solchen Indizierung eine *Bandstruktur* auf. Die Steifigkeitsmatrix hat daher eine *Block-Band-Struktur*. Arbeitet man mit lokalen Blöcken (3.5), so erhält man eine Steifigkeitsmatrix mit einer *Band-Block-Struktur*. Diese Art der Anordnung ist weiterhin für die Komplexität eines gewählten Überdeckungsalgorithmus förderlich, siehe Abschnitt 2.1.1. Bei der Verwendung des dort beschriebenen Algorithmus können durch diese Indizierung die Mengen $S_{y,R}$ effizient bestimmt werden und somit ist der Gesamtalgorithmus effizient implementierbar. Eine solche Anordnung wiederum entspricht der Lösung eines Sortierproblems, deshalb bieten sich für die Bestimmung dieser Anordnung auch die Bisektionsalgorithmen an. Wird ein solcher Algorithmus zur Konstruktion der Überdeckung eingesetzt, fällt als Nebenprodukt eine entsprechende Anordnung der Partikel ab.

Kapitel 4

Diskretisierung von Randwerten

Bis jetzt haben wir uns nur mit der Diskretisierung der Differentialgleichung im Inneren beschäftigt. Es bleibt die Frage zu erörtern, wie mit dem Verfahren geforderte Randwerte formuliert werden können, damit eine vollständige diskrete Formulierung einer Randwertaufgabe entsteht. Dazu betrachten wir den Raum der Ansatzfunktionen in der Nähe des Randes. Als erste wichtige Eigenschaft der Ansatzfunktionen bleibt festzuhalten, daß mit diesen Funktionen nur eine Approximierende und keine Interpolierende konstruiert werden kann, denn für die Ansatzfunktionen bzw. die Funktionen der PU gilt im allgemeinen

$$\varphi_i(x_j) \neq \delta_{ij}. \quad (4.1)$$

Desweiteren können wir keine Annahmen über die Partikelpositionen machen, so daß die Existenz von Partikeln - und somit von Freiheitsgraden auf dem Rand - nicht gesichert ist.

4.1 Dirichlet-Aufgaben

Folglich lassen sich Dirichlet-Randwerte nicht in den Raum der Ansatzfunktionen einbinden. Demnach ist es auch nicht möglich, sich zur Untersuchung der Dirichlet-Aufgabe auf homogene Randdaten zu beschränken.

Bemerkung 4.1

Falls eine Aufgabenstellung vorliegt, die wirklich nur Nullrandwerte verwendet, kann, über die Wahl der lokalen Räume, der Nullrandwert vorgeschrieben werden. Betrachten wir dazu das Intervall $[0, 1]$, so wird die Menge der randnahen Partikel R^h aus zwei Elementen x_1, x_N bestehen. Verwendet man für diese Partikel lokale Räume, die auf dem jeweiligen Stück des Randes verschwinden, so erfüllen alle Funktionen $v^h \in V^h$ die Bedingung $v^h|_{\partial\Omega} = 0$. Es seien beispielsweise lokal die Räume

$$V_1^h = \{x^\alpha \mid \alpha > 0\} \quad V_N^h = \{(x-1)^\alpha \mid \alpha > 0\}$$

gewählt. Werden jedoch lokal immer die vollen Räume verwendet, d.h. gilt $1 \in V_i^h$ für alle i , so gilt auch $1 \in V^h$. Deshalb kann man im allgemeinen keinen Randwert direkt in den Raum der Ansatz- und Testfunktionen integrieren. Für die verwendeten Räume gilt daher (im allgemeinen) $V^h \subset H^1$ aber $V^h \not\subset H_D^1$.

Die Behandlung der Dirichlet-Aufgabe ist bei vielen gitterlosen Verfahren durch die oben geschilderten Probleme erschwert. Es gibt daher verschiedene Ansätze, die Dirichlet-Aufgabe mit einem gitterlosen Verfahren zu formulieren; dazu gehören:

- Verwendung spezieller Gewichte und eine Einschränkung an die Partikelverteilung, so daß Partikel auf dem Rand liegen müssen
- Kopplung des Verfahrens mit einer gittergestützten Methode in der Nähe des Randes
- Penalty-Methoden
- Lagrange Multiplikatoren

Die Einschränkung an die Partikelverteilung ist nur dann ein akzeptabler Ansatz, wenn man stationäre Probleme untersucht und die Partikelverteilung - neben der geforderten Existenz von Partikeln auf dem Rand - so wählt, daß man lokal angepaßte Räume verwenden kann. Durch den Einsatz spezieller Gewichte kann auch eine interpolierende Partition der Eins erzeugt werden. Lancaster und Salkauskas [LS81] haben gezeigt, daß bei Verwendung der Gewichte

$$W_i(x) = \|x - x_i\|_{\mathbb{R}^n}^{-\beta} \mathcal{W}_i(x) \quad \mathcal{W}_i \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega_i)$$

eine Partition der Eins entsteht, für die gilt

$$\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}. \quad (4.2)$$

Damit scheint es möglich, die Randwerte direkt vorzuschreiben, allerdings bleiben auch hier noch einige Probleme zu behandeln. Die Auswertung dieser Gewichtsfunktionen W_i ist numerisch in der Nähe der Knoten x_i nicht möglich, da obige Eigenschaft (4.2) nur im Grenzübergang erfüllt ist. Somit ist die einfache Auswertung der φ_i als Quotient dieser ebenfalls nicht möglich. Durch die Verwendung lokaler Räume haben wir außerdem wesentlich mehr Freiheitsgrade als Interpolationsknoten x_j , daher kann auch hier keine Interpolierende nach Lagrange konstruiert werden.

Die Möglichkeit, in der Nähe des Randes das Verfahren mit einer gitterbasierten Methode zu koppeln, zerstört - wie obige Einschränkung an die Partikelverteilung - den gitterlosen Charakter des Verfahrens und birgt in sich die Schwierigkeit der Kopplung beider Methoden.

Penalty-Methoden verändern die kontinuierliche Variationsformulierung, so daß hierbei Gleichungssysteme mit anderen Eigenschaften entstehen können als die Differentialgleichung vermuten läßt. Desweiteren ist die veränderte Variationsformulierung auf ihre Lösbarkeit zu überprüfen.

Wir haben uns für die Verwendung von *Lagrange Multiplikatoren* entschieden, denn deren Verwendung stellt keine zusätzlichen Anforderungen an die Partikelverteilung. Das Verfahren behält somit seinen gitterlosen Charakter. Allerdings entsteht durch den Einsatz von Lagrange Multiplikatoren ein *Sattelpunktproblem*, so daß insgesamt ein *indefinites* Gleichungssystem gelöst werden muß.

4.1.1 Sattelpunktprobleme

Sattelpunktprobleme treten immer dann auf, wenn man eine *Extremwertaufgabe mit Nebenbedingungen* betrachtet. Dazu wollen wir folgende Situation betrachten. Es seien V und Q zwei Hilberträume, auf diesen seien

$$a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}, \quad b : V \times Q \rightarrow \mathbb{R}$$

zwei stetige Bilinearformen gegeben. Desweiteren seien $f \in V'$ und $g \in Q'$, den Dualräumen von V und Q . Die dualen Paarungen von V mit V' bzw. von Q mit Q' wollen wir mit $\langle \cdot, \cdot \rangle$ bezeichnen. Gesucht ist jetzt das Minimum $u \in V$ von

$$J(u) = \frac{1}{2}a(u, u) - \langle f, u \rangle$$

unter der Nebenbedingung

$$b(u, p) = \langle g, p \rangle \quad \forall p \in Q. \quad (4.3)$$

Betrachten wir die *Lagrange-Funktion*

$$\mathcal{L}(u, p) := J(u) + b(u, p) - \langle g, p \rangle,$$

stellen wir fest, daß sie auf der Menge der u , die die Nebenbedingung (4.3) erfüllen, mit dem Funktional J übereinstimmt. Betrachtet man $\mathcal{L}(\cdot, p)$ als eine Familie von Funktionalen, so können wir $\mathcal{L}(\cdot, p)$ mit festem p minimieren und fragen, ob p so gewählt werden kann, daß das Minimum u_p von $\mathcal{L}(\cdot, p)$ auch die Nebenbedingung (4.3) erfüllt. Da $\mathcal{L}(u, p)$ ein quadratischer Ausdruck in u und p ist, erhalten wir somit ein *Sattelpunktproblem*. Gesucht ist $(u, p) \in V \times Q$ mit

$$\begin{aligned} a(u, v) + b(v, p) &= \langle f, v \rangle \quad \forall v \in V \\ b(u, q) &= \langle g, q \rangle \quad \forall q \in Q, \end{aligned}$$

bzw. gelte in der Operatorschreibweise für $(u, p) \in V \times Q$

$$\begin{aligned} Au + B^T p &= f \\ Bu &= g. \end{aligned}$$

Für die Lösung dieses Problems, den *Sattelpunkt*, gilt

$$\mathcal{L}(u, q) \leq \mathcal{L}(u, p) \leq \mathcal{L}(v, p) \quad \forall (v, q) \in V \times Q.$$

Beschäftigen wir uns nun mit der Frage der Lösbarkeit eines Sattelpunktproblems, siehe [BF91].

Satz 4.1 (Existenz und Eindeutigkeit) *Es seien V, Q Hilberträume, $a(\cdot, \cdot)$ sei eine stetige Bilinearform $V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ und $b(\cdot, \cdot)$ sei eine stetige Bilinearform $V \times Q \rightarrow \mathbb{R}$. Das Bild des durch $b(\cdot, \cdot)$ definierten Operators $B : V \rightarrow Q'$ sei abgeschlossen, d.h.*

$$\exists k_0 > 0 \quad \sup_{v \in V} \frac{b(v, q)}{\|v\|_V} \geq k_0 \|q\|_{Q/\ker(B^T)}.$$

Desweiteren sei $a(\cdot, \cdot)$ auf $\ker(B)$ invertierbar, d.h. $\exists \alpha_0 > 0$ mit

$$\begin{aligned} \inf_{u_0 \in \ker(B)} \sup_{v_0 \in \ker(B)} \frac{a(u_0, v_0)}{\|u_0\|_V \|v_0\|_V} &\geq \alpha_0, \\ \inf_{v_0 \in \ker(B)} \sup_{u_0 \in \ker(B)} \frac{a(u_0, v_0)}{\|u_0\|_V \|v_0\|_V} &\geq \alpha_0. \end{aligned}$$

Dann existiert eine Lösung (u, p) von

$$\begin{aligned} a(u, v) + b(v, p) &= \langle f, v \rangle \quad \forall v \in V \\ b(u, q) &= \langle g, q \rangle \quad \forall q \in Q, \end{aligned}$$

für jedes $f \in V'$ und $g \in B(V)$. Dabei ist u eindeutig und p bis auf ein $p' \in \ker(B^T)$ definiert. Ist B surjektiv, ist die Lösung (u, p) eindeutig.

Bemerkung 4.2

Für die Existenz der Lösung nach Satz 4.1 ist die Symmetrie von $a(\cdot, \cdot)$ nicht gefordert. Allerdings läßt sich nur für symmetrische Bilinearformen der Zusammenhang mit einer Minimierungsaufgabe herstellen.

Die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung eines Sattelpunktproblems sind demnach gesichert. Wir wollen an dieser Stelle noch zwei Lemmata vorstellen, die im Verlauf des Beweises von Satz 4.1 verwendet werden und den Übergang von der Variationsformulierung zur Sattelpunktformulierung verdeutlichen.

Lemma 4.1 *Es seien V, Q Hilberträume, $a(\cdot, \cdot)$ sei eine stetige Bilinearform $V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ und $b(\cdot, \cdot)$ sei eine stetige Bilinearform $V \times Q \rightarrow \mathbb{R}$. Es sei g im Bild des durch $b(\cdot, \cdot)$ definierten Operators $B : V \rightarrow Q'$ enthalten. Desweiteren sei $a(\cdot, \cdot)$ auf $\ker(B)$ koerziv, dann gilt*

$$\begin{aligned} a(u, v_0) &= \langle f, v_0 \rangle \quad \forall v_0 \in \ker(B) \\ Bu &= g \end{aligned}$$

hat eine eindeutige Lösung $u \in V$.

Lemma 4.2 *Es seien die Voraussetzungen von Lemma 4.1 erfüllt, und es sei $u \in V$ die Lösung nach Lemma 4.1. Desweiteren gelte $B(V)$ sei abgeschlossen in Q' , dann existiert ein $p \in Q'$ so, daß für (u, p) gilt*

$$\begin{aligned} a(u, v) + b(v, p) &= \langle f, v \rangle \quad \forall v \in V \\ b(u, q) &= \langle g, q \rangle \quad \forall q \in Q. \end{aligned}$$

Bemerkung 4.3

Dieses $p \in Q'$ ist nur bis auf ein $p' \in \ker(B^T)$ bestimmt, daher ist dieses p genau dann eindeutig, wenn B surjektiv ist.

Bemerkung 4.4

Wie aus Lemma 4.1 zu erkennen ist, löst die V -Koordinate u der Lösung (u, p) des Sattelpunktproblems das ursprüngliche Minimierungsproblem.

In Lemma 4.1 hat man noch keine Sattelpunktformulierung. Die Formulierung entspricht eher der schwachen Form einer Differentialgleichung. Wählen wir den Operator B in Lemma 4.1 als *Spuroperator*, dann entspricht die Formulierung in Lemma 4.1 einer Dirichlet-Aufgabe. Mit der Wahl $V = H^1(\Omega)$, $Q = (H^{1/2}(\partial\Omega))'$ und $B = \text{Tr}$ ergibt sich $\ker(B) = H_0^1(\Omega)$.

$$\begin{aligned} a(u, v_0) &= \langle f, v_0 \rangle \quad \forall v_0 \in H_0^1(\Omega) \\ \text{Tr}(u) &= g \end{aligned}$$

Damit ist die Lösbarkeit einer Dirichlet-Aufgabe garantiert. Lemma 4.2 koppelt jetzt beide Gleichungen miteinander und erweitert so den Testraum der v_0 auf den ganzen Raum V . Daher erhalten wir jetzt beim Übergang zu endlich-dimensionalen Teilräumen ein quadratisches Gleichungssystem.

$$\begin{aligned} Au + B^T p &= f \\ Bu &= g \end{aligned}$$

Lemma 4.1 ermöglicht, die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ auf dem $\ker(B)$ zu manipulieren, ohne dabei die Lösung u zu verändern. Nach Satz 4.1 gibt es eine eindeutige Lösung u_1 zu

$$\begin{aligned} a_1(u, v_0) &= \langle f, v_0 \rangle \quad \forall v_0 \in \ker(B) \\ B(u) &= g \end{aligned}$$

und eine eindeutige Lösung u_2 zu

$$\begin{aligned} a_2(u, v_0) &= \langle f, v_0 \rangle \quad \forall v_0 \in \ker(B) \\ B(u) &= g. \end{aligned}$$

Für diese Lösungen gilt

$$B(u_1) = B(u_2) = g ,$$

gilt für die Bilinearformen $a_1(\cdot, \cdot)$ und $a_2(\cdot, \cdot)$

$$a_1(u, v_0) = a_2(u, v_0) \quad \forall u \in V \quad \forall v_0 \in \ker(B) ,$$

dann gilt für die Lösungen

$$u_1 = u_2 .$$

Betrachten wir ein Beispiel.

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f \quad \text{auf } \Omega , \\ u &= g \quad \text{auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

Hieraus ergeben sich zwei Bilinearformen

$$a_1(u, \varphi) := \int_{\Omega} \nabla u \nabla \varphi \quad \text{für } \varphi_0 \in C_0^\infty(\Omega) , \quad (4.4)$$

$$a_2(u, \varphi) := \int_{\Omega} \nabla u \nabla \varphi + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} \varphi \quad \text{für } \varphi \in C^\infty(\Omega) . \quad (4.5)$$

Und die Gleichung der Nebenbedingung

$$\text{Tr}(u) = g .$$

Die Bilinearform (4.4) ist symmetrisch, allerdings können wir uns zur Behandlung der Dirichlet-Aufgabe nicht auf Nullrandwerte zurückziehen, so daß (4.5) der korrekte Ansatz ist. Für $a_1(\cdot, \cdot)$ und $a_2(\cdot, \cdot)$ gilt jedoch obige Bemerkung, so daß wir uns auf die symmetrische Formulierung (4.4) zurückziehen können. Diese Bilinearform ist jedoch nicht auf $H^1(\Omega)$ definit, so daß nur eine semi-definite Steifigkeitsmatrix entsteht. Wir wollen nun versuchen, eine symmetrische Bilinearform $a_3(\cdot, \cdot)$ zu konstruieren, die eine definite Steifigkeitsmatrix produziert. Definieren wir dazu

$$a_3(\varphi, \psi) := a_1(\varphi, \psi) + \int_{\partial\Omega} \text{Tr}(\varphi) \text{Tr}(\psi) . \quad (4.6)$$

Es gilt offensichtlich

$$a_3(\varphi, \psi_0) = a_1(\varphi, \psi_0) \quad \text{für } \psi_0 \in H_0^1(\Omega) ,$$

so daß die Lösungen u_i zu

$$\begin{aligned} a_i(u, v_0) &= \langle f, v_0 \rangle \quad \forall v_0 \in \ker(B) \\ B(u) &= g . \end{aligned}$$

alle identisch sind. Definieren wir

$$x = (\xi_i)_i \quad \text{und} \quad v^h := \sum_i \xi_i \psi_i ,$$

so gilt für die Steifigkeitsmatrix A_3 zu $a_3(\cdot, \cdot)$

$$x' A_3 x = a_3(v^h, v^h) = \int_{\Omega} |\nabla v^h|^2 + \int_{\partial\Omega} |\text{Tr}(v^h)|^2 .$$

Es gilt

$$\int_{\Omega} |\nabla v^h|^2 + \int_{\partial\Omega} |\text{Tr}(v^h)|^2 \geq 0 \quad \text{für alle } v \in H^1(\Omega) .$$

Es bleibt zu untersuchen, für welche v^h $a_3(v^h, v^h)$ verschwindet. Offensichtlich müssen dazu beide Summanden einzeln verschwinden.

$$\int_{\Omega} |\nabla v^h|^2 = 0 \wedge \int_{\partial\Omega} |\text{Tr}(v^h)|^2 = 0$$

Es gelten

$$\int_{\Omega} |\nabla v^h|^2 = 0 \Rightarrow v \text{ ist konstant,}$$

und

$$\int_{\partial\Omega} |\text{Tr}(v^h)|^2 = 0 \Rightarrow v \in H_0^1(\Omega),$$

so daß gilt

$$a_3(v^h, v^h) = 0 \Leftrightarrow v^h = 0.$$

Somit ist die Steifigkeitsmatrix A_3 symmetrisch positiv definit. Damit haben wir also eine Bilinearform konstruiert, mit der wir das Problem

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f \text{ auf } \Omega, \\ u &= g \text{ auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

zu einem Sattelpunktproblem mit symmetrisch positiv definiten Matrix A umformen können.

Zur Diskretisierung eines Sattelpunktproblems wählen wir $V_h \subset V$ und $Q_h \subset Q$, endlichdimensionale Unterräume. Definieren wir die Operatoren A_h, B_h

$$\begin{aligned} A_h &: V_h \rightarrow V'_h, \\ A_h &: \varphi \mapsto a(\varphi, \cdot) \\ B_h &: V_h \rightarrow Q'_h, \\ B_h &: \varphi \mapsto b(\varphi, \cdot) \\ B_h^T &: Q_h \rightarrow V'_h, \\ B_h^T &: \psi \mapsto b(\cdot, \psi) \end{aligned}$$

mit der orthogonalen Projektion P_{Q_h} , gilt für ein $g'_h \in Q'_h$

$$\begin{aligned} P_{Q_h} &: Q \rightarrow Q_h \\ \langle g'_h, q \rangle_{Q' \times Q} &= \langle g'_h, P_{Q_h} q \rangle_{Q' \times Q} \end{aligned}$$

Analog erhalten wir mit der Projektion $P_{Q'_h}$

$$P_{Q'_h} : Q' \rightarrow Q'_h,$$

durch

$$\begin{aligned} \langle P_{Q'_h} g, q \rangle_{Q' \times Q} &= \langle g, P_{Q_h} q \rangle_{Q' \times Q} \\ &= \langle P_{Q_h}^T g, q \rangle_{Q' \times Q} \end{aligned}$$

die Identität

$$P_{Q'_h} = P_{Q_h}^T.$$

Mit diesen Projektionen können wir den Operator B_h als Operator von V_h nach Q' auffassen. Es gilt

$$\begin{aligned}\langle B_h v_h, q \rangle_{Q' \times Q} &= \langle B_h v_h, P_{Q_h} q \rangle_{Q' \times Q} \\ &= b(v_h, P_{Q_h} q) \\ &= \langle B v_h, P_{Q_h} q \rangle_{Q' \times Q} \\ &= \langle P_{Q_h}^T B v_h, q \rangle_{Q' \times Q},\end{aligned}$$

und somit

$$B_h = P_{Q_h}^T B = P_{Q_h}' B.$$

Daher ergibt sich die Äquivalenz

$$(B_h(V_h) = B(V_h)) \iff B(V_h) \subset Q_h'.$$

Wir können demnach die beiden Räume V_h und Q_h nicht unabhängig voneinander wählen, wenn wir die diskreten Operatoren als Einschränkungen der kontinuierlichen auf die endlich-dimensionalen Unterräume betrachten wollen. Die Forderung der Abgeschlossenheit des Bildes von B in Satz 4.1 ist im diskreten Fall immer erfüllt, daher haben wir nur noch $g \in B(V)$ diskret zu formulieren. Dazu definieren wir

$$Z_h(g) := \{ v_h \in V_h \mid b(v_h, q_h) = \langle g, q_h \rangle_{Q \times Q'} \quad \forall q_h \in Q_h \}.$$

Insgesamt erhalten wir die Forderungen

1. $Z_h(g) \neq \emptyset$
2. $B(V_h) \subset Q_h'$
3. A_h invertierbar auf $\ker(B)$
4. $\exists k_0 > 0 \quad \inf_{q \in Q_h, q \neq 0} \sup_{v \in V_h, v \neq 0} \frac{|b(v, q)|}{\|v\|_V \|q\|_Q} \geq k_0$ (Surjektivität von B_h)

an die Diskretisierung, um die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung garantieren zu können.

4.1.2 Der diskrete Spuroperator

Der Raum V_h ist bei uns durch den PUM-Raum V^h gegeben. Es bleibt daher der Raum Q_h so zu wählen, daß obige Forderungen erfüllt sind. Da wir eine Sattelpunktformulierung nur bei der Behandlung einer Dirichlet-Aufgabe erhalten, können wir uns auf $B = \text{Tr}$ einschränken. Damit ist die geforderte Invertierbarkeit der Steifigkeitsmatrix A_h auf $\ker(\text{Tr})$ durch die Koerzivität des kontinuierlichen Operators auf $H_0^1 = \ker(\text{Tr})$ gegeben. Es bleibt als Einschränkung an die Wahl von Q_h die diskrete Babuška-Brezzi-Bedingung zu erfüllen. Betrachten wir einen Raum $V^h \subset C^1(\Omega)$, so gilt für den Spuroperator und $v^h \in V^h$

$$\text{Tr}(v^h) = v^h|_{\partial\Omega}.$$

Fordern wir $B_h(v^h) = B(v^h)$, so ergibt sich als Forderung

$$\exists k_0 > 0 \quad \inf_{q_h \in Q_h, q_h \neq 0} \sup_{v^h \in V^h, v^h \neq 0} \frac{|\langle v^h|_{\partial\Omega}, q_h \rangle_{L^2(\partial\Omega)}|}{\|v^h\|_{H^1(\Omega)} \|q_h\|_{(H^{1/2}(\partial\Omega))'}} \geq k_0. \quad (4.7)$$

Diese Forderung ist äquivalent zur Forderung der Surjektivität des Spurooperators, dabei können wir die Konstante k_0 als Maß für die Stärke der Surjektivität betrachten. Im diskreten Fall läßt

sich (4.7) auch als eine Relation der Diskretisierungsfeinheiten in V^h und Q_h verstehen. In [BR81] wurde gezeigt, daß (4.7) für polygonal berandete $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ für genügend grobe Diskretisierungen auf dem Rand - relativ zur Diskretisierung im Inneren - erfüllt ist. Nach Abschnitt 2.4 läßt sich dies über eine Verringerung des Polynomgrads oder über eine gröbere Punkteverteilung auf dem Rand realisieren. Diese wiederum kann durch die Unabhängigkeit der Partikel auf verschiedene Arten durchgeführt werden. Projiziert man beispielsweise die randnahen Partikel $x_i \in R^h$ auf den Rand $\partial\Omega$, so kann man diese Punktmenge beliebig ausdünnen und zu dieser ausgedünnten Punktmenge einen PUM-Raum Q^h auf dem Rand konstruieren. Andererseits kann man auch eine beliebige Punktfolge mit größerer Auflösung auf dem Rand dazu verwenden. Diese verschiedenen Vorgehensweisen führen auch zu Gleichungssystemen mit unterschiedlichen Eigenschaften. Welche Methode zu einem "optimalen" Gleichungssystem führt, müssen weitere Untersuchungen zeigen.

Als Einträge der Matrix B der Nebenbedingung erhalten wir Randintegrale. Zur Berechnung dieser ziehen wir uns wiederum auf eine Zerlegung der jeweiligen Integrationsgebiete zurück, welche analog zu den Zerlegungen aus Abschnitt 3.1.2 bestimmt werden. Auf den Zellen dieser Zerlegungen setzen wir Gauß-Legendre-Formeln zur Quadratur ein.

4.2 Neumann-Aufgaben

Für die Behandlung einer Neumann-Aufgabe sind keine Freiheitsgrade auf dem Rand des Gebiets notwendig. Diese Randwerte werden somit nicht in den Raum der Ansatzfunktionen integriert, sondern deren Realisierung erfordert nur eine Manipulation der rechten Seite des Gleichungssystems. Betrachten wir die Gleichung

$$-\Delta u + u = f ,$$

so ergibt sich als schwache Formulierung dieser Gleichung

$$\int_{\Omega} \nabla u \nabla v - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} v + \int_{\Omega} uv = \int_{\Omega} fv .$$

Durch die Forderung des Neumann-Randwertes

$$\frac{\partial u}{\partial n} = g \text{ auf } \partial\Omega$$

ergibt sich die Formulierung der Randwertaufgabe zu

$$\int_{\Omega} \nabla u \nabla v + \int_{\Omega} uv = \int_{\Omega} fv + \int_{\partial\Omega} gv .$$

So wird deutlich, daß wir zur Realisierung einer Neumann-Aufgabe nur die Berechnung eines Randintegrals für unsere Ansatzfunktionen untersuchen müssen. Zur Berechnung dieses Randintegrals bedienen wir uns der oben konstruierten Gitter für die numerische Quadratur. Dabei wird zur Berechnung des Randintegrals nur über die auf dem Rand liegenden Gitterlinien eine Quadratur ausgeführt (für allgemeine Gebiete muß eine Parametrisierung des Randes möglich sein). Auch hierbei haben wir Gauß-Legendre-Formeln zur Quadratur auf den "Zellen" eingesetzt.

Kapitel 5

Lösen der entstehenden Gleichungssysteme

Die Wahl eines iterativen Lösungsverfahrens zur Behandlung eines Gleichungssystems wird von den Eigenschaften des Gleichungssystems dominiert, da diese das Konvergenzverhalten des Verfahrens bestimmen. Wie in Abschnitt 3.2 bemerkt werden die Eigenschaften der entstehenden Steifigkeitsmatrizen sowohl vom Operator als auch von der Überdeckung und den gewählten lokalen Basen andererseits bestimmt. Der Galerkinansatz transportiert die Symmetrie und Definitheit des kontinuierlichen Operators auf die Steifigkeitsmatrix. Damit bieten sich bei der Behandlung solcher Operatoren iterative Verfahren an, deren Konvergenz für symmetrisch positiv definite Matrizen gesichert ist. Die Überdeckung und die lokalen Basen sind für andere Eigenschaften des Gleichungssystems verantwortlich. Vorzeichenbedingungen werden beispielsweise direkt - neben dem Einfluß des Operators - von den lokalen Basen sowie den Größen der Überlappungen bestimmt. Bei der Behandlung einer Dirichlet-Aufgabe ist jedoch nicht nur die Steifigkeitsmatrix, sondern ein Sattelpunktproblem zu lösen.

5.1 Löser für Sattelpunktprobleme

Das Lösen eines diskreten Sattelpunktproblems wird durch die Indefinitheit des Systems erschwert. Die meisten iterativen Löser für Sattelpunktprobleme arbeiten auf der sogenannten *reduzierten Gleichung* (5.1), d.h. dem *Schurkomplement*. Betrachten wir dazu die Operatorform des Sattelpunktproblems.

$$\begin{aligned} Au + B^T p &= f \\ Bu &= g \end{aligned}$$

Falls A invertierbar ist, kann u aus diesen Gleichungen eliminiert werden. Wir erhalten

$$BA^{-1}B^T p = BA^{-1}f - g . \quad (5.1)$$

Der Operator $BA^{-1}B^T$ ist das Schurkomplement des vollständigen ursprünglichen Systems. Auf dieses - wenn auch nur implizit gegebene - System (5.1) können wir jetzt verschiedene Iterationsverfahren anwenden. Das wohl bekannteste Iterationsverfahren dieser Art zur Lösung von Sattelpunktproblemen ist der *Uzawa-Algorithmus*. Dazu seien u_0 und p_0 gegeben, dann bestimme man u_{k+1} und p_{k+1} gemäß

$$\begin{aligned} u_{k+1} &= u_k + A^{-1} (f - (Au_k + B^T p_k)) , \\ p_{k+1} &= p_k + \alpha (Bu_{k+1} - g) . \end{aligned}$$

Dabei wird der Schrittweitenparameter α als genügend klein vorausgesetzt. Untersuchungen der *Defektgleichung*

$$q_k = BA^{-1}B^T(p_{k-1} - \hat{p}) ,$$

wobei (\hat{u}, \hat{p}) die Lösung des Sattelpunktproblems bezeichne, ergeben den Zusammenhang dieses Schrittweitenparameters α und dem entsprechenden Iterationsverfahren auf der reduzierten Gleichung. Beim Uzawa-Algorithmus fällt in jeder Iteration eine Invertierung von A an, so daß der Aufwand bei diesem Verfahren sehr groß ist. Nun gibt es in jüngerer Zeit Untersuchungen des sogenannten *inexakten* Uzawa-Algorithmus [BPV97A], [BPV97B], der anstelle der Inversen im exakten Uzawa-Algorithmus nur eine Näherung C_A der Inversen verwendet. Es ergibt sich daher der Algorithmus

$$\begin{aligned} u_{k+1} &= u_k + C_A (f - (Au_k + B^T p_k)) , \\ p_{k+1} &= p_k + C_S (Bu_{k+1} - g) . \end{aligned}$$

C_S bezeichnet dabei eine Näherung der Inversen des Schurkomplements.

$$C_S \sim (BA^{-1}B^T)^{-1}$$

Die Konvergenzgeschwindigkeit dieses Verfahrens hängt stark von der gewählten Näherung C_S ab, so daß man diesen im Aufwand günstigeren Algorithmus erst dann effizient nutzen kann, wenn man C_S entsprechend konstruiert hat [KUN95], [RW].

5.2 Löser für die Steifigkeitsmatrix

Da unabhängig von den verwendeten Ansatzfunktionen die Symmetrie und die Definitheit des kontinuierlichen Operators durch den Galerkinansatz auf die Steifigkeitsmatrix übertragen wird, wollen wir uns auf symmetrisch positiv definite Matrizen A beschränken. Zur Lösung von Gleichungssystemen

$$Ax = b \tag{5.2}$$

mit einer solchen Matrix A steht beispielsweise das CG-Verfahren [BRA97] zur Verfügung. Dessen Konvergenzverhalten wird durch das Spektrum der zu behandelnden Matrix A bestimmt. Dieses läßt sich durch die Kondition $\kappa(A)$, dem Quotienten des größten und kleinsten Eigenwerts, der Matrix abschätzen. Für das CG-Verfahren läßt sich der Fehler bei der n -ten Iteration durch

$$\|x - x_n\|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1} \right)^n \|x - x_0\|_A$$

abschätzen. Das Konvergenzverhalten des CG-Verfahrens ist demnach für Matrizen mit kleiner Kondition κ besser. Um die Kondition einer gegebenen Matrix A zu verbessern, kann man einen *Vorkonditionierer* C einsetzen. Man betrachtet dabei anstelle von (5.2) das Gleichungssystem

$$CAx = Cb ,$$

wobei man C so wählt, daß

$$\kappa(CA) \ll \kappa(A)$$

gilt. Daher bieten sich als Vorkonditionierer C Näherungen der Inversen von A an.

$$C \sim A^{-1}$$

Eine einfache Wahl für den Vorkonditionierer ist beispielsweise die Inverse der Diagonalen von A .

$$\begin{aligned} D &= \text{diag}(A) \\ C &= D^{-1} \end{aligned}$$

Bei unserem Ansatz haben die Steifigkeitsmatrizen eine Blockstruktur, demzufolge ergibt sich die Möglichkeit, die Inverse der Block-Diagonalen als Vorkonditionierer zu verwenden.

Bemerkung 5.1

Unsere Experimente dazu haben allerdings keine Verbesserung zur einfachen Diagonalskalierung festgestellt.

Berücksichtigt man, daß die Matrix A durch die Diskretisierung einer kontinuierlichen Gleichung entstanden ist, so kann man versuchen, einen Vorkonditionierer C durch den Übergang auf eine gröbere Diskretisierung zu konstruieren. Sei \hat{A} die Steifigkeitsmatrix bezüglich einer gröberen Diskretisierung \hat{V}^h , so kann die Inverse dieser Matrix, nach Projektion von \hat{V}^h nach V^h , als Vorkonditionierer C für A angesetzt werden. Verwenden wir diesen Ansatz rekursiv, so erhalten wir einen Vorkonditionierer C , der aus mehreren unterschiedlich feinen Diskretisierungen aufgebaut ist. Solche C bezeichnet man als *Multilevelvorkonditionierer*.

5.2.1 Multilevelstrukturen des PUM-Raums V^h

Dementsprechend wollen wir in diesem Abschnitt die oben konstruierten Ansatzräume auf mögliche Multilevelstrukturen untersuchen. Betrachten wir dazu die kontinuierliche Randwertaufgabe

$$\begin{aligned} Lu &= f \quad \text{auf } \Omega \\ u &= g \quad \text{auf } \Gamma := \partial\Omega. \end{aligned}$$

Bei einem Multilevelansatz werden mehrere unterschiedlich "feine" Diskretisierungen dieses Problems betrachtet. Die dazu notwendige Folge von Ansatz- und Testräumen werden als ineinander geschachtelt angenommen, damit bereits gewonnene Informationen in feineren Diskretisierungen weiterverwendet werden können.

$$V_0 \subset V_1 \subset \dots \subset V_{J-1} \subset V_J = V^h$$

Wir erhalten also eine Folge von diskreten Approximationen an die Randwertaufgabe.

$$\begin{aligned} u_l &\in V_l \\ L_l u_l &= f_l \end{aligned}$$

Um gewonnene Informationen von Raum V_{l-1} in den Raum V_l zu transportieren, müssen noch Abbildungen R_{l-1}^l, P_l^{l-1} zwischen den verwendeten diskreten Räumen definiert werden.

$$\begin{aligned} R_{l-1}^l : V_l &\rightarrow V_{l-1} && \text{Restriktion, surjektiv} \\ P_l^{l-1} : V_{l-1} &\rightarrow V_l && \text{Prolongation, injektiv} \end{aligned}$$

Diese Transferoperatoren sind beim Galerkinansatz eindeutig durch die gewählten Basen B_l der Räume V_l definiert. P_l^{l-1} läßt sich algebraisch durch eine $n_l \times n_{l-1}$ Matrix darstellen. Dabei ist die i -te Spalte durch die Koeffizienten von $\varphi_i^{l-1} \in B_{l-1}$ in der Darstellung als Linearkombination durch die Basis $\varphi_j^l \in B_l$ gegeben.

$$\varphi_i^{l-1} = \sum_j (P_l^{l-1})_{ij} \varphi_j^l$$

Als Restriktionen ergeben sich durch den Galerkinansatz die Adjungierten der Prolongationen.

$$R_{l-1}^l = P_l^{l-1*}$$

Werden die Abbildungen entsprechend skaliert, gilt

$$R_{l-1}^l = P_l^{l-1T} .$$

Mit diesen Abbildungen zwischen den Räumen V_l und V_{l-1} ergibt sich für die Diskretisierungen L_l und L_{l-1} auf diesen Räumen folgende Identität (Galerkinidentität):

$$L_{l-1} = R_{l-1}^l L_l P_l^{l-1} .$$

Es bietet sich bei den PUM-Räumen die Möglichkeit, eine Folge von unterschiedlich feinen Ansatzräumen mittels der h-Version und der p-Version zu konstruieren. Aufgrund der Konstruktion der Ansatzfunktionen lassen sich die durch die h-Version entstehenden Räume (im allgemeinen) nicht geschachtelt realisieren. Bei der p-Version jedoch entstehen geschachtelte Räume. Wie bereits erwähnt ergibt sich sogar die Hierarchie der Basen bei der p-Version. Sortiert man die Diskretisierungen L_l entsprechend um, gilt

$$L_l = \begin{pmatrix} A & B \\ C & L_{l-1} \end{pmatrix} .$$

Bei dieser Anordnung gilt für die Transferoperatoren

$$\begin{aligned} P_l^{l-1} &= \begin{pmatrix} P_l \\ P_{l-1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ Id \end{pmatrix} , \\ R_{l-1}^l &= \begin{pmatrix} R_l & R_{l-1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & Id \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Für die Effizienz eines Multilevelverfahrens ist die Reduktionsrate der Anzahl der Freiheitsgrade beim Übergang von Level l auf Level $l - 1$ entscheidend. In unserem Fall läßt sich bei der p-Vergrößerung die Reduktionsrate leicht angeben. Betrachten wir dazu die lokalen Polynomräume Π_k^1, Π_k^2 in 2-D. Für deren Mächtigkeit gilt

$$\text{card}(\Pi_k^1) = \frac{(k+2)(k+1)}{2}, \text{ und } \text{card}(\Pi_k^2) = (k+1)^2 .$$

Daher ergeben sich vom Polynomgrad abhängige Reduktionsraten ρ_l , es gilt

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{\text{card}(\Pi_k^1)}{\text{card}(\Pi_{k-1}^1)} = \frac{(k+2)(k+1)}{((k-1)+2)((k-1)+1)} \\ &= \frac{(k+2)(k+1)}{(k+1)k} = \frac{k+2}{k}, \text{ und} \\ \rho_2 &= \frac{\text{card}(\Pi_k^2)}{\text{card}(\Pi_{k-1}^2)} = \frac{(k+1)^2}{k^2} . \end{aligned}$$

Wir erkennen, daß die Reduktionsraten für steigenden Polynomgrad schlechter werden und wesentlich geringer ausfallen, als wir bei gitterbasierten Multilevelverfahren beobachten.

5.2.2 Ein einfacher Vorkonditionierer

Aufgrund der Hierarchie der Basen bei der p -Version läßt sich ein einfacher Multilevel-Vorkonditionierer für die Steifigkeitsmatrix L_l angeben. Wir können

$$C_l = \begin{pmatrix} Id & 0 \\ 0 & L_{l-1}^{-1} \end{pmatrix}$$

als Vorkonditionierer für L_l einsetzen. Verwenden wir für die Berechnung von L_{l-1}^{-1} diesen Ansatz rekursiv weiter, haben wir schließlich die Invertierung der Matrix L_0 durchzuführen. L_0 ist die Steifigkeitsmatrix bezüglich des mit Hilfe der eindimensionalen $V_i^h = \{1\}$ konstruierten PUM-Raums. Da somit die in Abschnitt 3.2 beschriebenen Probleme mit den Außerdiagonaleinträgen nicht auftreten können, besitzt diese Matrix häufig die *M-Matrix* Eigenschaft. Daher kann diese Invertierung beispielsweise mit einem *algebraischen Mehrgitterlöser* durchgeführt werden. Insgesamt erhielte man so einen Vorkonditionierer, der erst die Hierarchie der lokalen Basen ausnutzt, um anschließend die Punkteverteilung mit Hilfe eines algebraischen, d.h. von der Geometrie der Partikelverteilung unabhängigen, Mehrgitterlösers zu vergrößern. Bei dieser Konstruktion werden demzufolge sowohl die p als auch die h Komponenten des Raums für den Vorkonditionierer verwendet.

Wir haben diesen Vorkonditionierer noch nicht implementiert und daher in unseren Experimenten nur die Diagonalskalierung eingesetzt. Wir erwarten jedoch, daß der angegebene Vorkonditionierer zumindest die h -Abhängigkeit der Kondition auflöst und die p -Abhängigkeit auf ein moderates Maß senkt, so daß für die Kondition

$$\kappa \sim \mathcal{O}(1 + f(p))$$

gilt. In [GC97] und [BI97] wurde die iterative Lösung von Steifigkeitsmatrizen der p -Version der FE Methode durch Schwarz Methoden untersucht, dabei wurde

$$\kappa \sim \mathcal{O}\left((1 + \ln p)^2\right)$$

als Resultat bei der Vorkonditionierung präsentiert. Inwieweit obiger Vorkonditionierer dem nahe kommt, müssen weitere Untersuchungen zeigen.

Kapitel 6

Diskretisierung von Evolutionsgleichungen

Die Behandlung zeitabhängiger Probleme

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu \tag{6.1}$$

mit dem Verfahren bietet sich durch die Unabhängigkeit der Partikel untereinander an, denn dadurch kann die Basis des Approximationsraums V^h den Gegebenheiten in jedem Zeitschritt “einfach” angepaßt werden. Diese Anpassung der Basis wird durch eine Basistransformation, die durch das Problem “definiert” wird, realisiert [BA94]. Betrachten wir dazu folgende allgemeine Transformation

$$\begin{aligned} x &= x(\xi, \eta, \tau) , \\ y &= y(\xi, \eta, \tau) , \\ t &= \tau , \end{aligned}$$

wobei ξ und η die “alten” Ortskoordinaten und τ die alte Zeitkoordinate bezeichnen. Diese Transformation wirke sich auf eine Funktion \hat{u} so aus, daß

$$\hat{u}(\xi, \eta, \tau) = u(x, y, t)$$

gilt. Betrachten wir die Zeitableitung im alten Koordinatensystem. Mit obiger Transformation gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau} &= \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \tau} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \tau} \\ &= \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \tau} . \end{aligned}$$

Definieren wir

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau} , \\ \dot{x} &= \frac{\partial x}{\partial \tau} , \\ \dot{y} &= \frac{\partial y}{\partial \tau} , \end{aligned}$$

dann läßt sich die Zeitableitung im neuen System als

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \dot{u} - \frac{\partial u}{\partial x} \dot{x} - \frac{\partial u}{\partial y} \dot{y}$$

schreiben. Setzen wir diese Schreibweise in obige Formulierung (6.1) ein, erhalten wir die sogenannte *Lagrangesche Formulierung* der Differentialgleichung.

$$\dot{u} - \frac{\partial u}{\partial x} \dot{x} - \frac{\partial u}{\partial y} \dot{y} = Lu$$

6.1 Gleichungen erster Ordnung

Betrachten wir ein Beispiel. Es gelte

$$Lu = -v \nabla u,$$

damit erhalten wir die Gleichung

$$\begin{aligned} \dot{u} - \frac{\partial u}{\partial x} \dot{x} - \frac{\partial u}{\partial y} \dot{y} &= -v \nabla u \\ \dot{u} + \frac{\partial u}{\partial x} (v_x - \dot{x}) + \frac{\partial u}{\partial y} (v_y - \dot{y}) &= 0. \end{aligned}$$

Eine Lösung dieser Gleichung erhalten wir für alle $\frac{\partial u}{\partial x}$ und $\frac{\partial u}{\partial y}$ durch eine Lösung des Systems der gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{u} &= 0, \\ \dot{x} &= v_x, \\ \dot{y} &= v_y. \end{aligned}$$

Diese ist nach Integration gegeben durch

$$\begin{aligned} \hat{u}(\xi, \eta, \tau) &= u_0(\xi, \eta), \\ x(\xi, \eta, \tau) &= x_0(\xi, \eta) + v_x \tau, \\ y(\xi, \eta, \tau) &= y_0(\xi, \eta) + v_y \tau, \end{aligned}$$

wobei $u_0(\xi, \eta)$, $x_0(\xi, \eta)$ und $y_0(\xi, \eta)$ die jeweiligen Werte zum Zeitpunkt $\tau = 0$ bezeichnen. Für die Koordinaten x, y gilt zu diesem Zeitpunkt, daß sie den alten Koordinaten entsprechen, daher gilt

$$\begin{aligned} x(\xi, \eta, \tau) &= \xi + v_x \tau, \\ y(\xi, \eta, \tau) &= \eta + v_y \tau. \end{aligned}$$

Und somit ergibt sich die implizite Lösung

$$u(x, y, t) = u_0(x - v_x t, y - v_y t).$$

6.2 Gleichungen zweiter Ordnung

Bei der Diskretisierung von Gleichungen der Form

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla A \nabla u - v \nabla u$$

muß gewöhnlich in jedem Zeitschritt ein Konvektions-Diffusions-Problem behandelt werden.

$$\begin{aligned} \frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} - \nabla A \nabla u^{n+1} + v \nabla u^{n+1} &= 0 \\ \delta t (-\nabla A \nabla u^{n+1} + v \nabla u^{n+1}) + u^{n+1} &= u^n \end{aligned}$$

Deren Diskretisierung ist mit herkömmlichen Methoden problematisch. Es ergeben sich beispielsweise bei der Verwendung zentraler Differenzen Probleme mit der Stabilität. Deswegen werden für die Diskretisierung des konvektiven Terms Diskretisierungen geringerer Konsistenzordnung, die aber eine stabile Diskretisierung liefern, eingesetzt. Dazu zählen die einseitigen Differenzen und Verfahren, welche *künstliche Viskosität* in die Gleichung einführen. Hierbei wird der diffusive Anteil des Operators soweit vergrößert, daß die durch den konvektiven Term hervorgerufenen Instabilitäten nicht mehr ins Gewicht fallen. Verwendet man jedoch ein Verfahren, daß den konvektiven Teil des Operators durch die Transformation der Basis diskretisiert, so kann man auf das Einführen künstlicher Diffusion verzichten. Betrachten wir dazu obiges Schema und führen wir eine Hilfsgröße \hat{u} ein, ergibt sich

$$\frac{u^{n+1} - \hat{u} + \hat{u} - u^n}{\delta t} - \nabla A \nabla u^{n+1} + v \nabla u^{n+1} = 0 .$$

Mit Hilfe von \hat{u} und einer angepaßten Zeitdiskretisierung, können wir die Gleichung in

$$\frac{\hat{u} - u^n}{\delta t} + v \nabla u^n = 0 , \quad (6.2)$$

$$\frac{u^{n+1} - \hat{u}}{\delta t} - \nabla A \nabla u^{n+1} = 0 , \quad (6.3)$$

zerlegen. Nach obigem Beispiel läßt sich die Gleichung (6.2) durch die Transformation der Basis implizit lösen. Wir erhalten demnach

$$\hat{u}(x, y) = u^n(x - v_x \delta t, y - v_y \delta t)$$

als Lösung. Nachdem die eingeführte Hilfsgröße \hat{u} bekannt ist, kann Gleichung (6.3) danach aufgelöst werden.

$$\delta t (-\nabla A \nabla u^{n+1}) + u^{n+1} = \hat{u}$$

Zur Diskretisierung dieser reinen Diffusions-Gleichung läßt sich das Galerkinverfahren mit dem PUM-Raum als Ansatz- und Testraum verwenden. Somit sind zur Behandlung von Gleichungen der Form

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla A \nabla u - v \nabla u$$

mit dem oben beschriebenen Vorgehen, die folgenden Schritte pro Zeitschritt auszuführen:

1. Bestimme die neuen Partikelpositionen, die durch die Transformation als

$$x_i^{n+1} = x_i^n + v \delta t \quad i = 1, \dots, N$$

definiert sind.

2. Konstruiere zu den Partikeln x_i^{n+1} einen neuen Raum von Ansatz- und Testfunktionen V^{n+1} .
3. Diskretisiere die Gleichung

$$\delta t (-\nabla A \nabla u^{n+1}(x, y)) + u^{n+1}(x, y) = \hat{u}(x, y) ,$$

wobei \hat{u} durch

$$\hat{u}(x, y) = u^n(x - v_x \delta t, y - v_y \delta t)$$

gegeben ist, mit dem Galerkinverfahren und dem konstruierten Raum V^{n+1} .

4. Löse das entstandene lineare Gleichungssystem.

Bemerkung 6.1

Eine weitere Anpassung der Partikelpositionen, welche den diffusiven Transport beschreibt, ist mittels der Einführung eines Monte-Carlo-Schritts bei der Untersuchung von Gleichungen mit starker Diffusion sinnvoll. Dabei ist zu beachten, daß die Zeitschrittweite und der Streckungsparameter σ bei einem Monte-Carlo-Schritt nicht unabhängig voneinander gewählt werden sollten. Ist σ zu klein im Vergleich zum Zeitschritt, so wirkt sich der diffusive Transport nicht auf die Partikelpositionen aus. Verwendet man einen zu großen Streckungsparameter, so eilen die Partikel der Diffusion voraus. In herkömmlichen Partikelverfahren [GS91], [NKS95] ist dieser Monte-Carlo-Schritt notwendig zur Diskretisierung der Diffusion, daher kann man sich bei der Durchführung dieses Schritts an den Erkenntnissen dieser Methoden orientieren. In [GS91] wird für die Diskretisierung der Diffusion folgender Ansatz gewählt.

$$x_i^{n+1} = x_i^{n+1} + \sigma \xi \quad i = 1, \dots, N$$

Wobei $\sigma = (2\delta t A)^{1/2}$ gewählt wird und ξ ein Vektor von unabhängigen gaußverteilten Zufallszahlen mit Mittelwert 0 und Varianz 1 ist.

Wenn man bei der Diskretisierung der rechten Seite berücksichtigt, daß sich die neuen Supports Ω_i^{n+1} nur geringfügig von den alten Ω_i^n unterscheiden, läßt sich der Aufwand bei der Berechnung der Integrale für die rechte Seite erheblich reduzieren, denn es ist bei der Bestimmung von

$$\int_{\Omega \cap \Omega_i^{n+1}} \left(\sum_k u_k^n \varphi_k^n(\cdot - v\delta t) \right) \varphi_j^{n+1}$$

die Summation nur über die k auszuführen, für die gilt $\Omega_k^n \cap \Omega_i^{n+1} \neq \emptyset$. Damit läßt sich die Berechnung der rechten Seite auch in $\mathcal{O}(N)$ realisieren.

Kapitel 7

Numerische Experimente

Im folgenden werden wir stationäre Gleichungen

$$Lu = f$$

und zeitabhängige Gleichungen

$$Lu = \frac{\partial u}{\partial t}$$

mit Operatoren der Form

$$Lu = -\nabla(A\nabla u) + bu$$

auf einem Quadrat betrachten. Die Experimente umfassen sowohl Neumann- als auch Dirichlet-Randwertaufgaben. Die Behandlung des Dirichlet-Problems führt mit dem gewählten Ansatz zu einem Sattelpunktproblem. Um das Sattelpunktproblem zu lösen, muß aber das homogene Neumann-Problem gelöst werden. Daher werden wir mit der Untersuchung der Neumann-Aufgabe beginnen. Die Aufgaben werden jeweils auf verschiedenen Partikelverteilungen untersucht, um auf eventuell auftretende Probleme beim Übergang von äquidistanten auf allgemeinere Punktverteilungen eingehen zu können. Die von uns verwendeten Partikelverteilungen sind die folgenden:

- die Knoten eines äquidistanten Gitters im Inneren des Gebietes Ω
- eine Haltonpunktfolge im Abschluß von Ω
- eine Transformierte der äquidistanten Punktfolge

Bemerkung 7.1

Die Haltonpunktfolge wurde wie folgt generiert. Es sei $\phi_p(n) = \sum_j n_j p^j$ die p -adische Entwicklung von $n \in \mathbb{N}$. Definieren wir die Transformation

$$\begin{aligned} \psi_p : \mathbb{N} &\rightarrow [0, 1], \\ \psi_p(n) &:= \sum_j n_j p^{-j-1}, \end{aligned}$$

dann ist die Haltonpunktfolge definiert als

$$P_k := (\psi_{p_1}(k), \psi_{p_2}(k), \dots, \psi_{p_d}(k)) \quad k = 0, 1, \dots, N-1.$$

Wir haben in x -Richtung die 2-adische Entwicklung und in y -Richtung die 3-adische Entwicklung gewählt.

In unseren Experimenten wurde ein PCG-Verfahren mit Jacobi-Vorkonditionierer als Löser für die Neumann-Aufgaben verwendet. Die in den Tabellen angegebenen Iterationszahlen (*iter*) bezeichnen die Anzahl der benötigten Iterationen, um $\|r\| < 10^{-13}$ zu gewährleisten.

Bemerkung 7.2

Alle Berechnungen wurden mit doppelter Genauigkeit auf mehreren Workstations von Silicon Graphics unter IRIX 6.2/6.3/6.4 und einem Pentium-PC unter Linux durchgeführt. Die einzelnen Programme wurden in ANSI-C geschrieben, diese wurden auf den SGI Workstations (Indigo II - R4400; O2 - R5000, R10000; Origin 200 - R10000) mit dem C-Compiler des Herstellers und auf dem PC mit dem GNU C-Compiler übersetzt.

7.1 Die Helmholtz-Gleichung

Zu Beginn wollen wir das Verfahren zur Diskretisierung der Gleichung

$$-\Delta u + u = f$$

einsetzen. Aufgrund der konstanten Diffusionskoeffizienten tritt hier das Problem der Integration der Ansatzfunktionen ohne zusätzliche Komplikation durch Sprünge oder Ähnliches auf. Wir beginnen mit dem Neumann-Problem

$$-\Delta u + u = f \quad \text{auf } \Omega = (0, 1) \times (0, 1), \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = g \quad \text{auf } \Gamma := \partial\Omega. \quad (7.2)$$

Wobei f und g so gewählt sind, daß für die exakte Lösung

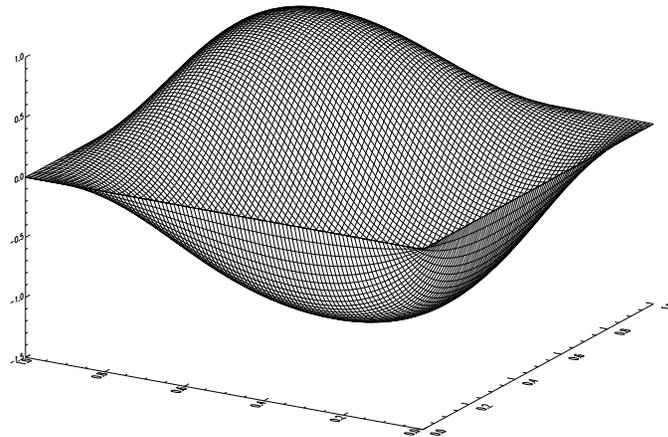


Abbildung 7.1. Graph von $u(x, y) = \arctan(100(\frac{x+y}{\sqrt{2}} - 0.8)(x - x^2)(y - y^2))$

$$u(x, y) = \arctan(\alpha(\frac{x+y}{\sqrt{2}} - \xi)(x - x^2)(y - y^2))$$

mit $\alpha = 100$ und $\xi = 0.8$ gilt. Gleichung (7.1) führt zur Bilinearform

$$a(\varphi_i, \varphi_j) := \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j + \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j, \quad (7.3)$$

welche symmetrisch und auf H^1 koerziv ist. Bei exakter Integration erhalte man demnach ein symmetrisch positiv definites Gleichungssystem. Die Integrale werden allerdings numerisch berechnet und sind daher mit einem Fehler behaftet. Da die beiden Summanden in (7.3) von unterschiedlicher Ordnung sind,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j &\sim \mathcal{O}(1) \\ \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j &\sim \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

ist bei der Wahl des Quadraturverfahrens zu beachten, daß eine Quadraturformel verwendet wird, die deren Summe ausreichend genau berechnet. Bezeichnet $\mathcal{E}_{I_{\Omega}^h}$ den Fehler bei der Quadratur, ergibt sich als Forderung die Vermeidung von

$$I_{\Omega}^h(\varphi_i \varphi_j) \sim \mathcal{E}_{I_{\Omega}^h}(\nabla \varphi_i \nabla \varphi_j). \quad (7.4)$$

Falls (7.4) gilt, ist das entstehende Gleichungssystem nicht mehr positiv definit. Die diskrete Bilinearform

$$a_h(\varphi_i, \varphi_j) := I_{\Omega}^h(\nabla \varphi_i \nabla \varphi_j) + I_{\Omega}^h(\varphi_i \varphi_j)$$

degeneriert zu einer anderen diskreten Bilinearform (7.5), deren kontinuierliche Fassung (7.6) nicht auf H^1 , sondern nur auf H_0^1 koerziv ist.

$$a_h(\varphi_i, \varphi_j) = I_{\Omega}^h(\nabla \varphi_i \nabla \varphi_j) \quad (7.5)$$

$$a(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j \quad (7.6)$$

7.1.1 h-Version

Beginnen wollen wir mit einer äquidistanten Partikelverteilung. Die Partikel werden als Knoten eines äquidistanten Gitters gewählt, wobei keine Partikel auf dem Rand $\partial\Omega$ liegen. Es gilt demnach für $i = 1, \dots, N$

$$\begin{aligned} x_i &= (kh, jh) \quad k = 1, 2, \dots, n \quad j = 1, 2, \dots, n \\ \Omega_i &= [kh - \alpha h, kh + \alpha h] \times [jh - \alpha h, jh + \alpha h], \end{aligned}$$

wobei $h = \frac{1}{n+1}$ und $N = n^2$ gilt. Der Parameter α dient als Streckungsfaktor, um die Größen der Überlappungen der Ω_i zu kontrollieren. Für die randnahen Partikel $x_i \in R^h$ wird $\alpha > 1$ gewählt, da wir den Rand $\partial\Omega$ auch überdecken müssen. Wählen wir einen linearen Spline als Gewichtsfunktion und setzen $\alpha = 1$ für die inneren Partikel $x_i \notin R^h$ und $\alpha = 2$ für die randnahen Partikel, ergeben sich zu Partikeln x_i , für die $N_i \cap R^h = \emptyset$ gilt, die Hutfunktionen als PU Funktion φ_i . Als lokale Räume V_i^h verwenden wir den Raum der vollständigen linearen Polynome, d.h. wir haben als Referenzraum auf $(-1, 1) \times (-1, 1)$ den Raum $\{1, x, y\}$ verwendet. Von diesen lokalen Räumen ausgehend wird eine quadratische Konvergenzordnung erwartet, da die PU jedoch im Inneren schon die linearen Funktionen reproduziert, ist im Inneren eine kubische Konvergenzordnung zu erwarten. Insgesamt können wir also eine Konvergenzordnung β_{L^2} zwischen 2 und 3 bezüglich der L^2 -Norm erwarten. In Tabelle 7.1 sind die Normen der einzelnen Konfigurationen und in Tabelle 7.2 die Konvergenzordnungen β bezüglich der L^∞, L^1, L^2 Normen und der H^1 Seminorm festgehalten.

Tabelle 7.1. Ergebnisse zu (7.1), (7.2) mit einer äquidistanten Punktfolge und linearem Spline

N	64	256	1024	4096	16384
dof	192	768	3072	12288	49152
iter	94	231	495	935	1765
$\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}$	$2.904 \cdot 10^{-1}$	$1.028 \cdot 10^{-1}$	$2.891 \cdot 10^{-2}$	$7.588 \cdot 10^{-3}$	$1.938 \cdot 10^{-3}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^1}$	$2.183 \cdot 10^{-2}$	$4.348 \cdot 10^{-3}$	$7.245 \cdot 10^{-4}$	$1.196 \cdot 10^{-4}$	$2.214 \cdot 10^{-5}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^2}$	$3.461 \cdot 10^{-2}$	$8.271 \cdot 10^{-3}$	$1.556 \cdot 10^{-3}$	$2.693 \cdot 10^{-4}$	$4.704 \cdot 10^{-5}$
$\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}$	$1.131 \cdot 10^0$	$5.045 \cdot 10^{-1}$	$1.882 \cdot 10^{-1}$	$6.877 \cdot 10^{-2}$	$2.645 \cdot 10^{-2}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{L^2}}{\ u\ _{L^2}}$	$3.821 \cdot 10^{-2}$	$1.075 \cdot 10^{-2}$	$2.897 \cdot 10^{-3}$	$7.914 \cdot 10^{-4}$	$2.265 \cdot 10^{-5}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}}{\ u\ _{H_0^1}}$	$2.924 \cdot 10^{-1}$	$1.304 \cdot 10^{-1}$	$4.864 \cdot 10^{-2}$	$1.777 \cdot 10^{-2}$	$6.836 \cdot 10^{-3}$

Es wurden lineare Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 10 Gaußknoten pro Zelle durchgeführt. Als Streckungsfaktor α wurde für die inneren Partikel $\alpha = 1.0$ und für die randnahen Partikel $x_i \in R^h$ $\alpha = 2.0$ verwendet.

Bemerkung 7.3

Die Einträge der Zeile β_{L^∞} bezeichnen die wie folgt bestimmten Konvergenzordnungen. Gilt für den Fehler $\|u - u_h\|_{L^\infty} \sim \mathcal{O}(h^{\beta_{L^\infty}})$, so gilt für die Konvergenzordnung β_{L^∞}

$$\beta_{L^\infty} = \frac{\log\left(\frac{\|u - u_{h_{l-1}}\|_{L^\infty}}{\|u - u_{h_l}\|_{L^\infty}}\right)}{\log\left(\frac{h_{l-1}}{h_l}\right)}.$$

Die Einträge der anderen Zeilen bezeichnen die analogen Werte für die entsprechenden Normen. Da bei der allgemeinen Partikelverteilung sich auch die Supportgrößen verschiedener Partikel unterscheiden, sind in den Tabellen das maximale h^{max} , das minimale h^{min} sowie der Durchschnitt h^{avg} aller h für die jeweilige Partikelverteilung angegeben. Wie in Abschnitt 2.4 dargestellt, ist der Fehler nur gegen h^{max} abschätzbar. Da diese Abschätzung sehr grob ist, müssen wir bei der Verwendung von h^{max} zur Bestimmung der Konvergenzordnungen β des Verfahrens für irreguläre Partikelverteilungen mit "großen" Schwankungen der β rechnen. Auf diese Problematik wollen wir bei unseren Experimenten mit der Haltonpunktfolge näher eingehen.

Bemerkung 7.4

Da die Fehler des Verfahrens nur grob gegen eine Supportgröße (gegen h^{max}) abgeschätzt werden können, sind zu den Experimenten jeweils auch die Normen der Fehler gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade in einem Graphen aufgetragen. Die Steigungen γ dieser Graphen sind durch

$$\gamma = \frac{\log\left(\frac{\|u - u_l\|}{\|u - u_{l-1}\|}\right)}{\log\left(\frac{\text{dof}_l}{\text{dof}_{l-1}}\right)}$$

Tabelle 7.2. Konvergenzordnungen zu Tabelle 7.1

N	64	256	1024	4096	16384
h^{max}	$2.222 \cdot 10^{-1}$	$1.177 \cdot 10^{-1}$	$6.061 \cdot 10^{-2}$	$3.077 \cdot 10^{-2}$	$1.550 \cdot 10^{-2}$
h^{min}	$1.111 \cdot 10^{-1}$	$5.882 \cdot 10^{-2}$	$3.030 \cdot 10^{-2}$	$1.539 \cdot 10^{-2}$	$7.752 \cdot 10^{-3}$
h^{avg}	$1.389 \cdot 10^{-1}$	$6.618 \cdot 10^{-2}$	$3.220 \cdot 10^{-2}$	$1.587 \cdot 10^{-2}$	$7.873 \cdot 10^{-3}$
$\frac{h_{l-1}^{max}}{h_l^{max}}$	***	1.888	1.942	1.967	1.985
$\frac{h_{l-1}^{min}}{h_l^{min}}$	***	1.889	1.941	1.969	1.986
$\frac{\ u-u_{h_{l-1}}\ _{L^\infty}}{\ u-u_{h_l}\ _{L^\infty}}$	***	2.825	3.555	3.810	3.915
β_{L^∞}	***	1.633	1.912	2.017	1.989
$\frac{\ u-u_{h_{l-1}}\ _{L^1}}{\ u-u_{h_l}\ _{L^1}}$	***	5.022	6.000	6.057	5.403
β_{L^1}	***	2.536	2.704	2.667	2.473
$\frac{\ u-u_{h_{l-1}}\ _{L^2}}{\ u-u_{h_l}\ _{L^2}}$	***	4.184	5.317	5.776	5.725
β_{L^2}	***	2.250	2.520	2.598	2.539
$\frac{\ u-u_{h_{l-1}}\ _{H_0^1}}{\ u-u_{h_l}\ _{H_0^1}}$	***	2.243	2.681	2.737	2.600
$\beta_{H_0^1}$	***	1.295	1.494	1.496	1.374

gegeben. In Ermangelung einer Abschätzung des Fehlers gegen die Anzahl der Freiheitsgrade, sind diese Steigungen γ über den Zusammenhang der Durchmesser der Ω_i mit der Anzahl der Freiheitsgrade abzuschätzen. Damit können wir für die Steigungen γ ähnliche Schwankungen wie für die Konvergenzordnungen β bei der h-Version für eine irreguläre Partikelverteilung erwarten.

Die beobachteten Ordnungen β stimmen mit unseren Erwartungen überein. Wenn wir berücksichtigen, daß der Fehler in der Nähe des Randes am Größten ist, und daß die PU in den Partikeln $x_i \in R^h$ wirklich nur die Konstante reproduziert, können wir erwarten, daß das Konvergenzverhalten in der L^∞ -Norm nahezu mit der lokalen Approximationsordnung übereinstimmt. Der Tabelle 7.2 können wir dieses quadratische Konvergenzverhalten auch entnehmen. Desweiteren ist aus Tabelle 7.1 anhand der CG-Iterationszahlen, die Entwicklung der Kondition κ des Systems abzulesen. Wir erkennen, daß für die Kondition des Gleichungssystems $\kappa \sim \mathcal{O}(h^2)$ gilt. Da für eine äquidistante Partikelverteilung ein direkter Zusammenhang zwischen der Partikelanzahl und der Durchmesser der Ω_i besteht, können wir für die in Abbildung 7.2 dargestellten Graphen annähernd konstante Steigungen beobachten. Wir erhalten die folgenden Werte für γ :

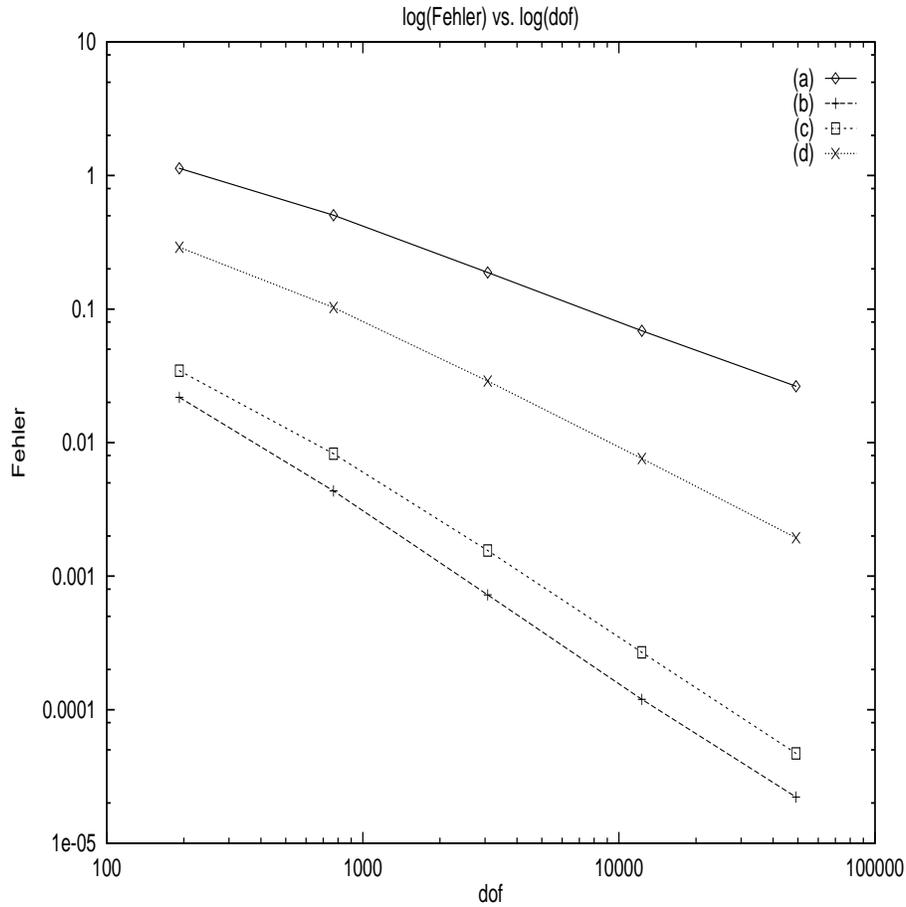


Abbildung 7.2. Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade

Norm	γ^{avg}	γ^{max}	γ^{min}
L^∞	-0.903	-0.985	-0.749
L^1	-1.243	-1.299	-1.164
L^2	-1.190	-1.265	-1.033
H_0^1	-0.677	-0.726	-0.583

Die Steigungen γ^{min} sind jeweils die im ersten Verfeinerungsschritt gemessenen Steigungen. Für diese geringen Partikelzahlen dürfen wir das asymptotische Verhalten des Verfahrens noch nicht erwarten, dementsprechend fallen die gemessenen Steigungen geringer aus. In den folgenden Verfeinerungsschritten liegen alle Steigungen in der Nähe von γ^{max} , was auch an den Werten γ^{avg} abgelesen werden kann. (Dies läßt sich bei allen Experimenten beobachten.) Im nächsten Beispiel werden die Ω_i mittels $\alpha = 0.75$ für die inneren Partikel verkleinert. Es ergibt sich somit um jedes dieser Partikel $x_i \notin R^h$ ein Bereich $\hat{\Omega}_i$, auf dem $\varphi_i \equiv 1$ gilt, siehe Abbildung 7.3. Folglich reproduziert die Partition der Eins in diesem Fall nur die Konstante. Wir verwenden einen quadratischen Spline als Gewichtsfunktion und konstruieren daher in diesem Beispiel eine Lösung $u_h \in \mathcal{C}^1$. Als lokale Approximationsräume behalten wir die linearen Räume bei, so daß ein linearer Ansatz entsteht. Aufgrund dieser Wahl, ist ein quadratisches Konvergenzverhalten zu erwarten. Die in den Tabellen 7.3 und 7.4 festgehaltenen Ergebnisse und die in Abbildung 7.6 dargestellten

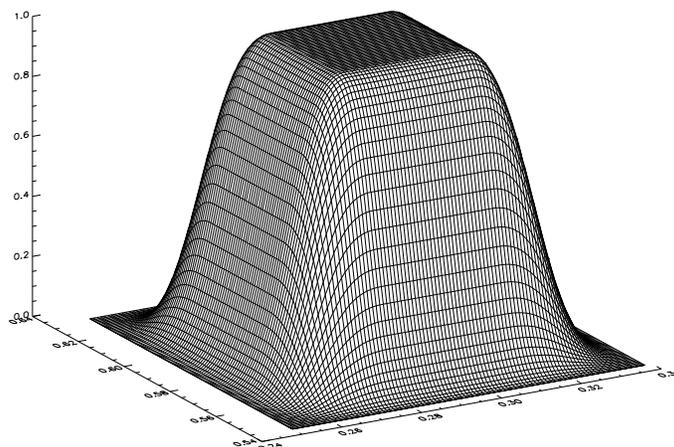


Abbildung 7.3. Die Funktion φ_i der Partition der Eins eines inneren Partikels x_i . Zur Konstruktion der Partition der Eins wurden quadratische Gewichte und eine äquidistante Punktfolge mit 256 Punkten verwendet.

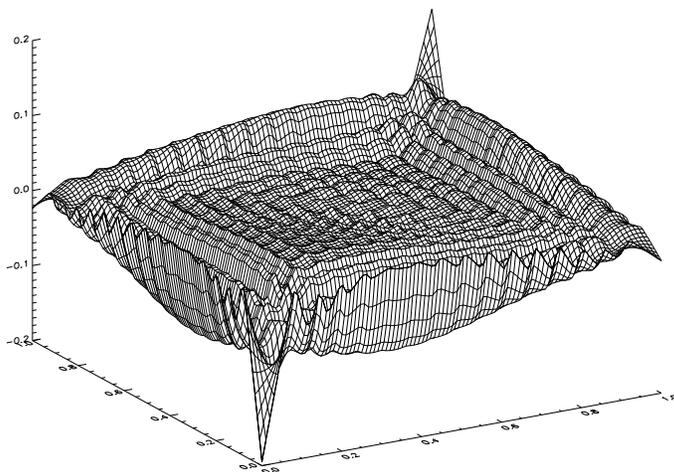


Abbildung 7.4. Fehler $u - u_h$ für die Approximierende u_h bezüglich einer äquidistanten Punktfolge mit 256 Punkten

Graphen spiegeln dieses Verhalten auch wider. Wir erhalten die Steigungen γ :

Norm	γ^{avg}	γ^{max}	γ^{min}
L^∞	-0.807	-0.946	-0.552
L^1	-1.078	-1.161	-0.935
L^2	-1.048	-1.162	-0.861
H_0^1	-0.533	-0.591	-0.418

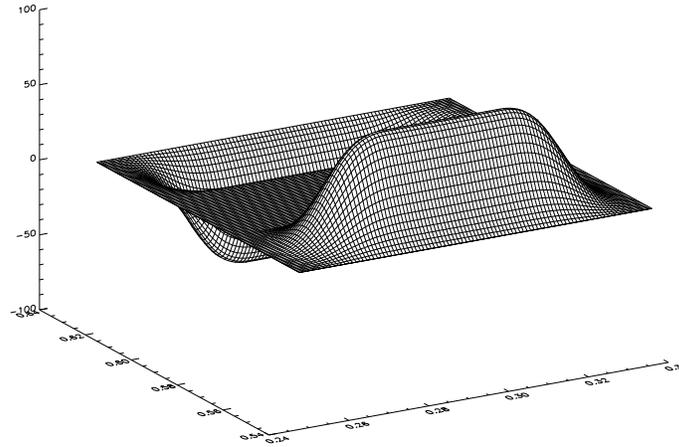
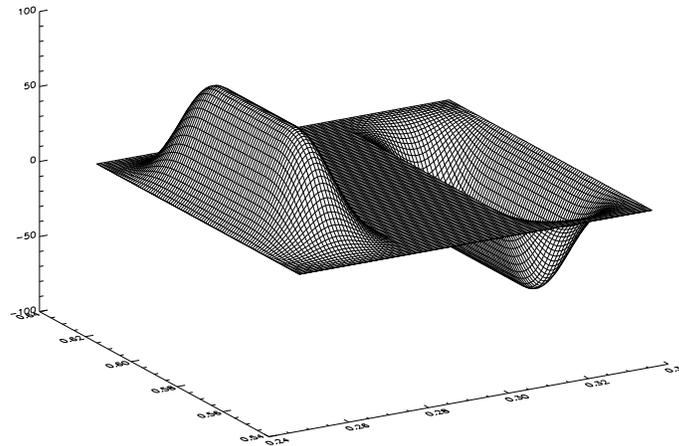
(a) $\frac{\partial \varphi_i}{\partial x}$ zum quadratischen Spline(b) $\frac{\partial \varphi_i}{\partial y}$ zum quadratischen Spline

Abbildung 7.5. Die Ableitungen der Funktion φ_i eines inneren Partikels x_i zu einer äquidistanten Punktfolge mit 256 Punkten und quadratischen Gewichten.

Diese Steigungen und die in den Tabellen festgehaltenen Konvergenzordnungen β liegen etwas oberhalb der lokalen Approximationsordnung, was sich darauf zurückführen läßt, daß die lokalen Polynome nicht bezüglich ihrer lokalen Optimalität bestimmt werden, siehe Bemerkung 2.1. Aus Abbildung 7.4 wir deutlich, daß der Fehler in der Nähe des Randes wiederum am Größten ist.

Tabelle 7.3. Ergebnisse zu (7.1), (7.2) mit einer äquidistanten Punktfolge und quadratischem Spline

N	64	256	1024	4096	16384
dof	192	768	3072	12288	49152
iter	66	135	285	588	1197
$\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}$	$4.187 \cdot 10^{-1}$	$1.947 \cdot 10^{-1}$	$6.331 \cdot 10^{-2}$	$1.773 \cdot 10^{-2}$	$4.777 \cdot 10^{-3}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^1}$	$6.445 \cdot 10^{-2}$	$1.764 \cdot 10^{-2}$	$3.812 \cdot 10^{-3}$	$7.623 \cdot 10^{-4}$	$1.730 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^2}$	$8.709 \cdot 10^{-2}$	$2.639 \cdot 10^{-2}$	$6.372 \cdot 10^{-3}$	$1.307 \cdot 10^{-3}$	$2.707 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}$	$1.901 \cdot 10^0$	$1.065 \cdot 10^0$	$5.070 \cdot 10^{-1}$	$2.243 \cdot 10^{-1}$	$9.353 \cdot 10^{-2}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{L^2}}{\ u\ _{L^2}}$	$1.619 \cdot 10^{-1}$	$4.907 \cdot 10^{-2}$	$1.185 \cdot 10^{-2}$	$2.430 \cdot 10^{-3}$	$4.855 \cdot 10^{-4}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}}{\ u\ _{H_0^1}}$	$4.913 \cdot 10^{-1}$	$2.751 \cdot 10^{-1}$	$1.313 \cdot 10^{-1}$	$5.797 \cdot 10^{-2}$	$2.553 \cdot 10^{-2}$

Es wurden lineare Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 10 Gaußknoten pro Zelle durchgeführt. Als Streckungsfaktor α wurde für die inneren Partikel $\alpha = 0.75$ und für die randnahen Partikel $x_i \in R^h$ $\alpha = 2.0$ verwendet.

Da die Partikel $x_i \in R^h$ weniger Nachbarn haben als die inneren Partikel, liegen die vom Verfahren bestimmten lokalen Polynome für randnahe Partikel “näher” an den lokal-optimalen, so daß das Konvergenzverhalten des Verfahrens in der L^∞ -Norm dem lokalen Konvergenzverhalten “entspricht”. Anhand der β_{L^∞} Einträge der Tabelle 7.4, können wir dies wie erwartet beobachten. Die gemessenen Konvergenzordnungen liegen etwas über der lokalen Approximationsordnung, jedoch liegen sie unterhalb der Konvergenzordnungen im obigen Beispiel der linearen Gewichtsfunktion, was auf die Reproduktion der linearen Funktionen durch die PU in diesem Fall zurückzuführen ist. Die Entwicklung der Kondition in dieser Konfiguration entspricht der Entwicklung im obigen Beispiel, es gilt $\kappa \sim \mathcal{O}(h^2)$.

Die nächste Verallgemeinerung der Testsituation ist der Übergang zur Haltonpunktfolge. Den PUM-Raum konstruieren wir bezüglich der mit $\alpha = 1.5$ gestreckten Überdeckungselemente Ω_i . Auf diesen Ω_i setzen wir einen quadratischen und einen kubischen Spline als Gewicht W_i zur Konstruktion der PU ein, d.h. wir bestimmen eine \mathcal{C}^1 und eine \mathcal{C}^2 Approximierende. Als lokale Approximationsräume verwenden wir wiederum die linearen Räume, so daß wir von einer quadratischen Konvergenz des Verfahrens in der L^2 -Normen ausgehen können. Bezüglich welcher Supportgröße die Konvergenzordnung bestimmt werden muß ist nicht klar. Nach Satz 2.1 gilt für den Fehler, daß dieser durch eine Summe der lokalen Fehler abgeschätzt werden kann. Diese Summe kann nur gegen die maximale Supportgröße abgeschätzt werden, so daß wir formal h^{max} zur Bestimmung der Konvergenzordnungen verwenden “müssen”. Da die Abschätzung gegen h^{max} sehr grob und bei irregulären Partikelverteilungen der Parameter M der PU nicht identisch für alle Level ist, müssen starke Schwankungen bei diesen Konvergenzordnungen erwartet werden. Desweiteren erläutert Bemerkung 2.1, daß durch die Überlappung der lokalen Räume V_i^h global eine bessere Fehlerentwicklung erwartet werden darf als lokal. Daher wollen wir bei der Frage welche Supportgröße wir zur Berechnung der Konvergenzordnungen heranziehen wollen, die Quotienten

Tabelle 7.4. Konvergenzordnungen zu Tabelle 7.3

N	64	256	1024	4096	16384
h^{max}	$2.222 \cdot 10^{-1}$	$1.177 \cdot 10^{-1}$	$6.061 \cdot 10^{-2}$	$3.077 \cdot 10^{-2}$	$1.550 \cdot 10^{-2}$
h^{min}	$8.333 \cdot 10^{-2}$	$4.412 \cdot 10^{-2}$	$2.272 \cdot 10^{-2}$	$1.154 \cdot 10^{-2}$	$5.814 \cdot 10^{-3}$
h^{avg}	$1.181 \cdot 10^{-1}$	$5.331 \cdot 10^{-2}$	$2.510 \cdot 10^{-2}$	$1.214 \cdot 10^{-2}$	$5.965 \cdot 10^{-3}$
$\frac{h_{l-1}^{max}}{h_l^{max}}$	***	1.888	1.942	1.967	1.985
$\frac{h_{l-1}^{min}}{h_l^{min}}$	***	1.889	1.942	1.969	1.985
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^\infty}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}}$	***	2.150	3.075	3.570	3.712
β_{L^∞}	***	1.203	1.692	1.878	1.913
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^1}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^1}}$	***	3.655	4.626	5.001	4.672
β_{L^1}	***	2.038	2.308	2.376	2.248
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^2}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^2}}$	***	3.300	4.142	4.876	5.004
β_{L^2}	***	1.877	2.141	2.338	2.349
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{H_0^1}}{\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}}$	***	1.785	2.100	2.260	2.270
$\beta_{H_0^1}$	***	0.911	1.118	1.203	1.196

der Supportgrößen und der Fehler betrachten. Die Quotienten sind in den Tabellen 7.7 und 7.8 festgehalten. Wir erwarten ein quadratisches Konvergenzverhalten in der L^2 -Norm, folglich muß für den h -Quotienten

$$\frac{h_{l-1}}{h_l} > 2$$

gelten, falls für den Fehlerquotienten

$$\frac{\|u - u_{h_{l-1}}\|_{L^2}}{\|u - u_{h_l}\|_{L^2}} > 4$$

gilt. Die ersten Spalten der Tabellen zeigen, daß die Fehlerentwicklung in diesen Fällen von h^{min} dominiert wird. Die Konvergenzordnungen wurden deshalb bezüglich h^{min} bestimmt. Wie oben dargestellt besteht jedoch nicht die Möglichkeit, den Fehler gegen h^{min} abzuschätzen, so daß es für die von uns bestimmten β keine theoretische Grundlage gibt. Der in Tabelle 7.7 zu beobachtende Abfall der Konvergenzordnungen β ist darauf zurückzuführen. Betrachten wir in diesem Fall den h^{max} -Quotienten, so ergibt sich wieder das erwartete quadratische Konvergenzverhalten. Es gilt

$$\hat{\beta}_{L^2} = \frac{\log(4.061)}{\log(1.964)} = 2.076 .$$

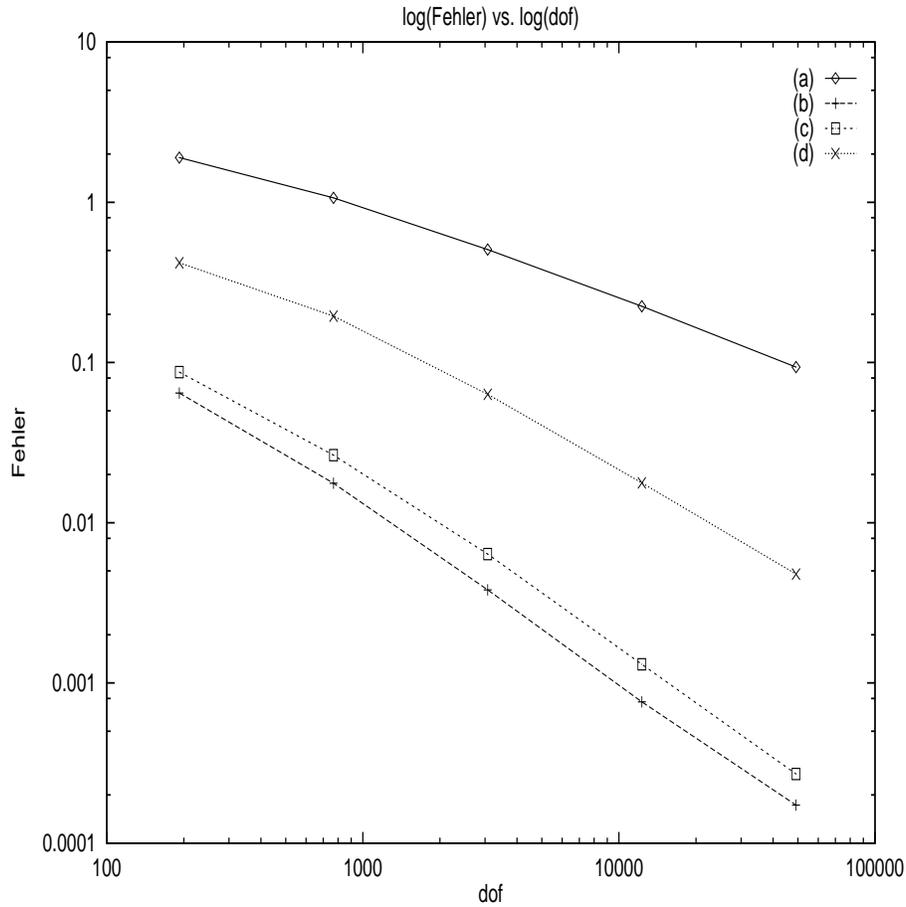


Abbildung 7.6. Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade

Eine Untersuchung der Entwicklung der einzelnen Ω_i zeigt, daß in die Ω_i^{4096} mit kleinem Durchmesser nicht genügend Partikel zur Halbierung des Durchmessers eingefügt wurden. Daher ergeben sich auf diesen lokal geringere Fehlerreduktionen, was sich in diesem Fall auf den globalen Fehler auswirkte, denn in diesen Bereichen waren die Fehler groß. Desweiteren ist die Anzahl der Ω_i^{16384} mit relativ großem Durchmesser gestiegen, und die Ω_i^{16384} mit relativ kleinem Durchmesser liegen in anderen Bereichen von Ω , d.h. in Bereichen kleiner Fehler. Aus diesen Gründen ergibt sich das veränderte Konvergenzverhalten des Verfahrens bei diesem Beispiel. Da keine Abschätzung des Fehlers gegen die Anzahl der Freiheitsgrade zur Verfügung steht, müssen wir zur Abschätzung der Steigungen der Graphen aus den Abbildungen 7.8 und 7.9 die Durchmesser der Ω_i betrachten. Aufgrund der Gleichverteilung der Haltonpunktfolge ergibt sich, wie wir aus den h^{avg} Einträgen in den Tabellen entnehmen können, daß die Ω_i im Durchschnitt halbiert werden. Daher können wir erwarten, daß die Steigungen γ der Graphen nur geringfügig schwanken. Wir erhalten für die Graphen zu den C^1 Lösungen (Abbildung 7.8) die Steigungen γ :

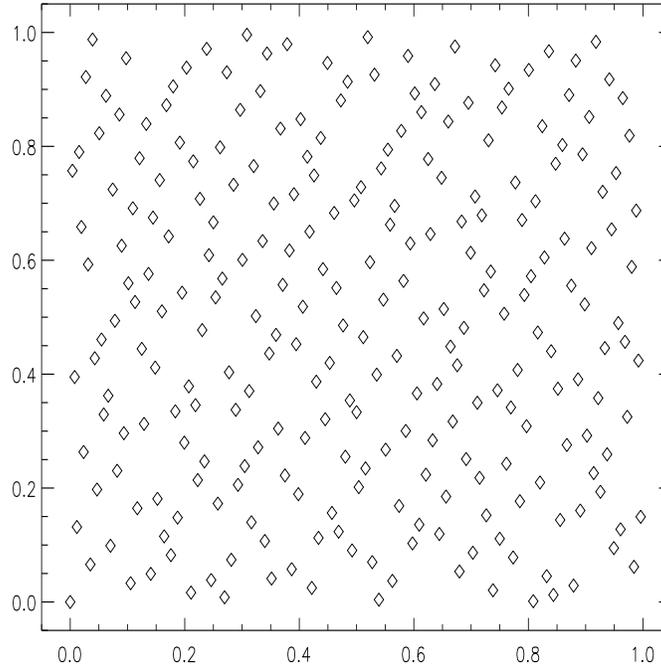


Abbildung 7.7. Partikelverteilung für eine Haltonpunktfolge mit 256 Punkten

Norm	γ^{avg}	γ^{max}	γ^{min}
L^∞	-0.923	-0.967	-0.860
L^1	-1.012	-1.175	-0.863
L^2	-1.028	-1.182	-0.874
H_0^1	-0.529	-0.638	-0.434

Für die Graphen zu den C^2 Lösungen (Abbildung 7.9) ergeben sich die Steigungen γ :

Norm	γ^{avg}	γ^{max}	γ^{min}
L^∞	-0.895	-1.077	-0.795
L^1	-1.021	-1.110	-0.883
L^2	-1.016	-1.096	-0.897
H_0^1	-0.518	-0.568	-0.468

Insgesamt zeigt dieses Experiment mit der Haltonpunktfolge, daß das Einfügen von Partikeln in Bereichen großer Fehler ein Konvergenzverhalten oberhalb der lokalen Approximationsgüte erzeugen kann, wohingegen das wahllose Einfügen von Partikeln das Konvergenzverhalten des Verfahrens nur in Bereiche der *worst-case* Abschätzung gegen den maximalen Supportdurchmesser drücken wird. Um ein an den Fehler angepaßtes Einfügen von Partikeln zu ermöglichen, sind entsprechende Fehlerschätzer zu entwickeln. Stehen diese zur Verfügung, läßt sich demnach mit dem Verfahren eine optimale Konvergenz bei minimaler Anzahl von Freiheitsgraden erzielen. Anhand der Mittelwerte γ^{avg} wird deutlich, daß wir insgesamt durch die Überlappungen der lokalen Räume eine geringfügig bessere Konvergenzordnung erhalten, als wir von dem lokalen Ansatz erwarten dürfen. Im Vergleich zu den Ergebnissen bei einer äquidistanten Punktfolge zeigt sich, daß die

Tabelle 7.5. Ergebnisse zu (7.1), (7.2) mit einer Haltonpunktfolge und quadratischem Spline als Gewichtsfunktion

N	64	256	1024	4096	16384
dof	192	768	3072	12288	49152
iter	131	237	337	564	1025
$\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}$	$1.318 \cdot 10^{-1}$	$4.002 \cdot 10^{-2}$	$1.119 \cdot 10^{-2}$	$3.004 \cdot 10^{-3}$	$7.797 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^1}$	$1.957 \cdot 10^{-2}$	$3.840 \cdot 10^{-3}$	$1.161 \cdot 10^{-3}$	$2.723 \cdot 10^{-4}$	$7.162 \cdot 10^{-5}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^2}$	$2.819 \cdot 10^{-2}$	$5.472 \cdot 10^{-3}$	$1.629 \cdot 10^{-3}$	$3.833 \cdot 10^{-4}$	$9.439 \cdot 10^{-5}$
$\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}$	$9.826 \cdot 10^{-1}$	$4.056 \cdot 10^{-1}$	$2.223 \cdot 10^{-1}$	$1.044 \cdot 10^{-1}$	$5.230 \cdot 10^{-2}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{L^2}}{\ u\ _{L^2}}$	$5.241 \cdot 10^{-2}$	$1.018 \cdot 10^{-2}$	$3.029 \cdot 10^{-3}$	$7.127 \cdot 10^{-4}$	$1.755 \cdot 10^{-4}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}}{\ u\ _{H_0^1}}$	$2.540 \cdot 10^{-1}$	$1.048 \cdot 10^{-1}$	$5.745 \cdot 10^{-2}$	$2.699 \cdot 10^{-2}$	$1.352 \cdot 10^{-2}$

Es wurden lineare Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 5 Gauß-knoten pro Zelle durchgeführt. Für die Supports wurde als Streckungsfaktor $\alpha = 1.5$ verwendet.

Größenordnungen der Fehler, der Durchmesser der Ω_i sowie die Konditionen der Steifigkeitsmatrizen vergleichbar sind. Diese Beobachtungen sind auf die Diskrepanz und die Gleichverteilung der Haltonpunktfolge zurückzuführen.

Als nächstes wollen wir die Helmholtz-Gleichung mit Dirichlet-Randwerten lösen.

$$-\Delta u + u = f \quad \text{auf } \Omega = (0, 1) \times (0, 1) \quad (7.7)$$

$$u = g \quad \text{auf } \Gamma := \partial\Omega \quad (7.8)$$

Wobei f und g so gewählt sind, daß für die exakte Lösung

$$u(x, y) = \arctan\left(\alpha\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}} - \xi\right)(x-x^2)(y-y^2)\right)$$

mit $\alpha = 100$ und $\xi = 0.8$ gilt. Als Partikelverteilung dient die oben dargestellte äquidistante Punktfolge mit $\alpha = 0.75$ für die inneren und $\alpha = 2.0$ für die randnahen Partikel. Als Gewichtsfunktionen werden Tensorprodukte quadratischer Splines eingesetzt, so daß eine Partition der Eins mit $\varphi_i \in \mathcal{C}^1$ bei diesem Experiment entsteht. Lokal verwenden wir erneut lineare Funktionen. Der Spuroperator wird bezüglich einer groben Partikelverteilung mit doppelter Maschenweite berechnet. Wie oben bereits erwähnt ist allerdings noch zu untersuchen, wie der Spuroperator optimal konstruiert werden sollte. Da die Dirichlet-Aufgabe zu einer Sattelpunktformulierung führt, müssen wir auch einen Löser für indefinite Gleichungssysteme verwenden. Wir haben die CG-Variante des Uzawa-Algorithmus verwendet, d.h. es kam eine dem CG-Verfahren äquivalente Iteration auf dem Schurkomplement zum Einsatz. Als internen Löser für die notwendige Invertierung der Steifigkeitsmatrix haben wir wiederum das oben erwähnte PCG-Verfahren mit Jacobi-Vorkonditionierer verwendet. Als Abbruchkriterien wurden für die PCG-Iteration $\|r_A\| < 10^{-14}$ und für die Uzawa-Iteration $\|r\| < 10^{-5}$ gewählt. Das Konvergenzverhalten der Uzawa-Iteration war in den ersten

Tabelle 7.6. Ergebnisse zu (7.1),(7.2) mit einer Haltonpunktfolge und kubischem Spline als Gewichtsfunktion

N	64	256	1024	4096
dof	192	768	3072	12288
$iter$	104	218	422	648
$\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}$	$1.541 \cdot 10^{-1}$	$5.014 \cdot 10^{-2}$	$1.666 \cdot 10^{-2}$	$3.742 \cdot 10^{-3}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^1}$	$2.672 \cdot 10^{-2}$	$5.793 \cdot 10^{-3}$	$1.702 \cdot 10^{-3}$	$3.831 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^2}$	$3.648 \cdot 10^{-2}$	$7.989 \cdot 10^{-3}$	$2.305 \cdot 10^{-3}$	$5.309 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}$	$1.161 \cdot 10^0$	$5.282 \cdot 10^{-1}$	$2.762 \cdot 10^{-1}$	$1.348 \cdot 10^{-1}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{L^2}}{\ u\ _{L^2}}$	$6.783 \cdot 10^{-1}$	$1.485 \cdot 10^{-2}$	$4.285 \cdot 10^{-3}$	$9.871 \cdot 10^{-4}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}}{\ u\ _{H_0^1}}$	$2.999 \cdot 10^{-1}$	$1.365 \cdot 10^{-1}$	$7.132 \cdot 10^{-2}$	$3.483 \cdot 10^{-2}$

Es wurden lineare Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 16 Gauß-knoten pro Zelle durchgeführt. Für die Supports wurde als Streckungsfaktor $\alpha = 1.5$ verwendet. Aufgrund des Einsatzes einer Quadraturformel hoher Ordnung auf den Zellen des Spline-Gitters, war der Aufwand bei diesem Experiment sehr groß, daher wurden nur 4 Level berechnet.

Iterationen sehr gut, doch stagnierte dieses Verhalten bei Erreichen von $\|r\| \sim 10^{-4}$. Bei der von uns gewählten Randapproximation kann die auf dem Rand bestimmte PU bereits die linearen Funktionen auf dem Rand reproduzieren, so daß durch die Erweiterung mit linearen Funktionen auf dem Rand stückweise quadratische Funktionen eingesetzt werden. Ob und inwieweit diese höhere Ordnung auf dem Rand die gewählte gröbere Auflösung auf dem Rand zerstört, müssen weitere Experimente zeigen. Die Stagnation des Konvergenzverhaltens der Iteration spricht jedoch dafür, daß eine höhere p -Ordnung auf dem Rand den Effekt der gröbere h -Auflösung erheblich reduziert. Aufgrund des Ansatzes mit linearen lokalen Räumen, ist in der L^2 -Norm eine quadratische Konvergenz zu erwarten. In Tabellen 7.9 und 7.10 sind die Ergebnisse dieser Untersuchung festgehalten. Die Einträge der Zeile lm in Tabelle 7.9 bezeichnen die Anzahl der verwendeten Lagrange Multiplikatoren. Die beobachteten Konvergenzordnungen entsprechen den erwarteten, wobei sie etwas besser sind als die Konvergenzordnungen des Neumann-Problems. Dies läßt sich wiederum auf die Tatsache zurückführen, daß der Fehler beim Neumann-Problem am Rand am größten ist. Beim Dirichlet-Problem wird mit dem Spuroperator der Randwert erzwungen, daher wird der Fehler in der Nähe des Randes durch den Spuroperator gedämpft. Dieser Effekt und die ungerade Potenzreihenentwicklung der Lösung liefern auch eine Erklärung für den Gewinn einer Ordnung in der L^∞ -Norm beim Übergang von 4096 auf 16384 Partikel. Ein ähnlich sprunghaftes Verhalten läßt sich auch beim Graphen zur L^∞ -Norm in Abbildung 7.13 beobachten. Wie bei den obigen Experimenten sind die Steigungen aller Graphen im ersten Verfeinerungsschritt am geringsten, doch ist in der L^∞ -Norm hier eine wesentlich geringere Fehlerreduktion, als oben zu beobachten. In den anderen Normen ist dies nicht der Fall, wir erhalten ein ähnlich konstantes Verhalten wie oben. Bei der L^∞ -Norm ist die Fehlerreduktion in den nächsten beiden Verfeinerungsschritten äh-

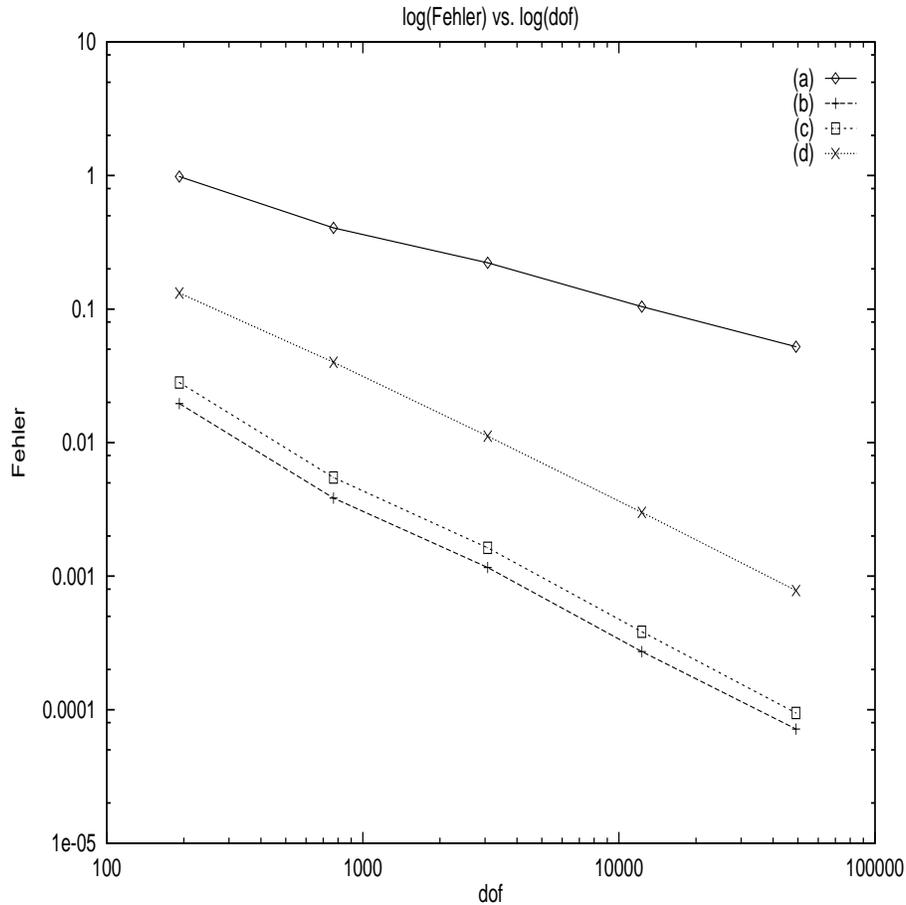


Abbildung 7.8. Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade

lich wie oben, doch können wir beim Übergang zum feinsten Diskretisierungslevel - wie bei den Konvergenzordnungen β_{L^∞} - den Gewinn einer ganzen Ordnung verzeichnen. Betrachten wir die Iterationszahlen des Uzawa-Algorithmus, stellen wir fest, daß auf dem feinsten Level wesentlich weniger Iterationen zum Lösen notwendig waren. Dies spricht dafür, daß die Überlappungen der lokalen Funktionen zu randnahen Partikeln in das Innere weniger relevant für die Konstruktion einer Approximierenden als bei größeren Auflösungen waren. Daher wurden die lokalen Funktionen zu randnahen Partikeln nur in Abhängigkeit von den Randdaten bestimmt. In der Nähe des Randes ist die Lösung mit linearen Funktionen gut approximierbar, so daß der Gewinn einer Ordnung auf die veränderte Situation in der Nähe des Randes zurückgeführt werden kann. Für die in Abbildung 7.13 dargestellten Graphen erhalten wir die Steigungen γ :

Norm	γ^{avg}	γ^{max}	γ^{min}
L^∞	-0.912	-1.868	-0.200
L^1	-1.088	-1.223	-0.840
L^2	-1.065	-1.226	-0.772
H_0^1	-0.546	-0.624	-0.392

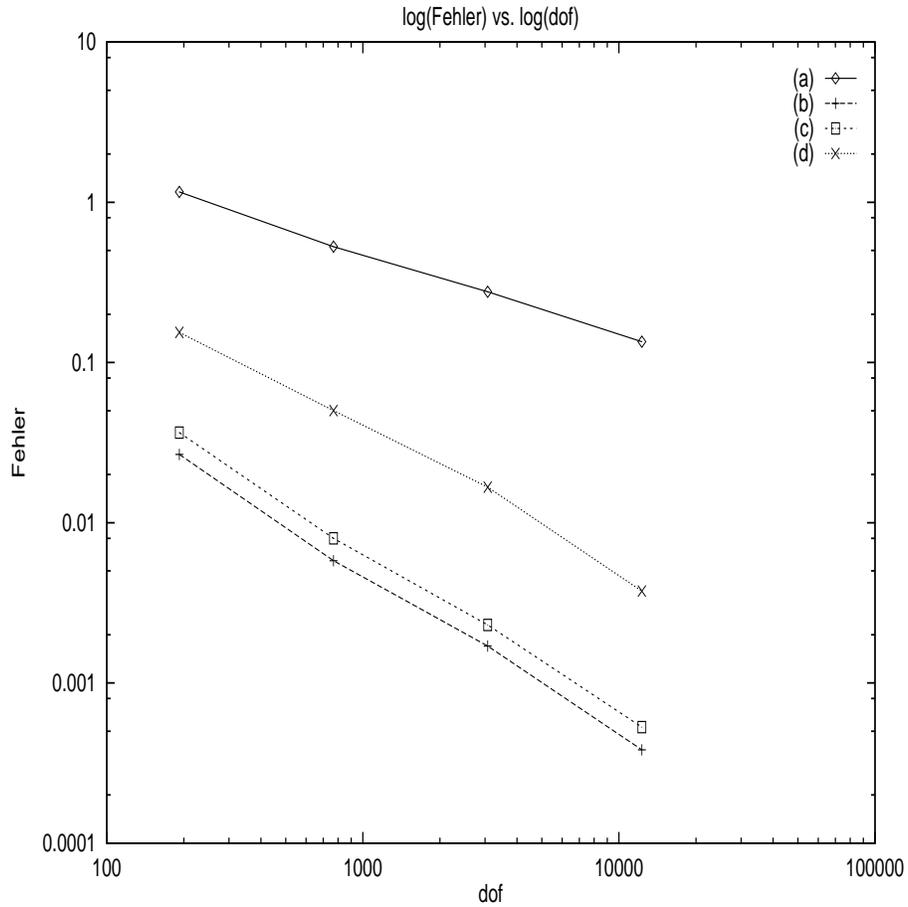


Abbildung 7.9. Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade

7.1.2 p-Version

Die obigen Untersuchungen haben nur die h -Version des Verfahrens behandelt. Betrachten wir jetzt die p -Version des Verfahrens. Dazu wählen wir eine Haltonpunktfolge mit 256 Punkten und erhöhen die Polynomgrade der lokalen Approximationsräume. Als Basis für die Polynomräume verwenden wir in unserem Experiment Produkte aus 1-D *Legendre Polynomen* \mathcal{L}_k . Die PU wird mit linearen Gewichten auf mit $\alpha = 1.5$ gestreckten Ω_i bestimmt. Aus Tabelle 7.11 wird deutlich, wie mächtig die p -Version des Verfahrens ist. Wir erkennen, daß bereits mit einer sehr geringen Anzahl von Freiheitsgraden - dof = 1536 - der relative Fehler in der H^1 Seminorm auf 1% reduziert wurde, für einen solchen relativen Fehler sind mit der h -Version bei einem linearen Ansatz nach obigen Ergebnissen circa 50000 Freiheitsgrade nötig. Betrachten wir Lösungen $u \in \mathcal{C}^\infty$, so können wir die lokalen Fehler durch das Restglied des entsprechenden Taylorpolynoms abschätzen. Damit erhalten wir eine Abschätzung für den Fehler

$$\|u - u_p\| \leq \|D^{p+1}\| \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}.$$

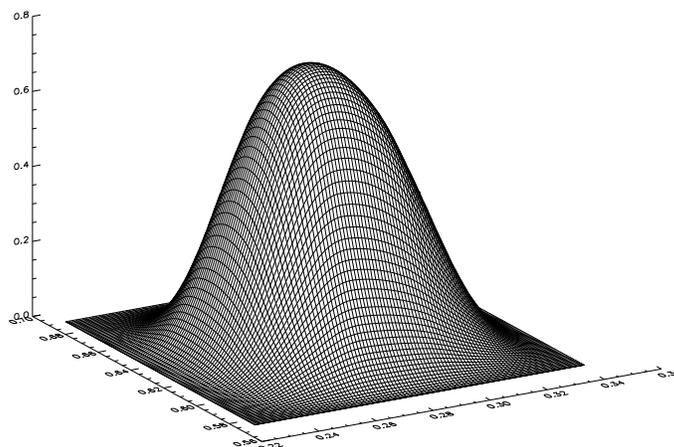


Abbildung 7.10. Die Funktion φ_i der Partition der Eins eines inneren Partikels x_i . Zur Konstruktion der Partition der Eins wurden quadratische Gewichte und eine Haltonpunktfolge mit 256 Punkten verwendet.

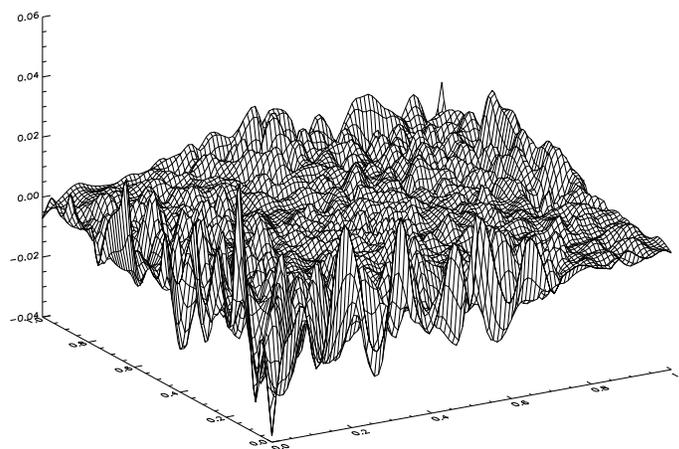
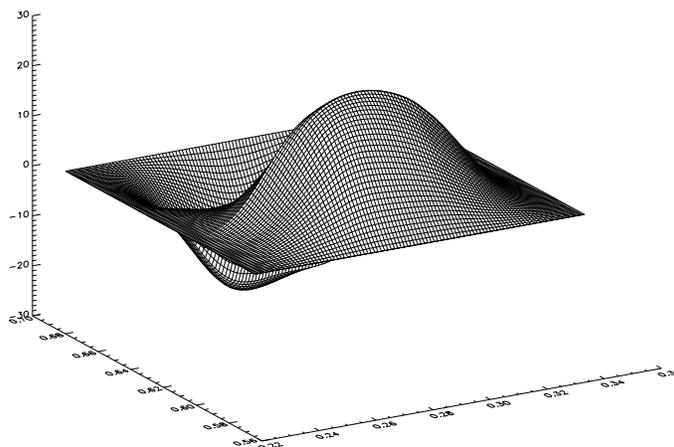


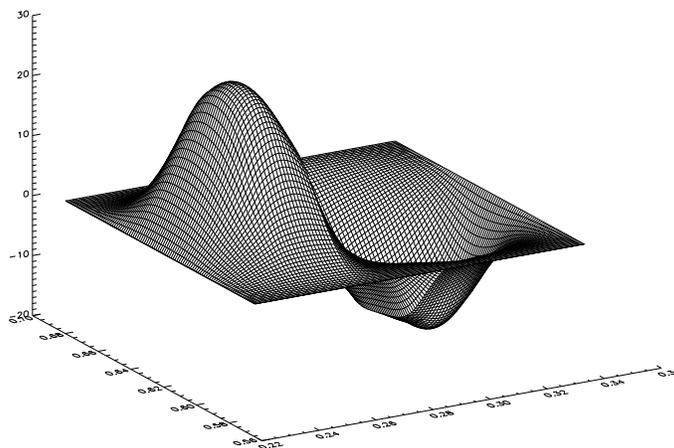
Abbildung 7.11. Fehler $u - u_h$ für die Approximierende u_h bezüglich einer Haltonpunktfolge mit 256 Punkten

Es tritt also die Norm einer vom Level der Verfeinerung abhängigen Ableitung auf, daher bleiben diese unterschiedlichen Ableitungen in den Quotienten der Fehler erhalten.

$$\frac{\|u - u_p\|}{\|u - u_{p+1}\|} \sim \frac{\|D^{p+1}\|}{\|D^{p+2}\|} \frac{p+2}{h}$$



(a) $\frac{\partial \varphi_i}{\partial x}$ zum quadratischen Spline



(b) $\frac{\partial \varphi_i}{\partial y}$ zum quadratischen Spline

Abbildung 7.12. Die Ableitungen der Funktion φ_i eines inneren Partikels x_i zu einer Haltonpunktfolge mit 256 Punkten und quadratischen Gewichten.

Die Ableitungen der Lösung

$$u(x, y) = \arctan\left(\alpha\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}} - \xi\right)(x-x^2)(y-y^2)\right)$$

Tabelle 7.7. Konvergenzordnungen zu Tabelle 7.5

N	64	256	1024	4096	16384
h^{max}	$2.317 \cdot 10^{-1}$	$1.277 \cdot 10^{-1}$	$5.379 \cdot 10^{-2}$	$3.135 \cdot 10^{-2}$	$1.597 \cdot 10^{-2}$
h^{min}	$1.071 \cdot 10^{-1}$	$4.098 \cdot 10^{-2}$	$2.234 \cdot 10^{-2}$	$1.124 \cdot 10^{-2}$	$4.436 \cdot 10^{-3}$
h^{avg}	$1.466 \cdot 10^{-1}$	$7.446 \cdot 10^{-2}$	$3.608 \cdot 10^{-2}$	$1.815 \cdot 10^{-2}$	$9.134 \cdot 10^{-3}$
$\frac{h_{l-1}^{max}}{h_l^{max}}$	***	1.814	2.375	1.716	1.964
$\frac{h_{l-1}^{min}}{h_l^{min}}$	***	2.614	1.835	1.988	2.533
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^\infty}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}}$	***	3.294	3.577	3.725	3.823
β_{L^∞}	***	1.241	2.100	1.907	1.443
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^1}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^1}}$	***	5.095	3.307	4.263	3.803
β_{L^1}	***	1.695	1.971	2.111	1.437
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^2}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^2}}$	***	5.150	3.359	4.251	4.061
β_{L^2}	***	1.706	1.996	2.107	1.508
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{H_0^1}}{\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}}$	***	2.422	1.825	2.129	1.996
$\beta_{H_0^1}$	***	0.921	0.991	1.100	0.744

variieren stark, so daß die in Tabelle 7.12 angegebenen Quotienten von dem Quotienten der Normen der Ableitungen dominiert werden. Um diese Dominanz der unterschiedlichen Ableitungen zu umgehen, haben wir im folgenden f und g zu Problem (7.1), (7.2) so gewählt, daß sich

$$u(x, y) = e^{4(x+y)}$$

als Lösung ergibt. Die Normen der Fehler sind in Tabelle 7.13 festgehalten. Die Ableitungen dieser Lösung unterscheiden sich nur durch einen konstanten Faktor, so daß die Fehlerquotienten nicht durch die Ableitungen dominiert werden sollten. Wir erwarten daher für die Quotienten der Fehler

$$\frac{\|u - u_p\|}{\|u - u_{p+1}\|} \sim \frac{p+2}{h}.$$

Die in Tabelle 7.14 festgehaltenen Quotienten spiegelt dieses Verhalten auch annähernd wider. Für die in Abbildung 7.18 dargestellten Graphen bedeutet diese p -Abhängigkeit der Quotienten, daß die Steigungen für wachsendes p größer werden müssen. Dies läßt sich auch für alle Normen mit der gleichen Zuwachsrate beobachten. Die Graphen zu obigem Beispiel sind in Abbildung 7.17 dargestellt. Da bei der p -Version des Verfahrens ein direkter Zusammenhang zwischen der Anzahl der Freiheitsgrade und der Approximationsgüte besteht, können wir hier zumindest eine konstante

Tabelle 7.8. Konvergenzordnungen zu Tabelle 7.6

N	64	256	1024	4096
h^{max}	$2.341 \cdot 10^{-1}$	$1.260 \cdot 10^{-1}$	$5.217 \cdot 10^{-2}$	$3.095 \cdot 10^{-2}$
h^{min}	$1.135 \cdot 10^{-1}$	$4.320 \cdot 10^{-2}$	$2.449 \cdot 10^{-2}$	$1.097 \cdot 10^{-2}$
h^{avg}	$1.468 \cdot 10^{-1}$	$7.518 \cdot 10^{-2}$	$3.649 \cdot 10^{-2}$	$1.841 \cdot 10^{-2}$
$\frac{h_{l-1}^{max}}{h_l^{max}}$	***	1.858	2.415	1.686
$\frac{h_{l-1}^{min}}{h_l^{min}}$	***	2.627	1.764	2.233
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^\infty}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}}$	***	3.082	3.010	4.452
β_{L^∞}	***	1.165	1.936	1.859
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^1}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^1}}$	***	4.612	3.403	4.443
β_{L^1}	***	1.529	2.158	1.856
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{L^2}}{\ u - u_{h_l}\ _{L^2}}$	***	4.567	3.467	4.317
β_{L^2}	***	1.573	2.190	1.820
$\frac{\ u - u_{h_{l-1}}\ _{H_0^1}}{\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}}$	***	2.198	1.913	2.049
$\beta_{H_0^1}$	***	0.712	1.143	0.893

Fehlerreduktionsrate in der L^1 -, L^2 sowie der H_0^1 -Norm beobachten. In der L^∞ -Norm ergeben sich Schwankungen der Steigungen. Diese lassen sich auf die ungerade Potenzreihenentwicklung der Lösung zurückführen, denn die Steigungen bei geraden Potenzen sind annähernd konstant, wie die bei $p = 1$ und $p = 3$. Im letzten Verfeinerungsschritt stellen wir jedoch in jeder Norm eine Verbesserung der Steigungen um circa 1.45 fest, die wir nicht erklären können. Es ist möglich, daß dies wiederum mit der Potenzreihenentwicklung der Lösung erklärt werden kann.

7.2 Der Laplace-Operator

Nachdem wir mit dem Verfahren die auf H^1 koerzive Bilinearform

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \nabla v + \int_{\Omega} uv$$

diskretisiert und das Konvergenzverhalten bei glatten Lösungen untersucht haben, wollen wir nun das Dirichlet-Problem mit dem Laplace-Operator

$$-\Delta u = 0 \quad \text{auf } \Omega = (0, 1) \times (-0.5, 0.5) \quad (7.9)$$

$$u = g \quad \text{auf } \partial\Omega \quad (7.10)$$

Tabelle 7.9. Ergebnisse zu (7.7), (7.8) mit einer äquidistanten Punktfolge und quadratischem Spline

N	64	256	1024	4096	16384
dof	192	768	3072	12288	49152
lm	24	56	120	248	504
$PCG - iter$	67	130	285	588	1197
$UCG - iter$	22	85	164	241	96
$\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}$	$3.288 \cdot 10^{-1}$	$2.492 \cdot 10^{-1}$	$9.847 \cdot 10^{-2}$	$2.787 \cdot 10^{-2}$	$2.084 \cdot 10^{-3}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^1}$	$8.665 \cdot 10^{-2}$	$2.705 \cdot 10^{-2}$	$5.814 \cdot 10^{-3}$	$1.068 \cdot 10^{-3}$	$2.086 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^2}$	$1.134 \cdot 10^{-1}$	$3.888 \cdot 10^{-2}$	$9.018 \cdot 10^{-3}$	$1.695 \cdot 10^{-3}$	$3.098 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}$	$2.021 \cdot 10^0$	$1.173 \cdot 10^0$	$5.468 \cdot 10^{-1}$	$2.298 \cdot 10^{-1}$	$9.749 \cdot 10^{-2}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{L^2}}{\ u\ _{L^2}}$	$2.109 \cdot 10^{-1}$	$7.230 \cdot 10^{-2}$	$1.677 \cdot 10^{-2}$	$3.152 \cdot 10^{-3}$	$5.760 \cdot 10^{-4}$
$\frac{\ u - u_{h_l}\ _{H_0^1}}{\ u\ _{H_0^1}}$	$5.222 \cdot 10^{-1}$	$3.031 \cdot 10^{-1}$	$1.413 \cdot 10^{-1}$	$5.940 \cdot 10^{-2}$	$2.520 \cdot 10^{-2}$

Es wurden lineare Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 10 Gaußknoten pro Zelle durchgeführt. Als Streckungsfaktor α wurde für die inneren Partikel $\alpha = 0.75$ und für die randnahen Partikel $x_i \in R^h$ $\alpha = 2.0$ verwendet.

behandeln. Zur Diskretisierung verwenden wir die in Abschnitt 4.1.1 dargestellte Bilinearform

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \nabla v + \int_{\partial\Omega} \text{Tr}(u) \text{Tr}(v).$$

Dadurch erhalten wir eine positive definite Steifigkeitsmatrix. In Folge dessen wir zur Behandlung des entstehenden Sattelpunktproblems den Uzawa-Algorithmus verwenden können.

7.2.1 Singuläre Lösungen

Wir wählen g so, daß

$$u(x, y) = u(z) = \text{Re}(z^{1/2}) = (x^2 + y^2)^{1/4} \cos\left(\frac{\arctan(\frac{x}{y})}{2}\right)$$

Lösung des Dirichlet-Problems ist. Die Lösung besitzt demnach eine Singularität in $(0, 0)$, so daß wir bei der Behandlung dieses Problems nur noch geringere Konvergenzordnungen erwarten können. Beginnen wollen wir diese Untersuchung mit dem PUM-Raum zu einer äquidistanten Punktverteilung. Zur Diskretisierung des Spurooperators verwenden wir die Projektion der randnahen Partikel als Punktfolge auf dem Rand. Um die gröbere Auflösung auf dem Rand zu erreichen, werden als lokale Räume im Inneren die linearen Funktionen und auf dem Rand nur die Konstante eingesetzt.

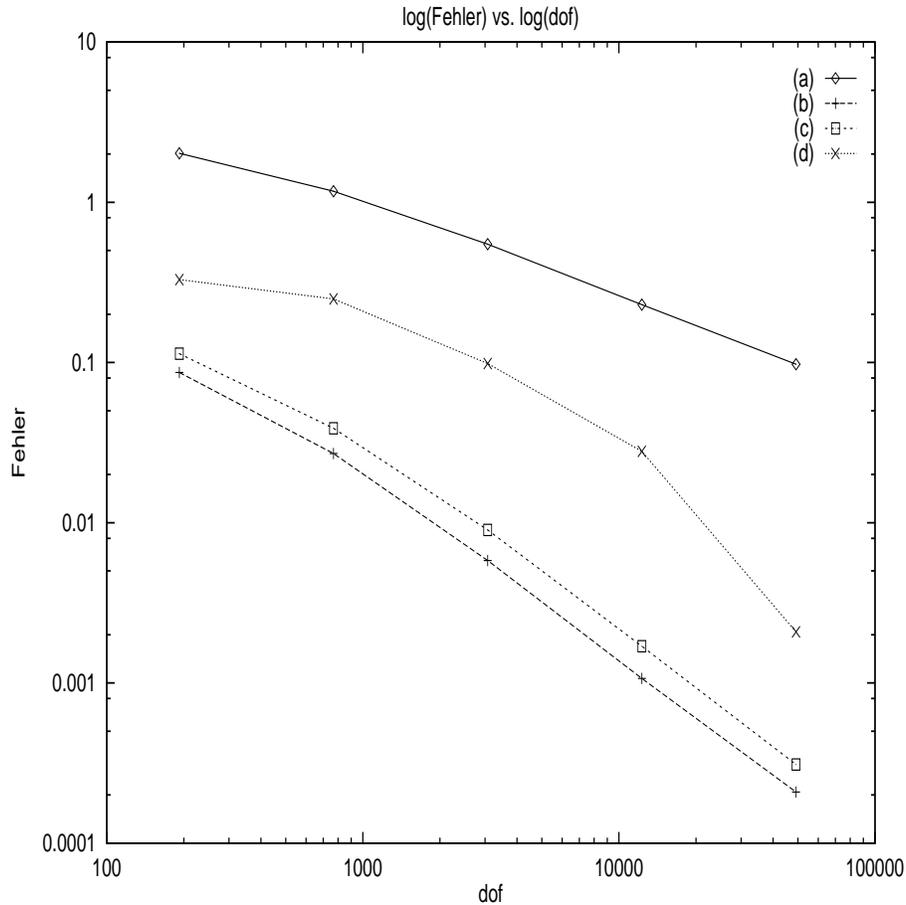


Abbildung 7.13. Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade

Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.15 festgehalten. Die Partikelverteilung ist der Singularität nicht angepaßt. Dementsprechend schlecht sind die Ergebnisse. Wir wollen die Partikelverteilung nun der Singularität anpassen, um so mit derselben Anzahl von Freiheitsgraden ein besseres Konvergenzverhalten zu erzeugen. Dazu wählen wir die *Gradierungsfunktion* Φ

$$\Phi(x, y) = \begin{cases} (x^2, 2y^2) & : y > 0 \\ (x^2, -2y^2) & : y < 0 \end{cases} .$$

Diese Gradierungsfunktion wenden wir sowohl im Inneren als auch auf dem Rand an. Als lokale Räume werden lineare Funktionen im Inneren und die Konstante auf dem Rand zur Realisierung der größeren Auflösung beibehalten. Zum Vergleich der in Tabelle 7.16 festgehaltenen Ergebnisse mit denen bei der äquidistanten Verteilung, haben wir in Abbildung 7.19 die jeweiligen Fehler gegen die Anzahl der Freiheitsgrade aufgetragen. Dabei wird deutlich, daß die Konvergenz in der L^1 - sowie der L^2 -Norm durch die Gradierung der Punktfolge wesentlich verbessert wurde. Für die L^∞ -Norm läßt sich dies nur in geringerem Ausmaß feststellen. Betrachten wir dazu die Steigungen der Graphen. Für die äquidistante Punktfolge erhalten wir in den drei Verfeinerungsschritten:

Tabelle 7.10. Konvergenzordnungen zu Tabelle 7.9

N	64	256	1024	4096	16384
h^{max}	$2.222 \cdot 10^{-1}$	$1.177 \cdot 10^{-1}$	$6.061 \cdot 10^{-2}$	$3.077 \cdot 10^{-2}$	$1.550 \cdot 10^{-2}$
h^{min}	$8.333 \cdot 10^{-2}$	$4.412 \cdot 10^{-2}$	$2.272 \cdot 10^{-2}$	$1.154 \cdot 10^{-2}$	$5.814 \cdot 10^{-3}$
h^{avg}	$1.181 \cdot 10^{-1}$	$5.331 \cdot 10^{-2}$	$2.510 \cdot 10^{-2}$	$1.214 \cdot 10^{-2}$	$5.965 \cdot 10^{-3}$
$\frac{h_{l-1}^{max}}{h_l^{max}}$	***	1.888	1.942	1.967	1.985
$\frac{h_{l-1}^{min}}{h_l^{min}}$	***	1.889	1.942	1.969	1.985
$\frac{\ u-u_{h_{l-1}}\ _{L^\infty}}{\ u-u_{h_l}\ _{L^\infty}}$	***	1.320	2.530	3.533	13.342
β_{L^∞}	***	0.436	1.399	1.863	3.779
$\frac{\ u-u_{h_{l-1}}\ _{L^1}}{\ u-u_{h_l}\ _{L^1}}$	***	3.203	4.653	5.448	5.119
β_{L^1}	***	1.830	2.317	2.501	2.382
$\frac{\ u-u_{h_{l-1}}\ _{L^2}}{\ u-u_{h_l}\ _{L^2}}$	***	2.917	4.312	5.319	5.473
β_{L^2}	***	1.683	2.202	2.467	2.479
$\frac{\ u-u_{h_{l-1}}\ _{H_0^1}}{\ u-u_{h_l}\ _{H_0^1}}$	***	1.723	2.145	2.379	2.357
$\beta_{H_0^1}$	***	0.856	1.149	1.279	1.251

Norm	γ_1	γ_2	γ_3
L^∞	-0.292	-0.390	-0.265
L^1	-0.405	-0.564	-0.440
L^2	-0.460	-0.316	-0.135

Wohingegen sich bei der gradierten Punktfolge die Steigungen:

Norm	γ_1	γ_2	γ_3
L^∞	-0.303	-0.409	-0.513
L^1	-0.942	-0.994	-0.866
L^2	-0.868	-0.873	-0.787

ergeben. Durch die Abbildung 7.20 dargestellten Fehler bei der gradierten Punktfolge, können wir erkennen, daß der Fehler in der L^∞ -Norm in der Singularität liegt. Da wir bei der Konstruktion einer Überdeckung zu der gradierten Punktfolge - aufgrund der erheblichen Unterschiede bei den Abständen zwischen den Punkten - Probleme mit der Wahl des von unserem Algorithmus benötigten feinen Referenzgitters hatten, ist es nicht auszuschließen, daß bei der Verwendung einer "feineren" Überdeckung das Verhalten der Lösung auf dem Rand verbessert werden kann. Die Wahl einer anderen (der optimalen) Gradierungsfunktion kann die Anpassung der Partikelverteilung an

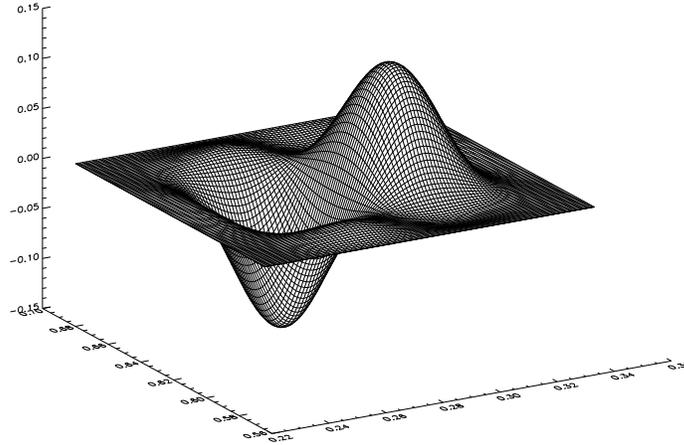


Abbildung 7.14. Die Basisfunktion $\varphi_i \psi_k^i(x, y) = \varphi_i(x, y) \mathcal{L}_2^i(x) \mathcal{L}_3^i(y)$

Tabelle 7.11. Ergebnisse zu (7.1), (7.2) mit einer Haltonpunktfolge von 256 Punkten und linearem Spline als Gewichtsfunktion

p	1	2	3	4	5
dof	768	1536	2560	3840	5376
iter	118	269	834	3338	13752
$\ u - u_p\ _{L^\infty}$	$4.572 \cdot 10^{-2}$	$6.341 \cdot 10^{-3}$	$9.812 \cdot 10^{-4}$	$3.603 \cdot 10^{-4}$	$5.805 \cdot 10^{-5}$
$\ u - u_p\ _{L^1}$	$3.581 \cdot 10^{-3}$	$2.496 \cdot 10^{-4}$	$3.650 \cdot 10^{-5}$	$8.140 \cdot 10^{-6}$	$1.462 \cdot 10^{-6}$
$\ u - u_p\ _{L^2}$	$5.014 \cdot 10^{-3}$	$3.861 \cdot 10^{-4}$	$6.741 \cdot 10^{-5}$	$1.639 \cdot 10^{-5}$	$2.831 \cdot 10^{-6}$
$\ u - u_p\ _{H_0^1}$	$4.073 \cdot 10^{-1}$	$5.079 \cdot 10^{-2}$	$1.078 \cdot 10^{-2}$	$3.127 \cdot 10^{-3}$	$6.751 \cdot 10^{-4}$
$\frac{\ u - u_p\ _{L^2}}{\ u\ _{L^2}}$	$9.322 \cdot 10^{-3}$	$7.179 \cdot 10^{-4}$	$1.253 \cdot 10^{-4}$	$3.048 \cdot 10^{-5}$	$5.264 \cdot 10^{-6}$
$\frac{\ u - u_p\ _{H_0^1}}{\ u\ _{H_0^1}}$	$1.053 \cdot 10^{-1}$	$1.313 \cdot 10^{-2}$	$2.785 \cdot 10^{-3}$	$8.083 \cdot 10^{-4}$	$1.745 \cdot 10^{-4}$

Es wurden vollständige Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 5 Gaußknoten pro Zelle durchgeführt. Für die Supports wurde als Streckungsfaktor $\alpha = 1.5$ verwendet.

die Singularität und damit das Konvergenzverhalten des Verfahrens weiter verbessern. Das Experiment zeigt, daß mit einer angepaßten Partikelverteilung die optimale Konvergenzrate des Verfahrens auch bei der Untersuchung von Singularitäten erreicht werden kann, d.h. man kann durch die Anpassung der Punktverteilung an die Singularität diese vollständig auflösen. Dementsprechend

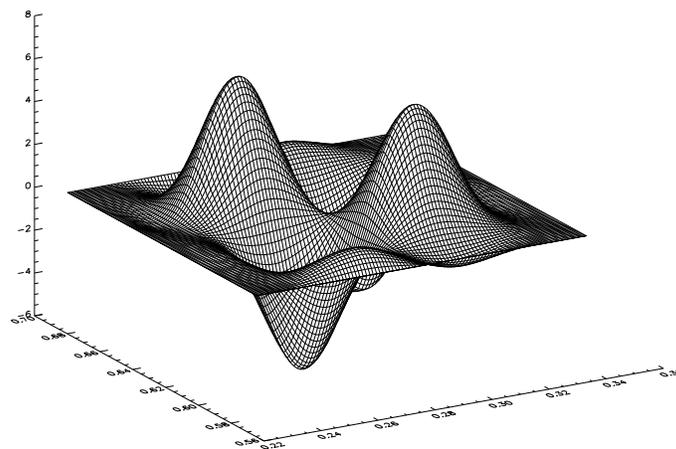
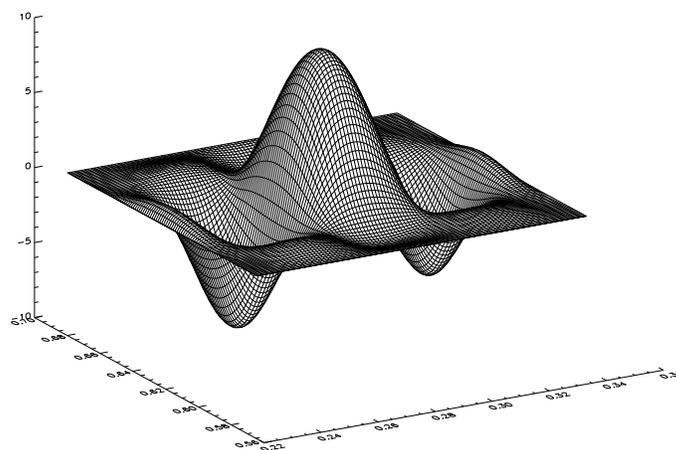
(a) $\frac{\partial \varphi_i \psi_k^i}{\partial x}$ (b) $\frac{\partial \varphi_i \psi_k^i}{\partial y}$

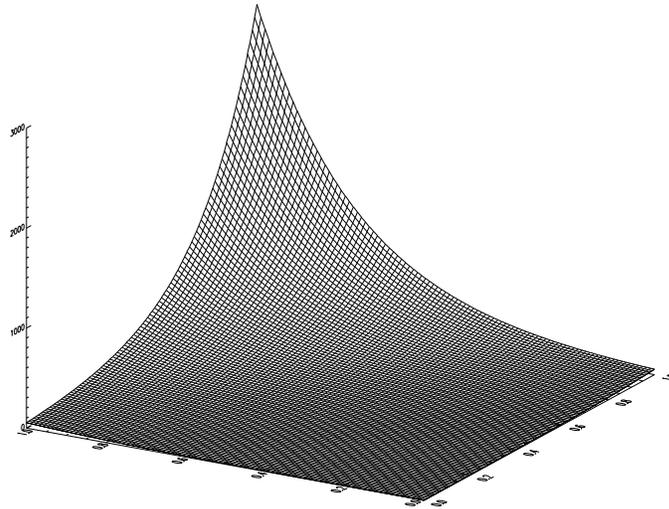
Abbildung 7.15. Ableitungen der Basisfunktion $\varphi_i \psi_k^i(x, y) = \varphi_i(x, y) \mathcal{L}_2^i(x) \mathcal{L}_3^i(y)$

sollten adäquate Fehlerschätzer für das Verfahren und ein effizienter Überdeckungsalgorithmus, der beliebige (nicht gleichverteilte) Punktfolgen auflösen kann, entwickelt werden.

Anhand der bei diesen Experimenten benötigten und der oben für die Dirichlet-Aufgabe festgehaltenen Iterationszahlen des Uzawa-Algorithmus, läßt sich festhalten, daß die p -Vergrößerung auf dem Rand eine bessere Konvergenz des Algorithmus als die reguläre h -Vergrößerung bewirkte.

Tabelle 7.12. Konvergenzordnungen zu Tabelle 7.11

p	1	2	3	4	5
h^{max}	$1.277 \cdot 10^{-1}$				
h^{min}	$4.098 \cdot 10^{-2}$				
h^{avg}	$7.446 \cdot 10^{-2}$				
$\frac{\ u - u_{p-1}\ _{L^\infty}}{\ u - u_p\ _{L^\infty}}$	***	7.209	6.463	2.723	6.206
$\frac{\ u - u_{p-1}\ _{L^1}}{\ u - u_p\ _{L^1}}$	***	14.349	6.837	4.484	5.569
$\frac{\ u - u_{p-1}\ _{L^2}}{\ u - u_p\ _{L^2}}$	***	12.986	5.728	4.113	5.790
$\frac{\ u - u_{p-1}\ _{H_0^1}}{\ u - u_p\ _{H_0^1}}$	***	8.019	4.714	3.445	4.632

Abbildung 7.16. Graph von $u(x, y) = e^{4(x+y)}$

7.3 Evolutionsgleichungen

Nachdem wir die Konvergenzeigenschaften des Verfahrens bei der Diskretisierung von elliptischen Differentialgleichungen zweiter Ordnung untersucht haben, wollen wir nun das Verfahren zur Diskretisierung von Evolutionsgleichungen einsetzen. In Abschnitt 6 wurden die Diskretisierungsschemata für Gleichungen erster und zweiter Ordnung vorgestellt, dabei haben wir die Unabhängigkeit der Partikel zur Behandlung in Lagrangescher Sicht ausgenutzt. Dadurch können mit dem Verfahren konvektive Transportprozesse *ohne numerische Diffusion* simuliert werden. In Folge dessen und aufgrund der einfachen Auflösung komplexer Geometrien durch die Partikelverteilung ist das

Tabelle 7.13. Ergebnisse zu (7.1), (7.2) mit einer Haltonpunktfolge von 256 Punkten und linearem Spline als Gewichtsfunktion

p	1	2	3	4	5
dof	768	1536	2560	3840	5376
iter	135	318	994	3893	15456
$\ u - u_p\ _{L^\infty}$	$6.292 \cdot 10^1$	$5.094 \cdot 10^0$	$3.423 \cdot 10^{-1}$	$1.837 \cdot 10^{-2}$	$9.130 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_p\ _{L^1}$	$7.743 \cdot 10^{-1}$	$4.062 \cdot 10^{-2}$	$1.899 \cdot 10^{-3}$	$8.134 \cdot 10^{-5}$	$6.802 \cdot 10^{-6}$
$\ u - u_p\ _{L^2}$	$1.761 \cdot 10^0$	$1.512 \cdot 10^{-1}$	$6.628 \cdot 10^{-3}$	$2.920 \cdot 10^{-4}$	$1.392 \cdot 10^{-5}$
$\ u - u_p\ _{H_0^1}$	$1.514 \cdot 10^2$	$1.507 \cdot 10^1$	$9.738 \cdot 10^{-1}$	$5.732 \cdot 10^{-2}$	$3.007 \cdot 10^{-3}$
$\frac{\ u - u_p\ _{L^2}}{\ u\ _{L^2}}$	$4.726 \cdot 10^{-3}$	$4.060 \cdot 10^{-4}$	$1.779 \cdot 10^{-5}$	$7.838 \cdot 10^{-7}$	$3.736 \cdot 10^{-8}$
$\frac{\ u - u_p\ _{H_0^1}}{\ u\ _{H_0^1}}$	$7.184 \cdot 10^{-2}$	$7.151 \cdot 10^{-3}$	$4.622 \cdot 10^{-4}$	$2.720 \cdot 10^{-5}$	$1.427 \cdot 10^{-6}$

Es wurden vollständige Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 5 Gaußknoten pro Zelle durchgeführt. Für die Supports wurde als Streckungsfaktor $\alpha = 1.5$ verwendet.

Verfahren speziell für die Diskretisierung von Problemen mit freien Rändern interessant.

Mit den folgenden Experimenten wollen wir das Potential des Verfahrens bei der Untersuchung von Evolutionsgleichungen demonstrieren.

7.3.1 Gleichungen erster Ordnung

Beginnen wir mit einer Gleichung erster Ordnung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \nabla u^n = 0.$$

Nach Abschnitt 6 erhalten wir das diskrete Schema

$$\begin{aligned} x^{n+1} &= x^n + v_x \delta t, \\ y^{n+1} &= y^n + v_y \delta t, \\ u^{n+1}(x, y) &= u^n(x - v_x \delta t, y - v_y \delta t). \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnen (x^n, y^n) die Partikelpositionen und u^n die Approximierende im n -ten Zeitschritt. Die Funktionen u^n sind dabei in der Basis des PUM-Raums zur Partikelverteilung im n -ten Zeitschritt dargestellt.

$$u^n(x, y) = \sum_i \varphi_i(x, y) \sum_k u_{ik}^n \psi_k^i(x, y)$$

Damit ist in jedem Zeitschritt die Partikelbewegung sowie die Konstruktion des PUM-Raums durchzuführen und das Problem mit der Massenmatrix zu lösen. Um die Berechnung zu beschleunigen

Tabelle 7.14. Quotienten zu Tabelle 7.13

p	1	2	3	4	5
h^{max}	$1.277 \cdot 10^{-1}$				
h^{min}	$4.098 \cdot 10^{-2}$				
h^{avg}	$7.446 \cdot 10^{-2}$				
$\frac{\ u - u_{p-1}\ _{L^\infty}}{\ u - u_p\ _{L^\infty}}$	*	12.351	14.884	18.628	20.125
$\frac{\ u - u_{p-1}\ _{L^1}}{\ u - u_p\ _{L^1}}$	*	19.064	21.391	23.345	11.958
$\frac{\ u - u_{p-1}\ _{L^2}}{\ u - u_p\ _{L^2}}$	*	11.640	22.818	22.703	20.978
$\frac{\ u - u_{p-1}\ _{H_0^1}}{\ u - u_p\ _{H_0^1}}$	*	10.047	15.472	16.988	19.066

Tabelle 7.15. Ergebnisse zu (7.9), (7.10) mit einer äquidistanten Punktfolge und linearem Spline

N	64	256	1024	4096
dof	192	768	3072	12288
lm	32	64	128	256
PCG – iter	120	240	500	1000
UCG – iter	26	34	42	50
$\ u - u_{h_l}\ _{L^\infty}$	$7.445 \cdot 10^{-2}$	$4.970 \cdot 10^{-2}$	$2.896 \cdot 10^{-2}$	$2.004 \cdot 10^{-2}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^1}$	$1.752 \cdot 10^{-3}$	$7.341 \cdot 10^{-4}$	$3.359 \cdot 10^{-4}$	$1.825 \cdot 10^{-4}$
$\ u - u_{h_l}\ _{L^2}$	$3.267 \cdot 10^{-3}$	$1.727 \cdot 10^{-3}$	$1.115 \cdot 10^{-3}$	$9.241 \cdot 10^{-4}$

Es wurden lineare Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 5 Gauß-knoten pro Zelle durchgeführt. Als Streckungsfaktor α wurde für die inneren Partikel $\alpha = 1.0$ und für die randnahen Partikel $x_i \in R^h$ $\alpha = 2.0$ verwendet.

nigen, führen wir die Transformation der Ortskoordinaten nur für die Partikel x_i^n aus, deren Überdeckungselemente Ω_i in diesem Zeitschritt einen nicht leeren Schnitt mit dem Support der Approximierenden u^n haben. Durch diesen Schritt lassen sich die Partikel außerhalb des Supports der Approximierenden so wählen, daß die Anzahl der Nachbarn eines Partikel über die Zeit annähernd konstant bleibt. Desweiteren ist die Behandlung von Partikeln, die durch die Transformation aus

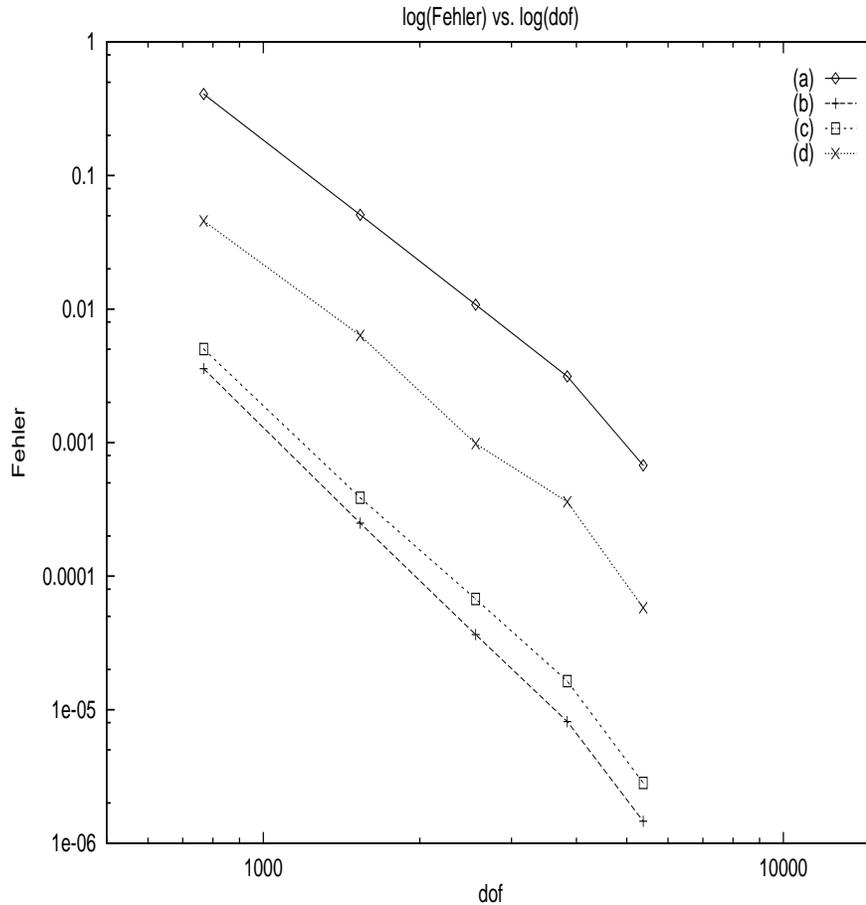


Abbildung 7.17. Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade

dem Gebiet transportiert werden, dadurch erleichtert. Betrachten wir ein Beispiel. Wir wählen dazu einen Startwert u_0 mit $\text{supp}(u_0) \subset \hat{\Omega} \subset \Omega$ und eine Startpartikelverteilung, die eine gute Auflösung in $\hat{\Omega}$ gewährleistet. Darüberhinaus setzen wir die Partikel so, daß die Partikel $x_i \in \hat{\Omega}$ möglichst wenig Nachbarn $x_j \in \Omega \setminus \hat{\Omega}$ besitzen. Wenden wir die Transformation auf die Partikel $x_i \in \hat{\Omega}$ an, erhalten wir die gute lokale Verteilung der Freiheitsgrade über die Zeit. Um auch die gute Auflösung über die Zeit zu erhalten, sind die Supports Ω_i zu diesen Partikeln so zu bestimmen, daß diese “nur” Nachbarn $x_j \in \hat{\Omega}$ haben. Daher bestimmen wir die Partikel $x_j \in \Omega \setminus \hat{\Omega}$ nicht durch die Transformation, sondern wiederum so, daß die transformierten Partikel möglichst wenig Nachbarn x_j außerhalb des transformierten $\hat{\Omega}$ besitzen. Auf diese Weise verfahren wir in jedem weiteren Zeitschritt n . Die Bestimmung von $\hat{\Omega}^n$ in jedem Zeitschritt n läßt sich durch eine Betrachtung der Koeffizienten u_{ik}^n der Approximierenden u^n durchführen. Man wählt dazu eine Umgebung der Vereinigungen der Supports Ω_i , deren lokalen Funktionen $v_i^h \neq 0$ erfüllen.

$$\hat{\Omega}^n := \mathcal{U} \left(\bigcup_{v_i^h \neq 0} \Omega_i \right)$$

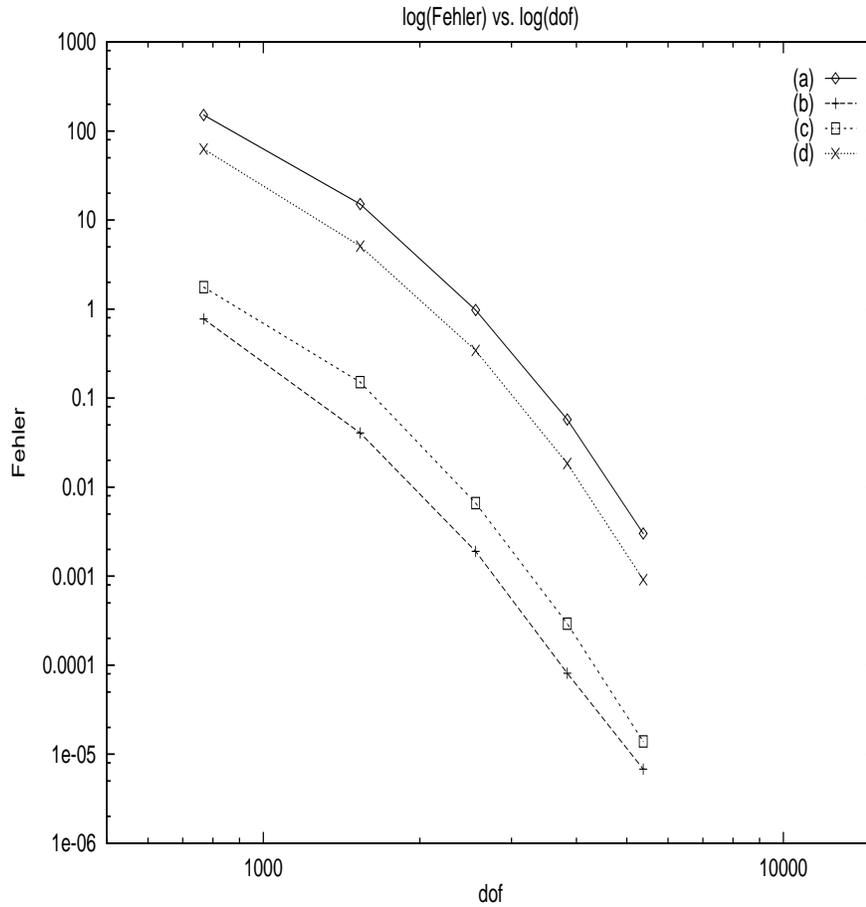


Abbildung 7.18. Fehler $u - u_h$ in H_0^1 -Norm (a), L^1 -Norm (b), L^2 -Norm (c) und L^∞ -Norm (d) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade

Die Betrachtung einer Umgebung des Supports der Approximierenden im vorangegangenen Zeitschritt dient einerseits zur Vereinfachung des Algorithmus, andererseits trägt die Wahl einer Umgebung den Überlappungen der Ω_k Rechnung. Es soll durch die Wahl einer Umgebung gewährleistet sein, daß die Ω_i der Partikel im Inneren des Supports diesen bereits überdecken und nur Nachbarn $x_j \in \hat{\Omega}$ haben. Dadurch wird der Rand des Supports gut aufgelöst, und es treten nur geringe Schwankungen außerhalb des Supports in der Lösung auf.

In unserem ersten Experiment zur Behandlung von Evolutionsgleichungen erster Ordnung untersuchen wir die Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \begin{pmatrix} 10 \\ 10 \end{pmatrix} \nabla u .$$

Nach oben erhalten wir diskret

$$\begin{aligned} x^{n+1} &= x^n + 10\delta t , \\ y^{n+1} &= y^n + 10\delta t , \\ u^{n+1}(x, y) &= u^n(x - 10\delta t, y - 10\delta t) . \end{aligned}$$

Tabelle 7.16. Ergebnisse zu (7.9), (7.10) mit einer gradierten äquidistanten Punktfolge und linearem Spline

N	64	256	1024	4096
dof	192	768	3072	12288
lm	32	64	128	256
$PCG - iter$	150	300	550	1000
$UCG - iter$	50	64	130	136
$\ u - u_{h_i}\ _{L^\infty}$	$8.059 \cdot 10^{-2}$	$5.293 \cdot 10^{-2}$	$3.001 \cdot 10^{-2}$	$1.473 \cdot 10^{-2}$
$\ u - u_{h_i}\ _{L^1}$	$2.006 \cdot 10^{-3}$	$5.433 \cdot 10^{-4}$	$1.369 \cdot 10^{-4}$	$4.121 \cdot 10^{-5}$
$\ u - u_{h_i}\ _{L^2}$	$3.196 \cdot 10^{-3}$	$9.593 \cdot 10^{-4}$	$2.860 \cdot 10^{-4}$	$9.603 \cdot 10^{-5}$

Es wurden lineare Legendre Polynome verwendet, die Integration wurde auf dem Spline-Gitter mit 5 Gauß-knoten pro Zelle durchgeführt. Als Streckungsfaktor α wurde $\alpha = 1.25$ verwendet.

Daher erwarten wir, daß sich der gewählte Startwert

$$u^0(x, y) = \exp\left(-100\left((x - 0.4)^2 + (y - 0.4)^2\right)\right)$$

auf der Diagonalen durch das Grundgebiet bewegt. Die Ansatz- und Testfunktionen werden mittels quadratischer Räume V_i^h und linearen Gewichten konstruiert. Als Zeitschrittweite wählen wir $\delta t = 10^{-3}$. Zur Lösung der Massenmatrix setzen wir erneut ein PCG-Verfahren mit Jacobi-Vorkonditionierer ein. Als Abbruchkriterium für diese Iteration wählen wir $\|r\| < 10^{-6}$. Die Höhenlinien der Approximierenden und die Partikelverteilung der jeweiligen Zeitschritte sind in Abbildung 7.21 dargestellt. Aus diesen wird deutlich, daß das lokale Auflösungsvermögen des Raums V^h in jedem Zeitschritt der Lösung angepaßt ist und, daß durch die Diskretisierung in Lagrangescher Sichtweise der konvektive Transport durch keinerlei Diffusion verschmutzt wird, so daß wir die erwartete Bewegung des Startwerts auf der Diagonalen beobachten können. Als nächstes Beispiel soll ein Geschwindigkeitsfeld mit konstanter Winkelgeschwindigkeit untersucht werden, wir wählen dazu die Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix} \nabla u .$$

Der gewählte Startwert

$$u^0(x, y) = \exp\left(-100\left(x^2 + \left(y - \frac{1}{4}\right)^2\right)\right)$$

soll demnach auf einer Kreislinie um den Nullpunkt bewegt werden. Als diskretes Schema erhalten wir nach Abschnitt 6

$$\begin{aligned} x^{n+1} &= x^n - y^n \delta t , \\ y^{n+1} &= y^n + x^n \delta t , \\ u^{n+1}(x, y) &= u^n(x + y \delta t, y - x \delta t) . \end{aligned}$$

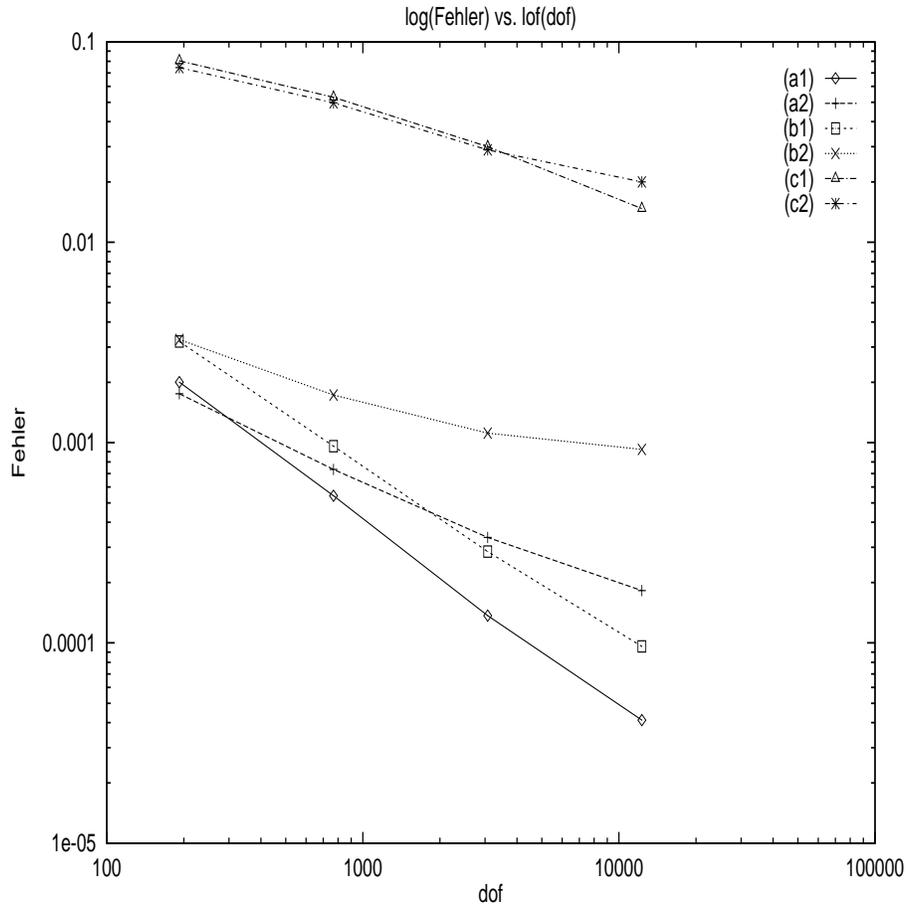


Abbildung 7.19. Fehler $u - u_h$ in L^1 -Norm (a), L^2 -Norm (b) und L^∞ -Norm (c) gegen die Anzahl der verwendeten Freiheitsgrade, (*1) bezeichnen die mittels der gradierten Punktfolge ermittelten Graphen

Die Räume der Ansatz- und Testfunktionen werden wie oben mit quadratischen lokalen Räumen und linearen Gewichten in jedem Zeitschritt konstruiert. Aus Abbildung 7.23 wird deutlich, daß sich die Approximierende - ohne durch numerische Diffusion verschmutzt zu werden - auf der erwarteten Kreislinie bewegt. Aus diesen Experimenten erkennen wir, daß das Verfahren zur Simulation von konvektiven Transportprozessen gut geeignet ist, denn durch die Lagrangesche Behandlung der Differentialgleichung ergibt sich ein implizites Verfahren, in dem keinerlei Diffusion auftritt. Darüberhinaus bleibt durch die Anpassung der Partikelpositionen das Auflösungsvermögen des Raums der Ansatz- und Testfunktionen der Lösung in jedem Zeitschritt erhalten.

7.3.2 Gleichungen zweiter Ordnung

Wenden wir nun das Verfahren auf Evolutionsgleichungen zweiter Ordnung an. Als erstes Beispiel dafür wollen wir das Problem

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u$$

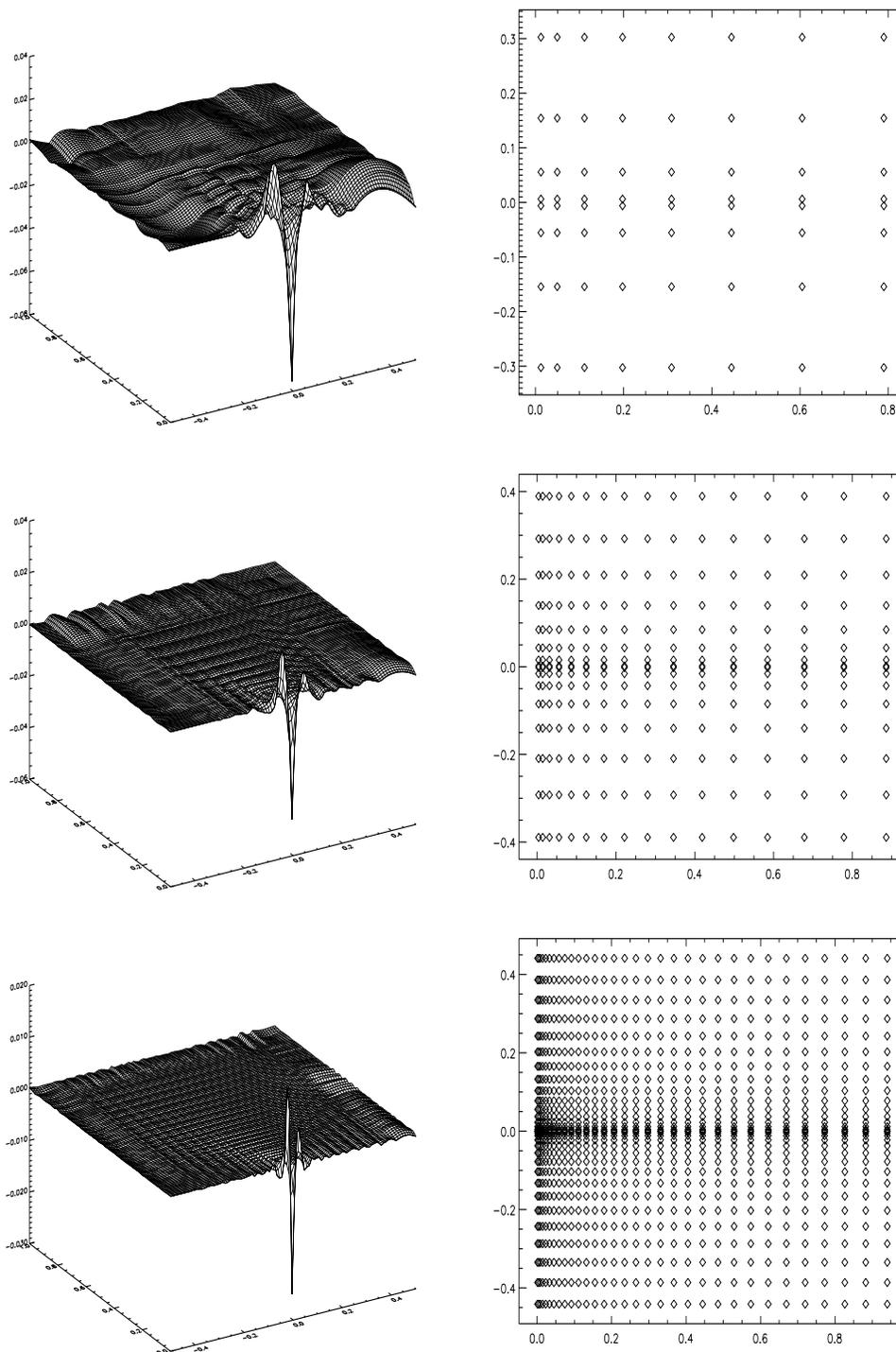
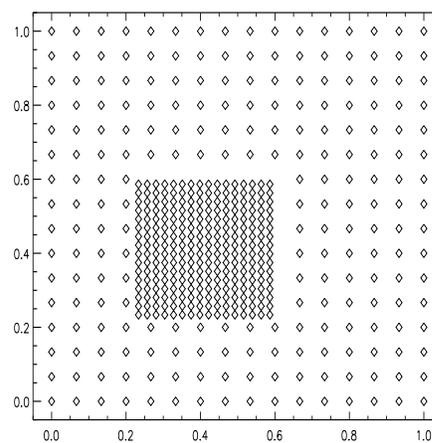
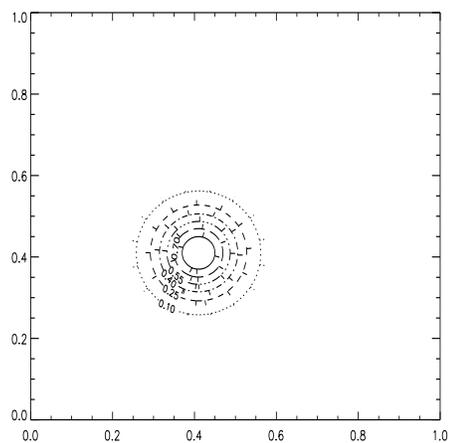
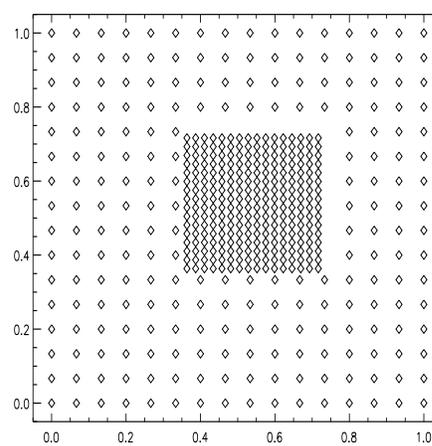
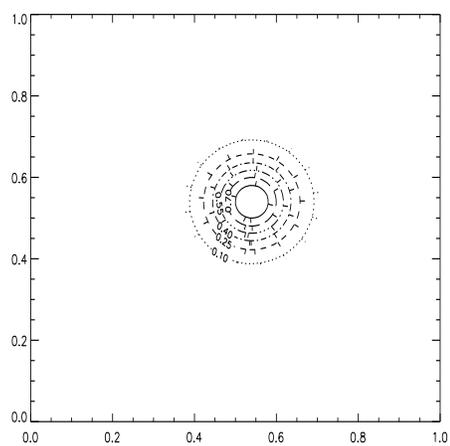


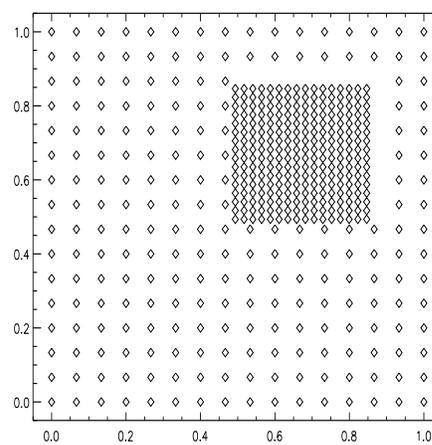
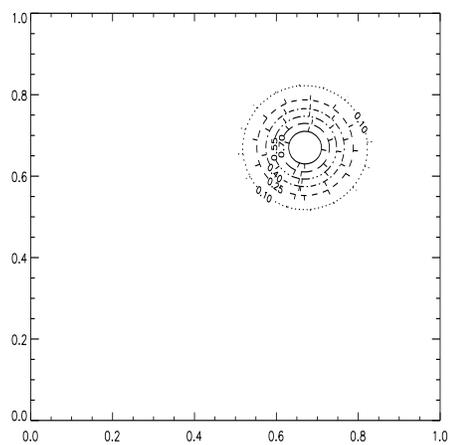
Abbildung 7.20. Fehler $u - u_h$ und die jeweilige gradierte Partikelverteilung



Time = $1 \cdot 10^{-3}$



Time = $14 \cdot 10^{-3}$



Time = $27 \cdot 10^{-3}$

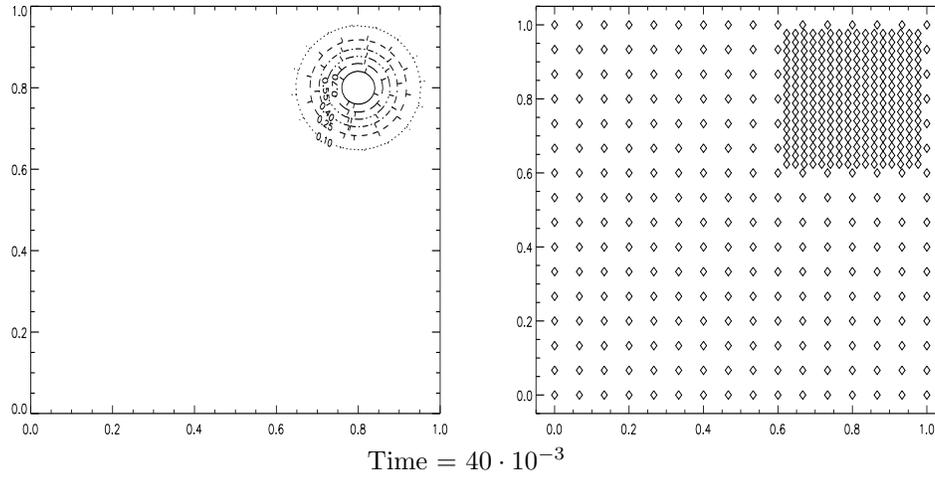


Abbildung 7.21. Höhenlinien der Approximierenden und Partikelverteilung für das Konvektions-Problem

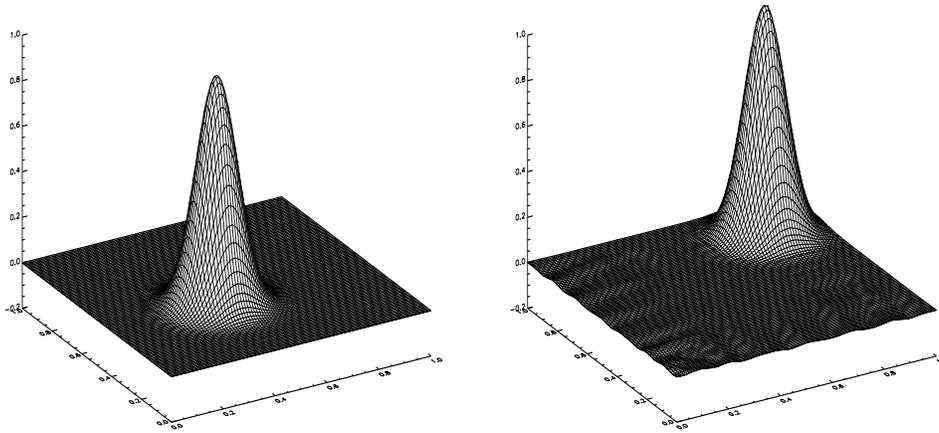


Abbildung 7.22. Startwert und die Approximierende nach 40 Zeitschritten

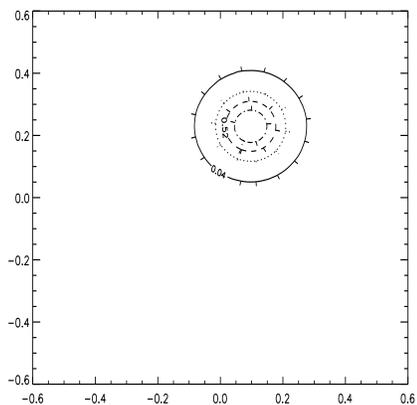
mit einer Ausströmbedingung, d.h. mit verschwindenden Neumann-Randwerten und dem Startwert

$$u^0(x, y) = \exp(-100(x^2 + y^2))$$

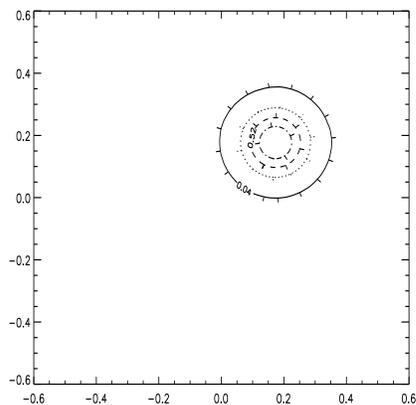
untersuchen. Als diskretes Schema erhalten wir

$$\delta t (-\Delta u^{n+1}) + u^{n+1} = u^n .$$

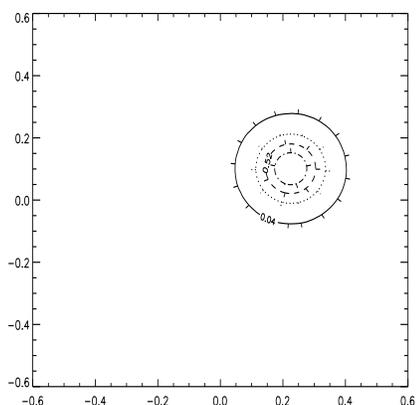
Die PUM-Räume werden in jedem Zeitschritt mit quadratischen Räumen V_i^h und linearen Gewichten konstruiert. Die Startpartikelverteilung wählen wir so, daß der Startwert lokal fein aufgelöst wird. Diese Verteilung passen wir der Lösung u^n im n -ten Zeitschritt nicht weiter an, d.h. wir verzichten auf den oben erwähnten Monte-Carlo-Schritt. Demzufolge ist die Dichte der Partikel in der Nähe des Randes wesentlich geringer als im Inneren. Aus diesem Grund können wir auch beim



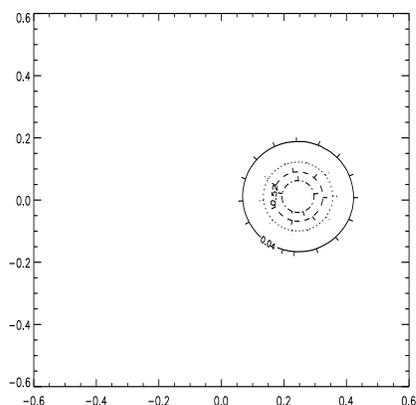
Time = $15 \cdot 10^{-3}$



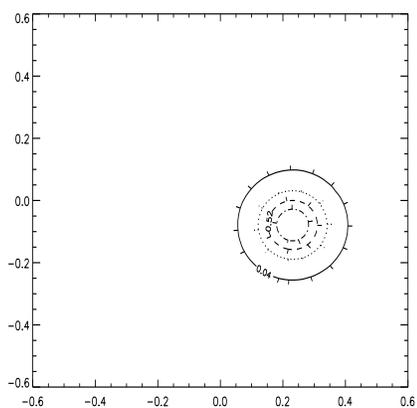
Time = $30 \cdot 10^{-3}$



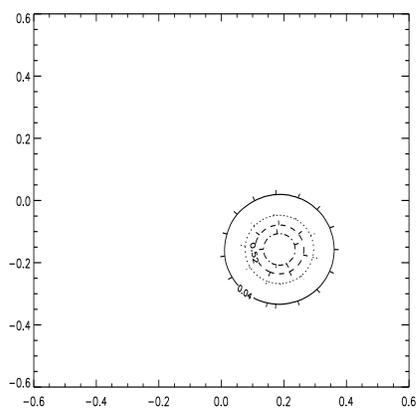
Time = $45 \cdot 10^{-3}$



Time = $60 \cdot 10^{-3}$



Time = $75 \cdot 10^{-3}$



Time = $90 \cdot 10^{-3}$

Abbildung 7.23. Höhenlinien der Approximierenden für das Konvektions-Problem

Ausströmen über den Rand eine geringere Approximationsgüte beobachten, siehe Abbildung 7.24. Im nächsten Beispiel betrachten wir die Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla D \nabla u$$

mit

$$D = \begin{cases} 0.1 & : x < 1/2 \wedge y < 1/3 \\ 0.1 & : x > 1/2 \wedge y > 1/3 \\ 10 & : \text{sonst} \end{cases}$$

und verschwindenden Neumann-Randwerten. Als Startwert wählen wir die Funktion

$$u^0(x, y) = \exp \left(-100 \left(\left(x - \frac{1}{2} \right)^2 + \left(y - \frac{1}{3} \right)^2 \right) \right).$$

Die Ansatz- und Testfunktionen werden wie oben mit quadratischen Räumen V_i^h und linearen Gewichten konstruiert. Bei der Bestimmung der Gitter für die Quadratur werden die Sprünge des Diffusionskoeffizienten berücksichtigt und als Gitterlinien eingeführt. Für die Startpartikelverteilung berücksichtigen wir sie jedoch nicht weiter. Dementsprechend können wir in Abbildung 7.25 geringe Schwankungen der Approximierenden in der Nähe der Sprünge beobachten. Als abschließendes Beispiel wollen wir nun sowohl konvektiven Transport als auch Diffusion betrachten. Dazu wählen wir das folgende Konvektions-Diffusions-Problem

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u - \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix} \nabla u$$

mit verschwindendem Neumann-Randwert. Nach Abschnitt 6 erhalten wir das diskrete Schema

$$\begin{aligned} x^{n+1} &= x^n - \frac{y^n \delta t}{\rho(x^n, y^n)}, \\ y^{n+1} &= y^n + \frac{x^n \delta t}{\rho(x^n, y^n)}, \\ \delta t (-\Delta u^{n+1}) + u^{n+1} &= \hat{u}, \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{u}(x, y) &= u^n \left(x + \frac{y \delta t}{\rho(x, y)}, y - \frac{x \delta t}{\rho(x, y)} \right), \\ \rho(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}. \end{aligned}$$

Auch in diesem Beispiel verzichten wir auf einen Monte-Carlo-Schritt zur Berücksichtigung des diffusiven Transports. Das gewählte Geschwindigkeitsfeld bewirkt eine Bewegung um den Nullpunkt mit konstanter Geschwindigkeit, demzufolge erwarten wir daß der gewählte Startwert

$$u^0(x, y) = \exp \left(-100 \left(x^2 + \left(y - \frac{1}{4} \right)^2 \right) \right)$$

durch die Diffusion zerläuft und sich dabei um den Nullpunkt bewegt. Da die Winkelgeschwindigkeit des Geschwindigkeitsfelds in radialer Richtung abnimmt, wird der Support der Approximierenden dabei verzerrt. Die in Abbildung 7.26 dargestellten Höhenlinien der Approximierenden spiegeln dieses erwartete Verhalten auch wider.

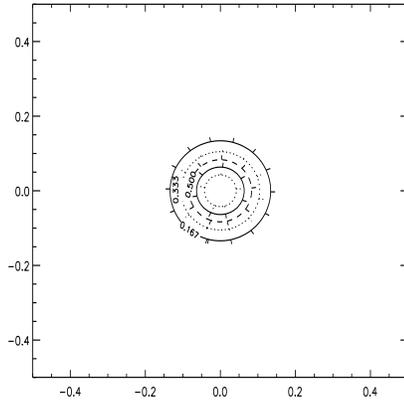
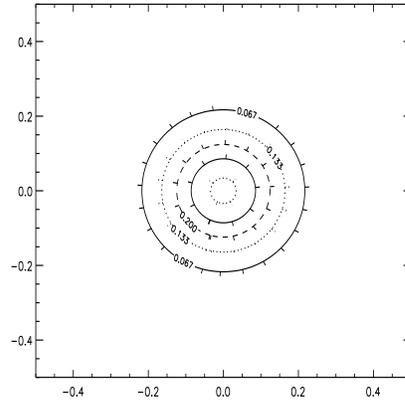
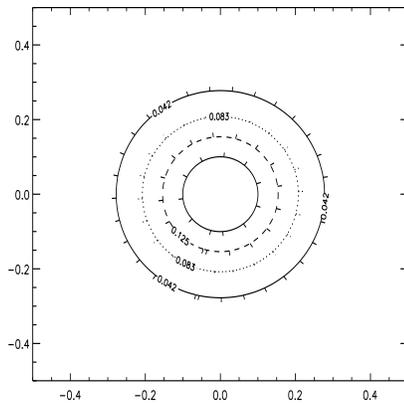
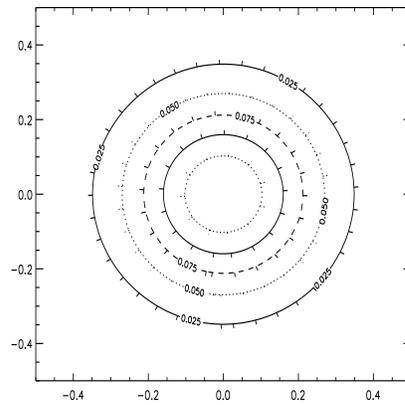
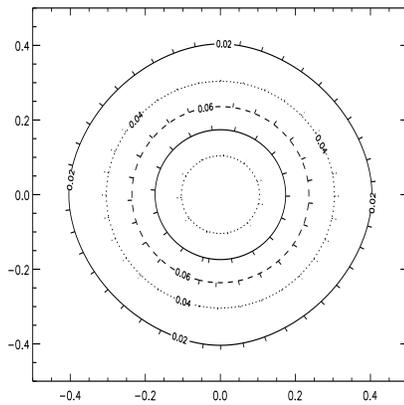
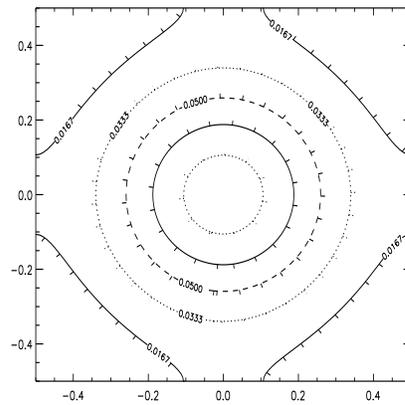
Time = $0 \cdot 10^{-3}$ Time = $50 \cdot 10^{-3}$ Time = $100 \cdot 10^{-3}$ Time = $150 \cdot 10^{-3}$ Time = $200 \cdot 10^{-3}$ Time = $250 \cdot 10^{-3}$

Abbildung 7.24. Höhenlinien der Approximierenden für das Diffusions-Problem mit konstanten Koeffizienten

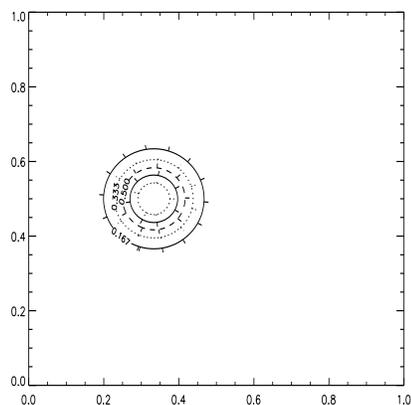
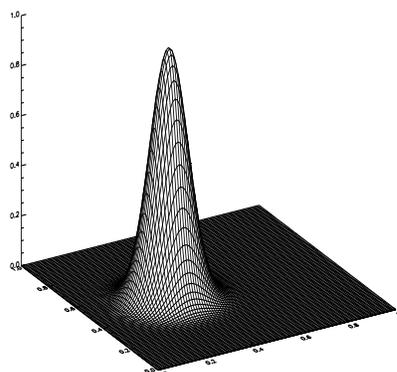
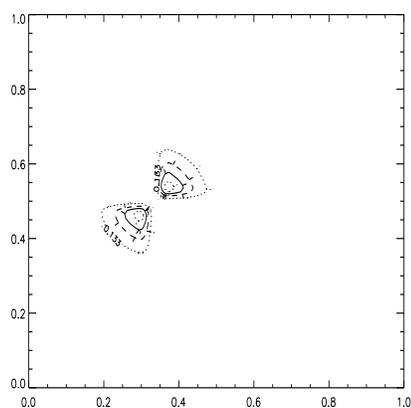
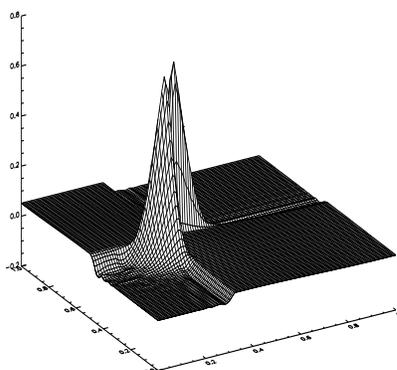
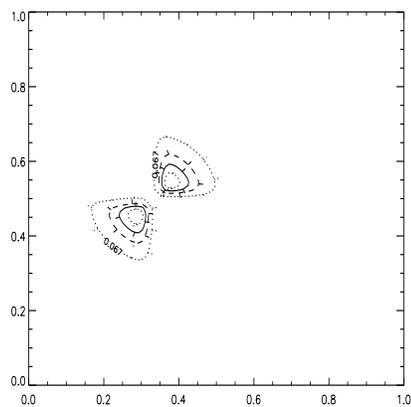
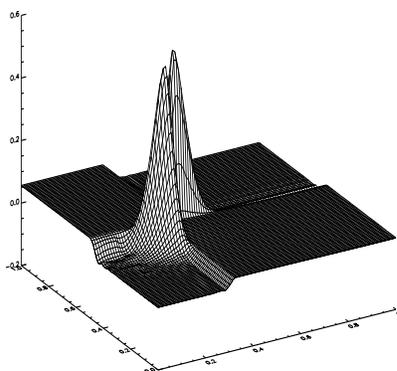
Time = $0 \cdot 10^{-3}$ Time = $0 \cdot 10^{-3}$ Time = $10 \cdot 10^{-3}$ Time = $10 \cdot 10^{-3}$ Time = $20 \cdot 10^{-3}$ Time = $20 \cdot 10^{-3}$

Abbildung 7.25. Höhenlinien der Approximierenden für das Diffusions-Problem mit springenden Koeffizienten

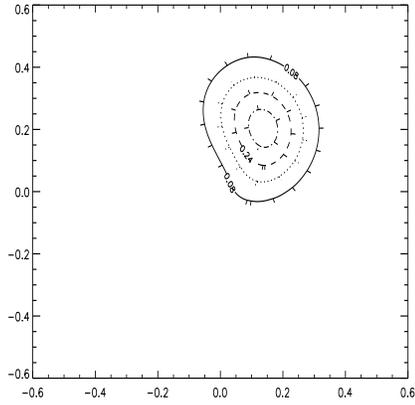
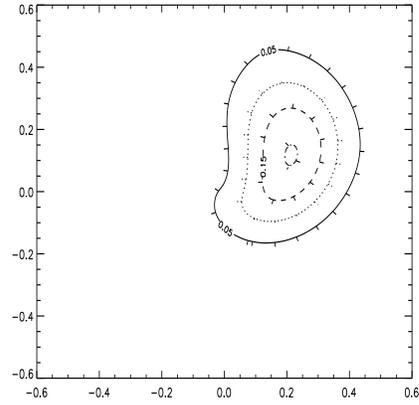
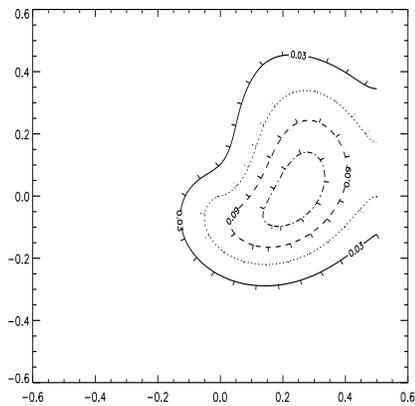
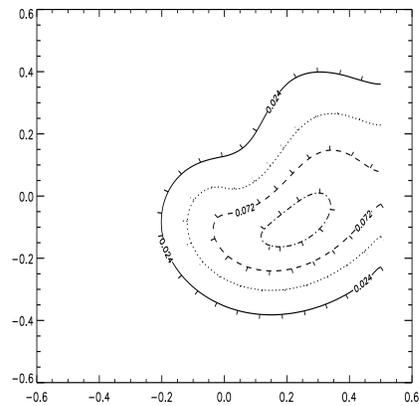
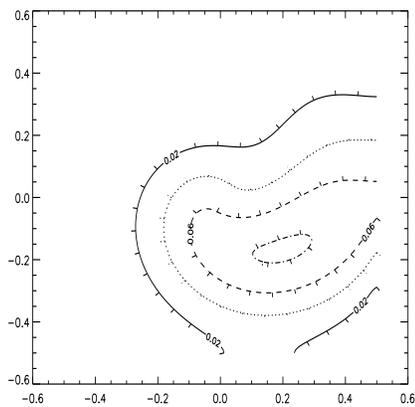
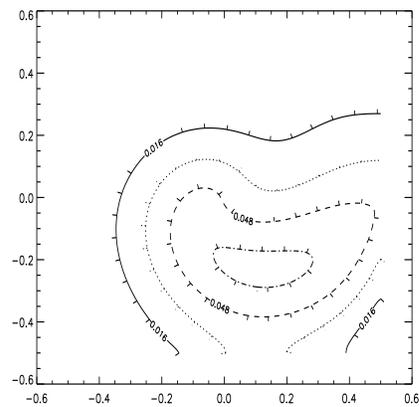
Time = $5 \cdot 10^{-3}$ Time = $10 \cdot 10^{-3}$ Time = $15 \cdot 10^{-3}$ Time = $20 \cdot 10^{-3}$ Time = $25 \cdot 10^{-3}$ Time = $30 \cdot 10^{-3}$

Abbildung 7.26. Höhenlinien der Approximierenden für das Konvektions-Diffusions-Problem

Insgesamt zeigen die Experimente zur Behandlung von Evolutionsgleichungen mit dem Verfahren, daß durch die Lagrangesche Betrachtung die Approximationseigenschaften der Ansatz- und Testfunktionen der Lösung in jedem Zeitschritt angepaßt werden. Desweiteren ergeben sich implizite Schemata, so daß die Zeitschrittweite δt nur in Abhängigkeit von v gewählt werden muß. Das Verfahren läßt sich demnach für die Diskretisierung von Evolutionsgleichungen effektiv einsetzen. Um den Einsatz des Verfahrens auch für komplexere Probleme zu ermöglichen, sind sicherlich noch die oben dargestellten Aufwandsverbesserungen durchzuführen, doch zeigen die Experimente deutlich, daß bei dem Verfahren die prinzipiellen Schwierigkeiten die bei Diskretisierungen auf Gittern auftreten ausgeschlossen sind.

Kapitel 8

Schlußbemerkungen

8.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit haben wir ein Partikel-Galerkin-Verfahren mit Ansatzfunktionen der *Partition of Unity Method* untersucht. Dabei war das Ziel, das Verfahren auf seine Einsetzbarkeit zur Diskretisierung von Evolutionsgleichungen zu überprüfen. Da die Unabhängigkeit der zur Diskretisierung verwendeten Punkte eine Behandlung in der Lagrangeschen Sicht, d.h. auf einer sich zeitlich verändernden Punktverteilung, nahe legte, war es zu Beginn notwendig, den Raum V^h der Ansatz- und Testfunktionen für "beliebige" Punktfolgen zu untersuchen. Der Raum V^h wurde definiert als

$$V^h := \{ u^h \mid u^h = \sum_{i=1}^N \varphi_i v_i^h, v_i^h \in V_i^h \},$$

wobei die Funktionen φ_i eine Partition der Eins bezüglich einer in Abhängigkeit von der gegebenen Punktfolge bestimmten Überdeckung $\{\Omega_i\}$ des Grundgebiets Ω bildeten. Die Funktionen v_i^h waren Elemente der auf den Ω_i gewählten Approximationsräume V_i^h . Durch die von uns gewählte Konstruktionsvorschrift für die Partition der Eins, konnten wir beliebig reguläre Räume V^h aufbauen. Die Unabhängigkeit der Punkte bewirkte die Unabhängigkeit der lokalen Räume V_i^h , was zu der Fähigkeit des Verfahrens, lokal angepasste Räume V^h konform zu konstruieren, führte. Darüberhinaus ergab sich durch die Unabhängigkeiten der Punkte und lokalen Räume die Möglichkeit, adaptive Verfahrensvarianten zu implementieren. Den Raum V^h der Ansatz- und Testfunktionen wie oben aufzubauen, hatte jedoch zur Folge, daß die Auswahl einer Basis und die Integration der schwachen Form der Differentialgleichung mit dieser zu untersuchen waren. Unter der Forderung, daß alle Ω_i achsenparallele Rechtecke seien, haben wir ein Quadraturschema vorgestellt, welches eine genügend genaue Berechnung der Integrale ermöglichte. Weitere Forderungen an die Überdeckung $\{\Omega_i\}$ ergaben sich, um den Aufwand bei der Quadratur zu beschränken und die Wahl der Funktionen $\varphi_i \psi_k^i$ - mit $\{\psi_k^i\}$ Basis von V_i^h - zu ermöglichen. Durch diese Trennung der Freiheitsgrade ergaben sich Steifigkeitsmatrizen mit Blockstruktur, für deren iterative Lösung ein Multilevelvorkonditionierer angegeben wurde, dessen Eigenschaften noch zu untersuchen sind. Da mit den Ansatzfunktionen (im allgemeinen) keine Interpolierende konstruiert werden kann, mußten zur Behandlung von Dirichlet-Randwerten Lagrange Multiplikatoren eingesetzt werden, so daß desweiteren auch Löser für Sattelpunktprobleme eingesetzt werden mußten.

Unsere Experimente zur Diskretisierung von elliptischen Differentialgleichungen zweiter Ordnung haben gezeigt, daß die Approximationsgüte der gewählten lokalen Räume V_i^h sich auf den Raum V^h überträgt. Dabei stellten wir außerdem fest, daß durch die Überlappungen der lokalen Räume V_i^h die Approximationseigenschaften des globalen Raums V^h sogar besser als die der

einzelnen V_i^h ausfallen können. Die Diskretisierung von Evolutionsgleichungen ist mit dem Verfahren in der Lagrangeschen Sicht möglich, so daß konvektiver Transport *ohne numerische Diffusion* behandelbar ist. Die von uns durchgeführten Experimente dazu haben gezeigt, daß durch die Lagrangesche Behandlung und die Unabhängigkeit der Punkte das lokale Auflösungsvermögen des Raums der Ansatz- und Testfunktionen über die Zeit erhalten bleibt. Desweiteren bewirkt die Unabhängigkeit der Partikel, daß die Transformation der Partikelpositionen in jedem Zeitschritt keinerlei algorithmische Schwierigkeiten hervorruft, oder daß sie eine Verlangsamung oder sogar der Zusammenbruch der Berechnung zur Folge hat.

8.2 Ausblick

Problematisch ist mit dem Verfahren die Behandlung von Dirichlet-Randwerten und die Integration der schwachen Form der Differentialgleichung. Bei der Diskretisierung von Dirichlet-Randdaten werden Lagrange Multiplikatoren eingesetzt, um den Randwert zu erzwingen. Wie diese optimal hinsichtlich des Lösungsaufwands und der Approximationsgüte gewählt werden müssen, ist durch weitere Untersuchungen zu zeigen. Das von uns vorgestellte Quadratschema ermöglicht die genügend genaue Bestimmung der Integrale, jedoch ist eine weitere Reduktion des Aufwands (speziell für den Einsatz des Verfahrens in 3-D) nötig. Dazu können die oben vorgeschlagenen Verbesserungen in einer parallelen Implementierung des Verfahrens eingesetzt werden. Darüberhinaus ist auch der Entwurf eines effizienten Algorithmus zur Bestimmung einer Überdeckung mit den geforderten Eigenschaften notwendig, denn durch die Lagrangesche Betrachtungsweise ist bei der Diskretisierung von Evolutionsgleichungen in jedem Zeitschritt eine neue Punktverteilung gegeben. Demzufolge muß in jedem Zeitschritt eine neue Überdeckung und eine neuer Raum V^h konstruiert werden. Eine weitere Reduktion des Gesamtaufwands des Verfahrens läßt sich durch die Reduktion der Anzahl der notwendigen Freiheitsgrade zum Erreichen einer geforderten Approximationsgüte erzielen. Dieses kann durch die Implementierung einer adaptiver Verfahrensvariante realisiert werden. Um dies zu ermöglichen, ist die Entwicklung geeigneter Fehlerschätzer notwendig. Darüberhinaus sollte die Struktur des PUM-Raums zur Implementierung eines (bzw. des in der Arbeit vorgeschlagenen) Multilevelvorkonditionierers ausgenutzt werden, so daß der Lösungsaufwand auf ein Minimum reduziert werden kann.

Aufgrund der einfachen Anpassung des Ansatzraums V^h an eine sich zeitlich verändernde Lösung erwarten wir, daß sich das Verfahren - nachdem die oben angesprochenen Aufwandsreduktionen durchgeführt wurden - bei der Behandlung von Evolutionsgleichungen effizient und erfolgreich einsetzen läßt. Insbesondere dürfte sich das Verfahren für die Diskretisierung von freien Randwertproblemen eignen, denn die Verwendung von unabhängigen Punkten ermöglicht eine einfache Auflösung komplexer Geometrien. Darüberhinaus wird diese Auflösung der freien Ränder durch die Fähigkeit, konvektiven Transport ohne numerische Diffusion zu behandeln, über die Zeit erhalten.

An dieser Stelle möchte ich mich bei Prof. Dr. Michael Griebel für die Überlassung des Themas und die intensive Betreuung bedanken. Desweiteren bin ich Stephan Knapek und Thomas Schiekhofer für ihre Hilfe und Ratschläge zu Dank verpflichtet.

Literaturverzeichnis

- [AP85] A. W. Appel: *An efficient Program for Many-Body Simulation*, SIAM Sci. Stat. Comput., Vol. 6, 1985
- [B73] I. Babuška: *The Finite Element Method with Lagrangian Multipliers*, Numer. Math., Vol. 20, pp. 179-192, 1973
- [BM96] I. Babuška, J.M. Melenk: *The Partition of Unity Finite Element Method: Basic Theory and Applications*, Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg., Special Issue on Meshless Methods 1996, Vol. 139, pp. 289-314, auch als Research Report No. 96-01, Seminar für Angewandte Mathematik der ETH Zürich, 1996
- [BM97] I. Babuška, J.M. Melenk: *The Partition of Unity Method*, Int. J. Numer. Meths. Eng., Vol. 40, pp. 727-758, 1997
- [BS94] I. Babuška, M. Suri: *The p and hp Versions of the Finite Element Method, Basic Principles and Properties*, SIAM Review, Vol. 36, pp. 578-632, 1994
- [BA94] M. J. Baines: *Moving Finite Elements*, Monographs on Numerical Analysis, Oxford Science Publications, Oxford, 1994
- [BKOFK] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming, P. Krysl: *Meshless Methods: An Overview and Recent Developments*, Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg., Special Issue on Meshless Methods 1996, Vol. 139, pp. 3-47
- [BI97] I. Bicã: *Iterative Substructuring Algorithms for the p -Version Finite Element Method for Elliptic Problems*, PhD-Thesis, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, 1997
- [BO] T. Bonk: *A new algorithm for multi-dimensional adaptive numerical quadrature*, in: W. Hackbusch, G. Wittum (eds.) *Adaptive Methods - Theory and Applications*, pp. 54-68, Vieweg, Braunschweig
- [BRA97] D. Braess: *Finite Elemente*, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, 1997 (2. Auflage)
- [BR81] J. H. Bramble: *The Lagrange Multiplier Method for Dirichlet's Problem*, Math. Comput., Vol. 37, pp. 1-11, 1981
- [BP88] J. H. Bramble, J. E. Pasciak: *A Preconditioning Technique for Indefinite Systems Resulting from Mixed Approximations of Elliptic Problems*, Math. Comput., Vol. 50, pp. 1-17, 1988
- [BPV97A] J. H. Bramble, J. E. Pasciak, A. T. Vassilev: *Analysis of the inexact Uzawa Algorithm for Saddle Point Problems*, Preprint, <http://www.isc.math.tamu.edu/JEP/pasciak/papers/uzawa.ps>

- [BPV97B] J. H. Bramble, J. E. Pasciak, A. T. Vassilev: *Inexact Uzawa Algorithms for Nonsymmetric Saddle Point Problems*, Preprint, <http://www.isc.math.tamu.edu/JEP/pasciak/papers/uzawans.ps>
- [BF91] F. Brezzi, M. Fortin: *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, 1991
- [DUA] C.A.M. Duarte: *A Review of Some Meshless Methods to Solve Partial Differential Equations*, TICAM Report 95-06, TICAM University of Texas, 1995
- [DO95] C.A.M. Duarte, J.T. Oden: *Hp Clouds - A Meshless Method to Solve Boundary Value Problems*, TICAM Report 95-05, TICAM University of Texas, 1995, auch als *Hp Clouds - An h-p Meshless Method*, Numer. Meths. for PDE, to appear
- [DO97] C.A.M. Duarte, J.T. Oden: *An h-p Adaptive Method Using Clouds*, Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg., to appear
- [GS91] C. Gáspár, S. Szél: *Application of unstructured grids in Monte-Carlo Simulations*, XXIV IAHR Congress Madrid 1991, Modelling refined flows
- [GR92] Ch. Großmann, H.G. Roos: *Numerik partieller Differentialgleichungen*, B. G. Teubner, Stuttgart, 1992
- [GC97] B. Guo, W. Cao: *Additive Schwarz Methods for the hp-Version of the Finite Element Method in two dimensions*, SIAM J. Sci. Comput., Vol. 18, pp. 1267-1288, 1997
- [KUN95] A. Kunoth: *Multilevel Preconditioning - Appending Boundary Conditions by Lagrange Multipliers*, Adv. Comput. Math., Vol. 4, Special Issue on Multiscale Methods, pp. 145-170, 1995
- [LS81] P. Lancaster, K. Salkauskas: *Surfaces generated by moving least squares methods*, Math. Comput., Vol. 37, pp. 141-158, 1981
- [LDT] T.J. Liszka, C.A.M. Duarte, W.W. Tworzydło: *Hp-Meshless Cloud Method*, Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg., to appear
- [MEL92] J. M. Melen: *Finite Element Methods with Harmonic Shape Functions for Solving Laplace's Equation*, MA-Thesis, University of Maryland, 1992
- [MEL95] J. M. Melen: *On Generalized Finite Element Methods*, PhD-Thesis, University of Maryland, 1995
- [NKS95] H. Neunzert, A. Klar, J. Struckmeier: *Particle Methods: Theory and Applications*, Bericht 95-153, Berichte der Arbeitsgruppe Technomathematik, Universität Kaiserslautern
- [ODZ] J.T. Oden, C.A.M. Duarte, O.C. Zienkiewicz: *A New Cloud-Based hp Finite Element Method*, submitted
- [OB87] E. S. Oran, J. P. Boris: *Numerical Simulation of Reactive Flow*, Elsevier, New York-Amsterdam-London, 1987
- [RW] T. Rusten, R. Winther: *Preconditioning Linear Saddle Point Problems*, in M. Dæhlen, A. Tveito: *Numerical Methods and Software Tools in Industrial Mathematics*, pp. 281-298, Boston-Basel-Berlin, Birkhäuser, 1997
- [VE96] R. Verfürth: *A Review of a Posteriori Error Estimation and Adaptive Meshrefinement Techniques*, B. G. Teubner, Stuttgart, 1996

-
- [WLO82] J. Wloka: *Partielle Differentialgleichungen*, B. G. Teubner, Stuttgart, 1982
- [ZE91] C. Zenger: *Sparse Grids*, in: W. Hackbusch (ed.) *Parallel Algorithms for Partial Differential Equations*, Proceedings of the 6th GAMM Seminar Kiel, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 31, pp. 241-251, Vieweg, Braunschweig, 1991