

Dirk MARTIN

Deformierung von Berechnungsgittern mit netzunabhängigen Verfahren

DIPLOMARBEIT

**zur Erlangung des akademischen Grades
eines Diplom-Ingenieurs**

Diplomstudium Technische Mathematik



Graz University of Technology

Technische Universität Graz

Betreuer:

Univ.-Prof. Dr. Olaf Steinbach

Institut für Numerische Mathematik

Graz, im März 2012

Titel: Deformierung von Berechnungsgittern mit netzunabhängigen
Verfahren
Name, Vorname: Martin, Dirk
Matrikelnummer: 0030498
Institut: Institut für Numerische Mathematik
Technische Universität Graz
Betreuung: Univ.-Prof. Dr. Olaf Steinbach

Vorwort

Mein besonderer Dank geht an Herrn Univ.-Prof. Dr. Olaf Steinbach für die intensive Betreuung, nicht nur während der Entstehung der Diplomarbeit, sondern insbesondere auch bei der Entwicklung eines praxisrelevanten Problems zum Gegenstand einer mathematischen Arbeit.

Ich möchte Herrn Dipl.-Ing. Norbert Putz dafür danken, dass er mir die Bearbeitung dieses Themas anvertraut hat und damit der Grundstein für diese Arbeit gelegt wurde. Weiters möchte ich Herrn Dr. Günter Offner für seinen Einsatz und sein Entgegenkommen danken.

Außerdem geht mein herzlicher Dank an meine Familie und Frau Michaela Ertl, ohne deren Mithilfe, in allen Bereichen des Lebens, eine Wiederaufnahme des Studiums und letztlich die Erstellung dieser Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Kurzfassung

Diese Arbeit behandelt zwei netzunabhängige Verfahren zur Deformierung von Berechnungsgittern, die Interpolation mit radialen Basisfunktionen und die Methode der Fundamentallösungen zur Lösung einer partiellen Differentialgleichung vierter Ordnung.

Dabei wird eine Einführung in die Interpolation mit radialen Basisfunktionen gegeben, sowie ihre mathematischen Eigenschaften hinsichtlich der Existenz und Eindeutigkeit der Lösung, des Konvergenzverhaltens und der Kondition der resultierenden Interpolationsmatrizen untersucht. Zur Anwendbarkeit der Interpolation mit radialen Basisfunktionen auf praxisrelevanten Beispielen wird ein effizientes Lösungsverfahren für eine bestimmte Basisfunktion beschrieben.

Die Methode der Fundamentallösungen wird eingeführt und ihre Anwendung zur numerischen Bestimmung einer Lösung der Bi-Laplace Gleichung dargestellt.

Für die Anwendung der vorgestellten Methoden zur Deformierung von Berechnungsgittern wird eine verallgemeinerte Aufgabenstellung formuliert und ein Überblick über häufig verwendete Deformierungsmethoden gegeben.

Weiters werden Ergebnisse einer Implementierung der Lösungsverfahren zu den in dieser Arbeit behandelten netzunabhängigen Methoden zur Gitterdeformierung präsentiert.

Die Arbeit schließt mit einem Ausblick auf weitere Fragestellungen.

Abstract

This thesis addresses two meshless methods for the deformation of computational grids, namely the interpolation with radial basis functions and the method of fundamental solutions for the numerical solution of fourth-order partial differential equations.

The interpolation with radial basis functions is introduced and some mathematical properties such as existence and uniqueness of an interpolation, convergence analysis and the conditioning of the resulting interpolation matrices are investigated. An efficient solution method considering a specific basis function is described to enable the usability for real-life scaled problems.

An introduction to the method of fundamental solutions is given and its application to find a numerical solution to the biharmonic equation is described.

The task of the deformation of computational grids is formulated generally to lay the foundation of the application of the aforementioned methods. Furthermore an overview of commonly used deformation methods is given.

The results of an implementation of the solution methods to the addressed meshless grid deformation methods are presented.

This thesis concludes with an outlook to further associated issues.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	9
1 Interpolation mit radialen Basisfunktionen	11
1.1 Radiale Basisfunktionen	11
1.2 Interpolation mit radialen Basisfunktionen	13
1.2.1 Einführung	13
1.2.2 Existenz und Eindeutigkeit	13
1.2.3 Konvergenzanalyse	19
1.2.4 Kondition der Systemmatrix	24
2 Effiziente Verfahren zur Bestimmung der Interpolierenden mit radialen Basisfunktionen	27
2.1 Iteratives Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems	27
2.1.1 Einführung	28
2.1.2 Beschreibung des Verfahrens	28
2.1.3 Algorithmische Formulierung des Lösungsverfahrens	31
2.1.4 Analyse des Verfahrens	33
2.2 Multipolmethoden	34
2.2.1 Einführung	34
2.2.2 Eine Multipolmethode im \mathbb{R}^3	35
2.2.3 Reihenentwicklung für die Basisfunktion $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$	38
3 Bi-Laplace Gleichung	41
3.1 Einführung	41
3.2 Fundamentallösungen	42
3.2.1 Fundamentallösung des Bi-Laplace Operators	44
3.3 Methode der Fundamentallösungen	44
3.3.1 Bi-Laplace Gleichung	45
4 Deformierung von Berechnungsgittern	49
4.1 Einführung	49
4.1.1 Berechnungsgitter	49
4.1.2 Deformierung von Berechnungsgittern	50
4.1.3 Gitterqualität	50
4.2 Interpolationsmethoden	53
4.2.1 Transfinite Interpolation	53
4.2.2 Interpolation mit radialen Basisfunktionen	53

4.3	Anwendung partieller Differentialgleichungen	55
4.3.1	Laplace Gleichung	55
4.3.2	Lineare Elastostatik	56
4.3.3	Bi-Laplace Gleichung	56
4.4	Diskrete Formulierungen	57
5	Ergebnisse	59
5.1	Wahl der Basisfunktion	59
5.2	Laufzeitverhalten der Bestimmung der Interpolierenden	59
5.3	Vergleich der Deformierungsmethoden	61
5.4	Verbrennungsmotor	69
6	Ausblick	73
6.1	Interpolation mit radialen Basisfunktionen	73
6.1.1	Untersuchung weiterer Basisfunktionen im \mathbb{R}^3	73
6.1.2	Weitere Anwendung der Interpolation mit radialen Basisfunktionen im Bereich der Gittergenerierung	73
6.2	Partielle Differentialgleichungen vierter Ordnung	73
6.2.1	Weitere Verfahren zur Lösung der Bi-Laplace Gleichung	73
6.2.2	Erweiterung der betrachteten Differentialgleichungen	74

Einleitung

Viele Aufgabenstellungen der numerischen Simulation, insbesondere die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen, benötigen die Diskretisierung der betrachteten Gebiete. Diese Diskretisierungen werden Gitter oder Netze genannt, das Erstellen der Diskretisierungen demnach Gittergenerierung oder Vernetzung. Die Art der gewählten Diskretisierungsmethode hängt dabei von Faktoren wie z. B. der verwendeten Simulationsmethode oder der Komplexität des betrachteten Gebietes ab. So ergeben sich für verschiedene Problemstellungen mitunter unterschiedliche Diskretisierungen für dasselbe Gebiet beziehungsweise für die Grenzschicht zwischen zwei Gebieten, die mit gekoppelten Methoden gemeinsam untersucht werden. Ein typisches Beispiel hierfür bildet die Fluid-Struktur Interaktion.

In vielen Anwendungsfällen ist die Form der betrachteten Gebiete nicht konstant, so z. B. bei zeitlich veränderlichen Geometrien oder bei Optimierungsproblemen. Veränderte Geometrien können auf zwei Arten abgebildet werden. Die erste Möglichkeit besteht in einer erneuten Diskretisierung des modifizierten Gebietes, die zweite in der Deformierung einer vorhandenen Diskretisierung. Eine erneute Diskretisierung erfordert einen wiederholten Diskretisierungsaufwand. Je nach verwendeter Methode können dabei leicht veränderte Geometrien stark veränderte Topologien in der Diskretisierung nach sich ziehen. Bei der Deformierung einer vorhandenen Diskretisierung gilt es, die Gitterqualität, hinsichtlich der von der jeweiligen Simulationsmethode geforderten Qualitätskriterien, zu erhalten.

In den Arbeiten von deBoer et. al. [11] und Rendall et. al. [26] wird die Interpolation mit radialen Basisfunktionen als netzunabhängige Deformierungsmethode vorgestellt. Netzunabhängig bedeutet dabei, dass die Methode nicht an die Art der Diskretisierung gebunden ist. Grundlage für die in dieser Arbeit betrachtete Deformierung von Berechnungsgittern durch Interpolation mit radialen Basisfunktionen bilden Interpolierende der Form

$$s(x) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \sqrt{(x - x_i)^2 + c^2} + const.$$

Helenbrook motiviert in [18] die Verwendung von partiellen Differentialoperatoren vierter Ordnung mit der Möglichkeit, Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen am gesamten Rand des Gitters setzen zu können. Eine netzunabhängige Methode zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen bietet die Methode der Fundamentallösungen. Deren Anwendung auf die Bi-Laplace Gleichung im \mathbb{R}^3 führt auf Lösungen der Form

$$u(x) = \sum_{i=1}^n \mu_i \|x - y_i\|.$$

In dieser Arbeit wird die Interpolation mit radialen Basisfunktionen und deren effiziente Bestimmung, sowie die Methode der Fundamentallösungen zur Lösung der Bi-Laplace Gleichung behandelt. Weiters werden beide Methoden zur Deformierung von Berechnungsgittern angewendet.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

Im ersten Kapitel wird die Interpolation mit radialen Basisfunktionen eingeführt und hinsichtlich der Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung, der Konvergenz und den Lösbarkeitseigenschaften untersucht. Das zweite Kapitel behandelt ein effizientes Verfahren zur Bestimmung der Interpolierenden unter Verwendung einer ausgewählten Basisfunktion. Im dritten Kapitel wird die Bi-Laplace Gleichung und die Methode der Fundamentallösungen zu ihrer numerischen Lösung eingeführt. Das vierte Kapitel liefert eine Einführung in die Begrifflichkeiten zu Berechnungsgittern und eine allgemeine Formulierung der Aufgabenstellung bei deren Deformierung. Des Weiteren wird ein Überblick über häufig verwendete Deformierungsmethoden gegeben, sowie im Speziellen die Deformierung mit Interpolation mit radialen Basisfunktionen und die Deformierung unter Anwendung des Bi-Laplace Operators beschrieben. Im fünften Kapitel werden numerische Ergebnisse zu den beschriebenen Verfahren präsentiert. Die Ergebnisse der Deformierung mit Interpolation mit radialen Basisfunktionen und unter Verwendung des Bi-Laplace Operators werden an Testbeispielen gezeigt und verglichen. Außerdem wird die Effizienz des Verfahrens zur Bestimmung der Interpolation mit radialen Basisfunktionen an Anwendungsbeispielen getestet, sowie die Anwendbarkeit des Verfahrens bei einem praxisrelevanten Beispiel gezeigt. Das letzte Kapitel liefert einen kurzen Ausblick auf weitere Fragestellungen im Umfeld dieser Arbeit.

1 Interpolation mit radialen Basisfunktionen

In diesem Kapitel werden radiale Basisfunktionen und die Interpolation mit radialen Basisfunktionen eingeführt. Diese Einführung folgt [4, 30, 7, 11]. Danach werden mathematische Eigenschaften der Interpolation mit radialen Basisfunktionen nach [4] betrachtet. Die Notation und einige zugehörige Definitionen sind an [28] angelehnt.

1.1 Radiale Basisfunktionen

Definition 1.1. Wird eine reellwertige, univariate Funktion $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ als symmetrische multivariate Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mit der Vorschrift

$$\Phi(x, y) = \phi(\|x - y\|), \quad \text{für } x, y \in \mathbb{R}^d \quad (1.1)$$

verwendet, so heißt ϕ eine **radiale Basisfunktion (RBF)** und Φ der zugeordnete **Kern**.

In (1.1) bezeichnet $\|\cdot\|$ die Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ im \mathbb{R}^d

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^d |x_i|^2 \right)^{1/2}.$$

Das Argument der Basisfunktion ϕ wird im Folgenden als $r := \|x - y\|$ geschrieben.

Definition 1.2. Als **Träger** einer über $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ definierten Funktion u bezeichnet man

$$\text{supp } u := \overline{\{x \in \Omega : u(x) \neq 0\}}.$$

Man unterscheidet zwischen Basisfunktionen mit globalem und Basisfunktionen mit kompaktem Träger. Basisfunktionen mit kompaktem Träger besitzen o.B.d.A die folgende Eigenschaft:

$$\phi(r) = 0, \quad \text{für } r > 1.$$

Basisfunktionen werden in vielen Anwendungen mit einem reellen Faktor $c > 0$ skaliert, also $\phi_c(r) = \phi(r/c)$.

Tabelle 1.1 enthält Beispiele für häufig verwendete Basisfunktionen mit globalem Träger. Tabelle 1.2 enthält Beispiele für Basisfunktionen mit kompaktem Träger für $r \in \mathbb{R}_+$. Dabei seien die Funktionen $\phi(r)$ definiert als

$$\phi(r) = \begin{cases} f(r), & 0 \leq r \leq 1, \\ 0, & r > 1. \end{cases}$$

Die Namen der Funktionen beziehen sich auf die Stetigkeit (bzw. die stetige Differenzierbarkeit) sowie die in Abschnitt 1.2.2 eingeführte Eigenschaft der positiven Definitheit (CP) sowie die Verwandtschaft zur Thin-plate spline Basisfunktion (CPTS) ([29, 30]).

Name	$\phi(r)$
Polyharmonic spline	r^m $m \in \mathbb{N}$ ungerade
	$r^m \log r$ $m \in \mathbb{N}$ gerade
Thin-plate spline	$r^2 \log r$ Spezialfall von Polyharmonic spline
Multiquadric biharmonics	$\sqrt{r^2 + c^2}$ $c \in \mathbb{R}$
Inverse multiquadric biharmonics	$\frac{1}{\sqrt{r^2 + c^2}}$ $c \in \mathbb{R}$
Gaussian	e^{-r^2}

Tabelle 1.1: Basisfunktionen mit globalem Träger

Name	$f(r)$
CP C^0	$(1 - r)^2$
CP C^2	$(1 - r)^4(4r + 1)$
CP C^4	$(1 - r)^6(\frac{35}{3}r^2 + 6r + 1)$
CP C^6	$(1 - r)^8(32r^3 + 25r^2 + 8r + 1)$
CPTS C^0	$(1 - r)^5$
CPTS C^4	$1 + \frac{80}{3}r^2 - 40r^3 + 15r^4 - \frac{8}{3}r^5 + 20r^2 \log r$
CPTS C_a^2	$1 - 30r^2 - 10r^3 + 45r^4 - 6r^5 - 60r^3 \log r$
CPTS C_b^2	$1 - 20r^2 + 80r^3 - 45r^4 - 16r^5 + 60r^4 \log r$

Tabelle 1.2: Basisfunktionen mit kompaktem Träger

1.2 Interpolation mit radialen Basisfunktionen

1.2.1 Einführung

Die **Interpolation mit radialen Basisfunktionen (RBF Interpolation)** behandelt folgende Aufgabenstellung:

Gegeben ist eine Menge $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^N$ von N Punkten in einem Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$. In diesen Punkten sind Funktionswerte $f_i = f(x_i) \in \mathbb{R}$ gegeben. Diese Punkte nennt man Interpolationszentren oder kurz Zentren. Die Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ist im Allgemeinen unbekannt, ihre Existenz wird jedoch für die Sinnhaftigkeit der Aufgabenstellung postuliert. Für eine weiterführende Analysis muss zudem eine gewisse Glattheit vorausgesetzt werden.

Gesucht wird eine approximierende Funktion $s : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ durch Interpolation. Auf der Menge der gegebenen Interpolationszentren \mathcal{X} wird für s die **Interpolationsbedingung**

$$s|_{\mathcal{X}} = f|_{\mathcal{X}} \quad (1.2)$$

gefordert.

Im Rahmen der Interpolation mit radialen Basisfunktionen soll s als endliche Linearkombination von Translationen radialer Basisfunktionen $\phi(\cdot)$ bezüglich der gegebenen Punkte $x_i \in \mathcal{X}$ bestimmt werden:

$$s(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \phi(\|x - x_i\|), \quad x \in \mathbb{R}^d, \lambda_i \in \mathbb{R}. \quad (1.3)$$

Durch die Interpolationsbedingung (1.2) ergibt sich für die gegebenen Punkte $x_i \in \mathcal{X}$:

$$s(x_i) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi(\|x_j - x_i\|) = f(x_i), \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.4)$$

Der Koeffizientenvektor $\underline{\lambda} = (\lambda_i)_{i=1}^N$ lässt sich somit durch das Lösen des linearen Gleichungssystems

$$A\underline{\lambda} = \underline{f} \quad (1.5)$$

bestimmen. Die rechte Seite $\underline{f} = (f_i)_{i=1}^N$ beinhaltet dabei die gegebenen Funktionswerte. Die Einträge der **Interpolationsmatrix** A bestimmen sich durch

$$A = (\phi(\|x_i - x_j\|))_{i,j=1}^N. \quad (1.6)$$

1.2.2 Existenz und Eindeutigkeit

Die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung $\underline{\lambda}$ für das Interpolationsproblem (1.4) entspricht also der eindeutigen Lösbarkeit des linearen Gleichungssystems (1.5). In diesem Abschnitt wird die Lösbarkeit dieses Gleichungssystems in Abhängigkeit von der gegebenen Basisfunktion ϕ betrachtet. Abschließend wird eine für eine Klasse von Basisfunktionen eindeutig lösbare Interpolationsaufgabe formuliert.

Definition 1.3. Für $d \in \mathbb{N}$ heißt $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}_0^d$ **Multiindex**. Zusätzlich definiert man den Betrag

$$|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_d$$

und die Fakultät

$$\alpha! = \alpha_1! \cdot \dots \cdot \alpha_d!$$

Für einen Punkt $x \in \mathbb{R}^d$ schreibt man

$$x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \dots x_d^{\alpha_d}$$

und für eine hinreichend oft differenzierbare Funktion $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ partielle Ableitungen als

$$D^\alpha u(x) := \left(\frac{\partial}{\partial x_1} \right)^{\alpha_1} \dots \left(\frac{\partial}{\partial x_d} \right)^{\alpha_d} u(x_1, \dots, x_d).$$

Definition 1.4. Für ein offenes Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ und $k \in \mathbb{N}_0$ bezeichnet $C^k(\Omega)$ den Raum der k -mal stetig differenzierbaren Funktionen mit der Norm

$$\|u\|_{C^k(\Omega)} := \sum_{|\alpha| \leq k} \sup_{x \in \Omega} |D^\alpha u(x)|.$$

Entsprechend definiert man den Raum der unendlich oft stetig differenzierbaren Funktionen als $C^\infty(\Omega)$.

Der Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger wird mit

$$C_0^\infty(\Omega) := \{u \in C^\infty(\Omega) : \text{supp } u \subset \Omega\}$$

bezeichnet.

Definition 1.5. Eine Funktion $g \in C^\infty(\mathbb{R}_+)$ heißt **vollständig monoton**, falls

$$(-1)^l \frac{d^l}{dx^l} g(x) \geq 0 \quad (1.7)$$

für alle $l \in \mathbb{N}_0$ und $x \in \mathbb{R}_+$ erfüllt ist.

Beispiel 1.1. $g(x) = (x+c^2)^{-1/2}$, $x > 0$, $c > 0$ ist eine vollständig monotone Funktion.

Die Grundlage zum Beweis der nachstehenden Sätze bildet das folgende Resultat:

Satz 1.6 (Bernstein-Widder Theorem [31]). Eine Funktion g ist genau dann vollständig monoton, wenn sie die Laplace-Transformation

$$g(x) = \int_0^\infty e^{-x\alpha} d\mu(\alpha), \quad x > 0$$

eines nichtnegativen Borelmaßes μ ist.

Satz 1.7. Sei $g : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ eine vollständig monotone Funktion und $g \neq \text{konstant}$. Dann ist für $\phi(x) = g(x^2)$ die in (1.6) definierte Matrix A für alle endlichen Punktmengen $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$, positiv definit und somit invertierbar.

Beweis. Sei $\underline{\lambda} = (\lambda_i)_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N$ mit $\underline{\lambda} \neq \underline{0}$. Weiters sei A die in (1.6) definierte Matrix. Dann ist

$$\underline{\lambda}^\top A \underline{\lambda} = \sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j g(\|x_i - x_j\|^2).$$

Dies entspricht nach dem Bernstein-Widder-Theorem

$$\underline{\lambda}^\top A \underline{\lambda} = \sum_{i,j=1}^N \int_0^\infty \lambda_i \lambda_j e^{-\alpha \|x_i - x_j\|^2} d\mu(\alpha)$$

und nach Vertauschen von Summation und Integration der quadratischen Form

$$\underline{\lambda}^\top A \underline{\lambda} = \int_0^\infty \sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j e^{-\alpha \|x_i - x_j\|^2} d\mu(\alpha).$$

Damit bleibt die positive Definitheit der Matrix $(e^{-\alpha \|x_i - x_j\|^2})_{i,j=1}^N$ zu zeigen. Betrachtet man die Fourier-Transformierte von $\varphi(r) := e^{-\alpha r^2}$, d.h.

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}\varphi)(\xi) &= (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i(r \cdot \xi) - \alpha r^2} dr \\ &= \pi^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{\xi^2}{4\alpha}} \alpha^{-\frac{d}{2}}, \quad \xi \geq 0, \end{aligned}$$

so ist für alle $\underline{\lambda} \in \mathbb{R}^d \neq \underline{0}$

$$\sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j e^{-\alpha \|x_i - x_j\|^2} = \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \left| \sum_{i=1}^N \lambda_i e^{i(x_i \cdot y)} \right|^2 e^{-\frac{\|y\|^2}{4\alpha}} \alpha^{-\frac{d}{2}} dy > 0$$

aufgrund der linearen Unabhängigkeit von Exponentialfunktionen mit verschiedenen Exponenten. \square

Satz 1.7 liefert die Invertierbarkeit von Interpolationsmatrizen für vollständig monotone Basisfunktionen. Als direkte Folgerung kann man die Invertierbarkeit für eine weitere Klasse von Basisfunktionen zeigen.

Satz 1.8 (Michelli [24]). Sei $g \in C^\infty [0, \infty)$ und g' vollständig monoton, aber nicht konstant. Sei weiters $g(0) \geq 0$. Dann ist die in (1.6) definierte Interpolationsmatrix A invertierbar für $\phi(r) = g(r^2)$.

Beweis. Nachdem $g \in C^\infty [0, \infty)$ ist, kann man $g(x)$ als

$$g(x) = g(0) + \int_0^x g'(t) dt$$

schreiben und erhält mit der Bernstein-Widder Darstellung von $g'(x)$ und dem Vertauschen der Integrale

$$g(x) = g(0) + \int_0^\infty \int_0^x e^{-\alpha t} dt d\mu(\alpha).$$

Sei $\underline{\lambda} \in \mathbb{R}^N$ der Gestalt, dass $\sum_{i=1}^N \lambda_i = 0$. Mit der obigen Darstellung von g' und dem bestimmten Integral

$$\int_0^x e^{-\alpha t} dt = -\frac{1}{\alpha} e^{-\alpha x} + \frac{1}{\alpha}$$

ergibt sich

$$\underline{\lambda}^\top A \underline{\lambda} = - \int_0^\infty \sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j \frac{1}{\alpha} \left(e^{-\alpha \|x_i - x_j\|^2} + \frac{1}{\alpha} \right) d\mu(\alpha)$$

und wegen $\sum_{i=1}^N \lambda_i = 0$

$$\underline{\lambda}^\top A \underline{\lambda} = - \int_0^\infty \sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha \|x_i - x_j\|^2} d\mu(\alpha) < 0.$$

Damit ist $\underline{\lambda}^\top A \underline{\lambda} < 0$ für alle $\underline{\lambda} \neq \underline{0}$. Demnach sind alle, bis auf einen, Eigenwerte von A negativ. Sonst könnte man zwei nichtnegative Eigenwerte γ und δ mit den zugehörigen orthonormalen Eigenvektoren \underline{c} und \underline{d} auswählen. Diese existieren, da die Matrix A symmetrisch ist. Damit gäbe es einen Vektor $\underline{\lambda} = a\underline{c} + b\underline{d}$ so, dass $\sum_{i=1}^N \lambda_i = 0$. Dieser Vektor erfüllt

$$0 > \underline{\lambda}^\top A \underline{\lambda} = a^2 \gamma + b^2 \delta \geq 0$$

wegen γ und δ nichtnegativ, und das ist ein Widerspruch. Demnach sind alle, bis auf einen, Eigenwerte von A negativ.

Die Spur der Matrix A ist jedoch nichtnegativ, der verbleibende Eigenwert muss demnach positiv sein. Somit ist $\det A \neq 0$, das Vorzeichen der Determinante ist $(-1)^{N-1}$. \square

Die Invertierbarkeit der Interpolationsmatrix A der Basisfunktion ϕ kann also durch die vollständige Monotonie von $\phi(\sqrt{r})$ gewährleistet werden. Mit Satz 1.8 kann diese Voraussetzung weiter abgeschwächt werden – bereits die vollständige Monotonie von $-\phi'(r)$ genügt für die Lösbarkeit der Interpolationsaufgabe. Im Folgenden wird diese Forderung noch weiter abgeschwächt. Dadurch kann zwar die positive Definitheit der Matrix nicht mehr für alle Vektoren, jedoch für Vektor-Unterräume, gewährleistet werden.

Definition 1.9. Der **Raum der Polynome** über dem \mathbb{R}^d vom Grad kleiner oder gleich k wird als \mathbb{P}_d^k bezeichnet.

Definition 1.10. Eine Funktion $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ heißt **bedingt positiv definit** (conditionally positive definite, cpd) von der Ordnung k in \mathbb{R}^d , falls für alle endlichen Teilmengen $\{x_i\}_{i=1}^N = \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$ die quadratische Form

$$\sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j F(x_i - x_j) \geq 0 \quad (1.8)$$

nichtnegativ für alle $\underline{\lambda} = \{\lambda_i\}_{i=1}^N$ ist, für die für alle Polynome $q \in \mathbb{P}_d^{k-1}$

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i q(x_i) = 0 \quad (1.9)$$

gilt. F heißt **streng bedingt positiv definit** von der Ordnung k , falls die quadratische Form (1.8) für alle $\underline{\lambda} \neq 0$ positiv ist.

Definition 1.11. Eine Menge $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$ heißt **unisolvant** für \mathbb{P}_d^{k-1} , falls, für Polynome $p \in \mathbb{P}_d^{k-1}$, aus $p(x) = 0$ für alle $x \in \mathcal{X}$ folgt, dass $p \equiv 0$.

Die in (1.3) gegebene interpolierende Funktion $s(x)$ muss in diesem Fall um einen polynomiellen Term erweitert werden und hat daher die Form

$$s(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i F(x - x_i) + p(x) \quad (1.10)$$

mit den Nebenbedingungen

$$0 = \sum_{i=1}^N \lambda_i x_i^\alpha, \quad |\alpha| < k, \quad (1.11)$$

wobei α einen Multiindex beschreibt und für den polynomiellen Term in (1.10) $p \in \mathbb{P}_d^{k-1}$ gilt. In den gegebenen Punkten $x_i \in \mathcal{X}$ ist weiterhin die Interpolationsbedingung (1.2) gefordert.

Damit lässt sich folgendes Lemma formulieren:

Lemma 1.12. Für bezüglich \mathbb{P}_d^{k-1} unisolvante Punktmengen \mathcal{X} ist für streng bedingt positiv definite Funktionen F die Interpolationsaufgabe (1.4) mit Interpolierenden der Form (1.10) eindeutig lösbar.

Beweis. Den Ausgangspunkt bilden ein Vektor $\underline{\lambda}$, der die Nebenbedingungen (1.11) erfüllt, und ein Vektor \underline{s} mit den Komponenten $s(x_j)$, $x_j \in \mathcal{X}$. Dann ergibt $\underline{s}^\top \underline{\lambda}$ eine quadratische Form mit dem Kern $F(x_i - x_j)$, da der polynomielle Term wegen $\sum_{j=1}^N p(x_j) \lambda_j = 0$ verschwindet. Diese Form ist wegen Definition 1.10 positiv, und damit ist $s(x_j) \neq 0$ für alle $x_j \in \mathcal{X}$, solange nicht alle Koeffizienten verschwinden. Der polynomielle Term ergibt sich eindeutig aus der linearen Unabhängigkeit von Polynomen unterschiedlichen Grades und der Unisolvanz der Menge \mathcal{X} bezüglich \mathbb{P}_d^{k-1} . Damit ist die Interpolierende eindeutig bestimmt. \square

Satz 1.13. Sei ϕ stetig und

$$\eta(t) := (-1)^k \frac{d^k}{dt^k} \phi(\sqrt{t}), \quad t > 0 \quad (1.12)$$

sei vollständig monoton, aber nicht konstant. Dann ist $\phi(\|\cdot\|)$ streng bedingt positiv definit von der Ordnung k in \mathbb{R}^d , $d \in \mathbb{N}$.

Beweis. Sei $\eta : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ die durch (1.12) definierte Funktion. Nach Satz 1.6 gilt die Darstellung

$$\eta(t) = \int_0^\infty e^{-\beta t} d\gamma(\beta), \quad t > 0.$$

Sei η_δ für $\delta > 0$ definiert als

$$\eta_\delta(t) := \int_\delta^\infty e^{-\beta t} d\gamma(\beta), \quad t > 0.$$

Für $\varepsilon > 0$ ergibt die k -malige Integration beider Seiten von ε bis $t = r^2$ für geeignete Polynome $p_{\varepsilon,\delta} \in \mathbb{P}_1^{k-1}$ und $q_{\varepsilon,\delta} \in \mathbb{P}_1^{k-1}$ nach der Multiplikation beider Seiten mit $(-1)^k$

$$\phi_{\varepsilon,\delta}(r) = p_{\varepsilon,\delta}(r^2) + \int_\delta^\infty \left(e^{-\beta r^2} - q_{\varepsilon,\delta}(\beta r^2) \right) \frac{1}{\beta^k} d\gamma(\beta).$$

Das Integral existiert trotz der Terme β^{-k} wegen $\delta > 0$.

Der Vektor $\underline{\lambda} \in \mathbb{R}^N$ erfülle die Bedingung (1.11). So erhält man die folgende Darstellung für eine quadratische Form:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \lambda_i \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi_{\varepsilon,\delta}(\|x_i - x_j\|) &= \sum_{i=1}^N \lambda_i \sum_{j=1}^N \lambda_j p_{\varepsilon,\delta}(\|x_i - x_j\|^2) + \\ &\int_\delta^\infty \sum_{i=1}^N \lambda_i \sum_{j=1}^N \lambda_j \left(e^{-\beta \|x_i - x_j\|^2} - q_{\varepsilon,\delta}(\beta \|x_i - x_j\|^2) \right) \frac{1}{\beta^k} d\gamma(\beta). \end{aligned}$$

Nachdem jeder polynomielle Term über $(\lambda_i)_{i=1}^N$ vom Grad kleiner als k verschwindet, verschwinden wegen

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j p_{\varepsilon,\delta}(\|x_i - x_j\|^2) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j p_{\varepsilon,\delta}(\|x_i\|^2 - 2x_i \cdot x_j + \|x_j\|^2)$$

und

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j \|x_i - x_j\|^{2j} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j (\|x_i\|^2 - 2x_i \cdot x_j + \|x_j\|^2)^j$$

auch die doppelten Summen über $p_{\varepsilon,\delta}$ und $q_{\varepsilon,\delta}$. Dies ergibt

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j \phi_{\varepsilon,\delta}(\|x_i - x_j\|) = \int_\delta^\infty \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j e^{-\beta \|x_i - x_j\|^2} \right) \frac{1}{\beta^k} d\gamma(\beta).$$

Betrachtet man die Taylorreihenentwicklung der Exponentialfunktion um den Nullpunkt,

$$e^{-\beta x^2} = \sum_{k=0}^\infty \frac{(-\beta x^2)^k}{k!},$$

so erkennt man, dass das Integral auch für $\delta \rightarrow 0$ definiert ist. Nachdem die rechte Seite bereits unabhängig von ε ist, gilt für $\delta, \varepsilon \rightarrow 0$

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j \phi(\|x_i - x_j\|) = \int_\delta^\infty \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j e^{-\beta \|x_i - x_j\|^2} \right) \frac{1}{\beta^k} d\gamma(\beta) > 0.$$

□

Aus Satz 1.13 folgt die eindeutige Lösbarkeit der folgenden Interpolationsaufgabe:
 Sei ϕ eine streng bedingt positiv definite Funktion der Ordnung k und die Punktmenge $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^N \subset \mathbb{R}^d$ bezüglich \mathbb{P}_d^{k-1} unisolvent. Auf der Menge \mathcal{X} seien die Funktionswerte $f_i = f(x_i)$ gegeben. Weiters seien die Polynome $\{p_j\}_{j=1}^M$ eine Basis von \mathbb{P}_d^k und α ein Multiindex. Dann ist die Interpolierende

$$s(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \phi(\|x - x_i\|) + \sum_{j=1}^M \pi_j p_j(x) \quad (1.13)$$

durch die Interpolationsbedingungen

$$s(x_i) = f(x_i), \quad \text{für alle } x_i \in \mathcal{X} \quad (1.14)$$

und die Nebenbedingungen

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i x_i^\alpha = 0, \quad |\alpha| < k, \quad (1.15)$$

eindeutig bestimmt.

Die Interpolationskoeffizienten $\underline{\lambda}$ und $\underline{\pi}$ bestimmen sich durch die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \lambda_i \phi(\|x_i - x_k\|) + \sum_{j=1}^M \pi_j p_j(x_k) &= f(x_k), & 1 \leq k \leq N, \\ \sum_{i=1}^N \lambda_i p_l(x_i) &= 0, & 1 \leq l \leq M, \end{aligned}$$

oder in Kurzschreibweise

$$\begin{pmatrix} \Phi & \Pi \\ \Pi^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\lambda} \\ \underline{\pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{f} \\ \underline{0} \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

1.2.3 Konvergenzanalyse

Mit den Ergebnissen des vorherigen Abschnittes lässt sich die Existenz und Eindeutigkeit der Interpolierenden (1.13) nachweisen. In diesem Abschnitt werden zusammenfassend grundlegende Ergebnisse zur Güte der Interpolierenden nach [4, 30] genannt. Dort findet sich eine ausführlichere Erläuterung mit den zugehörigen Beweisen sowie Verweise auf weiterführende Quellen.

Als **Rand** einer offenen Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ definiert man

$$\Gamma := \partial\Omega = \bar{\Omega} \cap (\mathbb{R}^d \setminus \Omega).$$

Definition 1.14. Man bezeichnet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ für $d \geq 2$ als **Lipschitz-Gebiet**, falls der Rand Γ bezüglich einer beliebigen Zerlegung $\Gamma = \bigcup_{i=1}^p \Gamma_i$ für offene Randstücke Γ_i und offene zugehörige Parameterbereiche \mathcal{T}_i stückweise durch eine Lipschitz-stetige Funktion γ_i mit den zugehörigen Lipschitz-Konstanten $L_i \in \mathbb{R}$ dargestellt werden kann, also

$$\Gamma_i := \{x \in \mathbb{R}^d : x = \gamma_i(\chi) \text{ für } \chi \in \mathcal{T}_i \subset \mathbb{R}^{d-1}\}$$

mit

$$|\gamma_i(\chi) - \gamma_i(\zeta)| \leq L_i |\chi - \zeta| \quad \text{für alle } \chi, \zeta \in \mathcal{T}_i, i = 1, \dots, p.$$

Definition 1.15. Als $L_p(\Omega)$ bezeichnet man den Raum der Äquivalenzklassen aller auf Ω definierten messbaren Funktionen, deren p -te Potenz für $p \in [1, \infty)$ integrierbar ist. Auf $L_p(\Omega)$ ist mittels

$$\|f\|_{L_p(\Omega)} := \left(\int_{\Omega} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}$$

eine Norm definiert. Der Raum der auf Ω messbaren und fast überall beschränkten Funktionen wird mit $L_{\infty}(\Omega)$ bezeichnet. Auf $L_{\infty}(\Omega)$ ist mittels

$$\|f\|_{L_{\infty}(\Omega)} := \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} \{|u(x)|\} := \inf_{K \subset \Omega, \mu(K)=0} \sup_{x \in \Omega \setminus K} |u(x)|$$

eine Norm definiert.

Die Räume $L_p(\Omega)$ sind für alle $1 \leq p \leq \infty$ Banachräume. Auf dem Raum $L_2(\Omega)$ ist mittels

$$\langle f, g \rangle_{L_2(\Omega)} := \int_{\Omega} f(x)g(x)dx$$

ein Skalarprodukt definiert, der $L_2(\Omega)$ ist damit ein Hilbertraum.

Den Raum der **lokal integrierbaren Funktionen** $L_1^{\text{loc}}(\Omega)$ ist der Raum der bezüglich jeder abgeschlossenen und beschränkten Teilmenge von Ω integrierbaren Funktionen.

Definition 1.16. Eine Funktion $u \in L_1^{\text{loc}}(\Omega)$ besitzt eine **verallgemeinerte partielle Ableitung** nach x_i , wenn eine Funktion $v \in L_1^{\text{loc}}(\Omega)$ existiert, sodass

$$\int_{\Omega} v(x)\varphi(x)dx = - \int_{\Omega} u(x) \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi(x)dx \quad \text{für alle } \varphi \in C_0^{\infty}(\Omega) \quad (1.17)$$

erfüllt ist. Die verallgemeinerte Ableitung wird mit $\frac{\partial}{\partial x_i} u(x) := v(x)$ bezeichnet. Die rekursive Anwendung von (1.17) ermöglicht die Definition einer verallgemeinerten Ableitung $D^{\alpha}u(x)$ in $L_1^{\text{loc}}(\Omega)$ durch

$$\int_{\Omega} [D^{\alpha}u(x)]\varphi(x)dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} u(x)D^{\alpha}\varphi(x)dx \quad \text{für alle } \varphi \in C_0^{\infty}(\Omega).$$

Für $k \in \mathbb{N}_0$ definiert

$$\|u\|_{W_p^k(\Omega)} := \begin{cases} \left\{ \sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha u\|_{L_p(\Omega)}^p \right\}^{1/p} & \text{für } 1 \leq p < \infty, \\ \max_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha u\|_{L_\infty(\Omega)} & \text{für } p = \infty \end{cases}$$

eine Norm. Die Vervollständigung von $C^\infty(\Omega)$ bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{W_p^k(\Omega)}$ erklärt den **Sobolev-Raum**

$$W_p^k(\Omega) := \overline{C^\infty(\Omega)}^{\|\cdot\|_{W_p^k(\Omega)}}.$$

Der Raum der unendlich oft stetig differenzierbaren Testfunktionen mit kompaktem Träger sei bezeichnet durch $\mathcal{D}(\Omega) := C_0^\infty(\Omega)$.

Definition 1.17. Eine **Distribution** ist eine komplexwertige stetige Linearform T über $\mathcal{D}(\Omega)$. T heißt dabei stetig auf $\mathcal{D}(\Omega)$, falls für eine in $\mathcal{D}(\Omega)$ konvergente Funktionenfolge $\varphi_k \rightarrow \varphi$ stets $T(\varphi_k) \rightarrow T(\varphi)$ folgt. Die Gesamtheit aller Distributionen wird mit $\mathcal{D}'(\Omega)$ bezeichnet.

Distributionen, die für $u \in L_1^{\text{loc}}(\Omega)$ gemäß

$$T_u(\varphi) := \int_{\Omega} u(x)\varphi(x)dx, \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$$

durch Funktionen induziert werden, heißen **reguläre Distributionen**. Nicht reguläre Distributionen heißen **singulär**.

Beispiel 1.2. Die δ - oder **Dirac-Distribution** ist für $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$ und $x_0 \in \Omega$ durch

$$\delta_{x_0} = \varphi(x_0)$$

definiert. Die Dirac-Distribution ist singulär.

Die **distributionelle Ableitung** $D^\alpha T_u \in \mathcal{D}'(\Omega)$ wird für eine Distribution $T_u \in \mathcal{D}'(\Omega)$ durch

$$(D^\alpha T_u)(\varphi) = (-1)^{|\alpha|} T_u(D^\alpha \varphi)$$

für $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$ analog zur verallgemeinerten Ableitung (1.17) definiert.

Bemerkung 1.1. In der zu Grunde liegenden Literatur ([4, 30]) werden die im Folgenden behandelten Resultate für Funktionen aus dem, unter Verwendung der distributionellen Ableitung definierten, Funktionenraum

$$D^{-k}L_2(\mathbb{R}^d) := \left\{ f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \mid D^\alpha f \in L_2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

erzielt. Über einem Lipschitz-Gebiet Ω lassen sich jedoch die Räume $D^{-k}L_2(\Omega)$ mit den Sobolev-Räumen $W_2^k(\Omega)$ identifizieren ([30, Kap. 10]).

Der folgende Satz erlaubt unter gewissen Bedingungen die Einbettung des Raumes $W_2^k(\mathbb{R}^d)$ in den Raum der stetigen Funktionen $C(\mathbb{R}^d)$.

Satz 1.18 (Sobolev'scher Einbettungssatz). *Seien $d > 0$, $p \geq 0$ und k natürliche Zahlen, die die folgende Ungleichung erfüllen*

$$k > p + d/2.$$

Falls die verallgemeinerten Ableitungen der Ordnung kleiner oder gleich k einer Funktion $f : \tilde{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ über einem offenen, beschränkten Gebiet $\tilde{\Omega} \subset \mathbb{R}^d$ lokal quadratintegrierbar sind, existiert ein $f_0 \in C^p(\tilde{\Omega})$ derart, dass $f = f_0$ fast überall auf $\tilde{\Omega}$ gilt.

Beweis. Siehe [27, Theorem 7.25]. □

Über dem Funktionenraum $W_2^k(\mathbb{R}^d)$ sei das semi-innere Produkt

$$\langle f, g \rangle_{W_2^k(\mathbb{R}^d),*} = \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{|\alpha|=k} \frac{\alpha!}{k!} D^\alpha f(x) D^\alpha g(x) dx, \quad \text{für } f, g \in W_2^k(\mathbb{R}^d)$$

mit der von diesem semi-inneren Produkt induzierten Halbnorm

$$|f|_{W_2^k(\mathbb{R}^d),*}^2 := \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\alpha!}{k!} \sum_{|\alpha|=k} |D^\alpha f(x)|^2 dx, \quad (1.18)$$

definiert. Der Kern dieses semi-inneren Produktes sei mit $K = \mathbb{P}_d^{k-1}$ bezeichnet.

In weiterer Folge sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Lipschitz-Gebiet und $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^N$ sei eine bezüglich K unisolvente Teilmenge von Ω . Weiters sei die Funktion $g \in W_2^k(\Omega)$ mit $g(x_i) = 0$ für $x_i \in \hat{\mathcal{X}}$, mit einer bezüglich K unisolventen Teilmenge $\hat{\mathcal{X}} \subset \mathcal{X}$ in der Halbnorm $|\cdot|_{W_2^k(\Omega),*}$ beschränkt, d.h.

$$|g(x)| \leq c |g|_{W_2^k(\Omega),*}, \quad \text{für } c \in \mathbb{R}.$$

Unter diesen Voraussetzungen lässt sich ein Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle_{W_2^k(\Omega),*} = \langle f, g \rangle_{W_2^k(\Omega),*} + \sum_{x_i \in \hat{\mathcal{X}}} f(x_i) g(x_i)$$

und die von diesem Skalarprodukt induzierte Norm $\|\cdot\|_{W_2^k(\Omega),*} = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle_{W_2^k(\Omega),*}}$ definieren.

In weiterer Folge bezeichne $|f|_{k,\Omega}$ die Halbnorm $|f|_{W_2^k(\Omega),*}$, sowie in vereinfachter Notation $|f|_k := |f|_{W_2^k(\mathbb{R}^d),*}$.

Zwei wichtige Resultate zur Abschätzung der hier eingeführten Normen und Halbnormen liefern die folgenden beiden Sätze.

Satz 1.19 (Sobolev Ungleichung [4]). *Sei Ω ein Lipschitz-Gebiet im \mathbb{R}^d und $k > d/2$ eine natürliche Zahl. Dann existiert eine Konstante C , sodass für alle $f \in W_2^k(\mathbb{R}^d)$ die Ungleichung*

$$|f(x)| \leq C \sum_{j=1}^k |f|_{k,\Omega}$$

punktweise auf dem Gebiet Ω gilt. Die Konstante C hängt dabei nur von Ω , d und k ab.

Satz 1.20 (Bramble-Hilbert Lemma [4]). Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Lipschitz-Gebiet. Weiters sei Ω vollständig in einer Kugel vom Radius ρ enthalten. Sei F ein lineares Funktional über dem Sobolev-Raum $W_2^k(\Omega)$ derart, dass $F(q) = 0$ für alle $q \in \mathbb{P}_d^{k-1}$. Es gelte die Ungleichung

$$|F(u)| \leq C_1 \left(\sum_{j=1}^k \rho^{j-d/2} |u|_{j,\Omega} \right)$$

für eine bezüglich der Halbnormen $|u|_{j,\Omega}$, $j \leq k$ beschränkte Funktion u mit einer von u und ρ unabhängigen Konstanten C_1 . Dann gilt

$$|F(u)| \leq C_2 \left(\rho^{k-d/2} |u|_{k,\Omega} \right)$$

mit einer von u und ρ unabhängigen Konstanten C_2 .

Als erste Abschätzung der Interpolationsgüte lässt sich folgende Aussage formulieren.

Satz 1.21. Gegeben sei eine endliche Menge von Interpolationszentren $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^N$ und die jeweiligen Funktionswerte $f(x_i)$. Weiters sei die Funktion ϕ stetig und bedingt positiv definit, das Gebiet Ω sei ein Lipschitz-Gebiet. $K = \mathbb{P}_d^{l-1}$ sei der l -dimensionale Kern des von ϕ induzierten semi-inneren Produktes und \mathcal{X} enthalte eine K -unisolvante Teilmenge. Dann gibt es eine eindeutig bestimmte Funktion

$$s(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \phi(x - x_i) + p(x), \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

mit $p \in K$ und $\sum_{i=1}^N \lambda_i q(x_i)$ für alle $q \in K$ derart, sodass $s(x_i) = f(x_i)$ und $|s|_{l,\Omega} \leq |g|_{l,\Omega}$ für alle $g \in W_2^l(\Omega)$, die die gegebenen Daten interpolieren.

Beweis. Siehe [4, Prop. 5.2]. □

Satz 1.21 garantiert die Existenz einer optimalen Interpolierenden bezüglich der Halbnorm (1.18), lässt aber keine direkte Abschätzung des Interpolationsfehlers zu.

Definition 1.22. Für das Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und die gegebene Punktmenge $\mathcal{X} \subset \Omega$ bezeichnet

$$h := \sup_{x \in \Omega} \min_{x_i \in \mathcal{X}} \|x - x_i\|$$

die **Interpolationsschrittweite**.

Gesucht ist eine Abschätzung des Interpolationsfehlers in Abhängigkeit von h als **Konvergenzordnung** der Form $O(h^\mu)$, $\mu \in \mathbb{R}$.

Satz 1.23. Sei Ω ein Lipschitz-Gebiet und sei für $h \in (0, h_1)$, $0 < h_1 < 1$ beliebig, $\mathcal{X}_h \subset \Omega$ eine endliche Menge mit

$$\sup_{x \in \Omega} \inf_{x_i \in \mathcal{X}_h} \|x - x_i\| \leq h.$$

Dann gibt es eine Interpolierende s von $W_2^k(\mathbb{R}^d)$ auf Werte auf \mathcal{X}_h mit den Eigenschaften aus Satz 1.21, die für alle $f \in W_2^k(\Omega) \cap L_p(\Omega)$ und alle $p \geq 2$

$$\|f - s\|_{W_p^k(\Omega)} \leq Ch^{k - \frac{n}{2} + \frac{n}{p}} |f|_k$$

erfüllt. Die Konstante C hängt dabei von n, k, p und Ω ab, nicht jedoch von f, h oder \mathcal{X}_h .

Beweis. Siehe [4, Theorem 5.5]. □

Als asymptotische Konvergenzordnung für $p \rightarrow \infty$ ergibt sich damit $O(h^{k - \frac{n}{2}})$ und $O(h^k)$ im Fall $p = 2$.

Satz 1.24. *Seien die Voraussetzungen von Satz 1.23 erfüllt und gelte zusätzlich $f \in W_2^{-2k}(\mathbb{R}^d)$ sowie $\text{supp } D^\alpha f \subset \Omega$ für $|\alpha| = 2k$. Dann gilt für hinreichend kleine h*

$$\|f - s\|_{W_p^k(\Omega)} \leq Ch^{2k - \frac{n}{2} + \frac{n}{p}} |f|_{2k}.$$

Beweis. Siehe [4, Theorem. 5.8]. □

Durch zusätzliche Einschränkungen für f verbessert sich die asymptotische Konvergenzordnung für $p \rightarrow \infty$ auf $O(h^{2k - \frac{n}{2}})$. Im Fall $p = 2$ ergibt sich $O(h^k)$.

1.2.4 Kondition der Systemmatrix

Abschließend zur Einführung der Interpolation mit radialen Basisfunktionen werden hier Ergebnisse zur Abschätzung der Konditionszahl $\kappa(\Phi)$ der bei der Bestimmung der Interpolierenden auftretenden Interpolationsmatrix Φ nach [4] gegeben.

Die **spektrale Konditionszahl** $\kappa_2(A)$ einer regulären Matrix A ist durch

$$\kappa_2(A) := \frac{\|A\|_2}{\|A^{-1}\|_2}$$

gegeben, wobei $\|\cdot\|_2$ die Spektralnorm

$$\|A\|_2 = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \lambda_{\max}(A^\top A)$$

mit der Euklidischen Vektornorm $\|\cdot\|_2$ bezeichnet. Dabei ist $\lambda_{\max}(A^\top A)$ der betragsmäßig größte Eigenwert von $A^\top A$.

In weiterer Folge bezeichne $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^N$ die gegebene Menge der Interpolationszentren. Als **Separationsradius** sei

$$q := \frac{1}{2} \min_{i \neq j} \|x_i - x_j\|, \quad i, j = 1, \dots, N,$$

bezeichnet, der **maximale Abstand** zweier Interpolationszentren mit

$$\hat{q} := \max_{i \neq j} \|x_i - x_j\|, \quad i, j = 1, \dots, N.$$

Für die Basisfunktion $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$ kann man als obere Schranke für die Spektralnorm der Interpolationsmatrix A

$$\|\Phi\|_2 \leq q^{-1} e^{\frac{4nc}{q}}$$

angeben ([4, S. 141]). Daraus folgt für die Konditionszahl $\kappa_2(\Phi) \rightarrow \infty$ für $q \rightarrow 0$.

Für die Spektralnorm der inversen Matrix lässt sich mit einer reellen Konstanten C

$$\|\Phi^{-1}\|_2 \geq C \frac{1}{N} e^{\frac{c}{q} [(\frac{1}{2}dN)^{1/d} - \frac{1}{2}]}$$

als asymptotische Schranke für $N \rightarrow \infty$ angeben ([4, Theorem 5.12]).

Für eine Klasse von Basisfunktionen lässt sich die Konditionszahl der Interpolationsmatrix allein durch die Anzahl der gegebenen Interpolationszentren nach unten abschätzen.

Satz 1.25. *Falls $-\phi$ bedingt positiv definit der Ordnung eins und $\phi(0) \geq 0$ ist, dann ist die Konditionszahl der Interpolationsmatrix nach unten durch $|\mathcal{X}| - 1$ beschränkt.*

Beweis. Siehe [4, Theorem 5.13]. □

2 Effiziente Verfahren zur Bestimmung der Interpolierenden mit radialen Basisfunktionen

Die Bestimmung der in Kapitel 1 eingeführten Interpolierenden (1.13) unter den Nebenbedingungen (1.14) und (1.15) entspricht der Lösung des linearen Gleichungssystems (1.16). Die direkte Lösung des Gleichungssystems eignet sich jedoch nur für eine kleine Zahl N an gegebenen Interpolationszentren. Für Basisfunktionen mit globalem Träger ist die Systemmatrix voll besetzt, direkte Lösungsverfahren benötigen demnach $O(N^3)$ Rechenschritte (z. B. [20, 23]), der Speicherbedarf liegt bei $O(N^2)$. Die Systemmatrix ist nach den Ergebnissen aus Abschnitt 1.2.4 schlecht konditioniert. Die direkte Auswertung von (1.13) für M auszuwertende Punkte benötigt $O(N \cdot M)$ Rechenschritte.

In Abschnitt 2.1 wird ein iteratives Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems für eine bedingt positive Basisfunktion der Ordnung 1 nach [15] beschrieben, das die approximierte Lösung des Gleichungssystems mit einer geforderten Genauigkeit ϵ in $O(N \log N)$ Schritten bestimmt. Um dieses Laufzeitverhalten zu erreichen, wird ein Verfahren zur schnellen Auswertung des im Algorithmus auftretenden Matrix-Vektor Produkts benötigt. In Abschnitt 2.2 wird dafür eine Multipolmethode nach [3] und [8] beschrieben. Diese Methode ermöglicht auch eine schnelle Auswertung von (1.10).

2.1 Iteratives Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems

In diesem Abschnitt wird nach [15] ein iteratives Verfahren zur Lösung des linearen Gleichungssystems (1.16) für die Basisfunktion

$$\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}, \quad r \in \mathbb{R}^3, c \in \mathbb{R}$$

beschrieben. Dabei handelt es sich um ein Krylov-Unterraum-Verfahren. Zunächst werden Krylov-Unterraum-Verfahren nach [23] kurz eingeführt. Danach werden die Grundlagen des Verfahrens beschrieben und der Lösungsalgorithmus formuliert. Abschließend werden die Schritte des Verfahrens analysiert. Für eine Erweiterung des Lösungsverfahrens auf weitere bedingt positiv definite Basisfunktionen sei z. B. auf [16] verwiesen. Hinweise zur Implementierung des Verfahrens finden sich z. B. in [17].

2.1.1 Einführung

Betrachtet werden Systeme der Form

$$A\underline{x} = \underline{b} \quad (2.1)$$

mit einer regulären Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und der rechten Seite $\underline{b} \in \mathbb{R}^n$.

Definition 2.1. Eine **Projektionsmethode** zur Lösung der Gleichung (2.1) ist ein Verfahren zur Berechnung von Näherungslösungen $\underline{x}_m \in \underline{x}_0 + K_M$ unter Berücksichtigung der Bedingung

$$(\underline{b} - A\underline{x}_m) \perp L_m, \quad (2.2)$$

wobei $\underline{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ beliebig ist und K_m und L_m m -dimensionale Unterräume des \mathbb{R}^n repräsentieren.

Die Orthogonalität \perp ist mit einem Skalarprodukt

$$\underline{x} \perp \underline{y} \Leftrightarrow \langle \underline{x}, \underline{y} \rangle = 0, \quad \text{für } \underline{x} \in K_m, \underline{y} \in L_m,$$

definiert.

Gilt $K_m = L_m$, so besagt (2.2), dass der Residuenvektor $\underline{r}_m = \underline{b} - A\underline{x}_m$ orthogonal auf K_m steht. In diesem Fall liegt eine **orthogonale Projektionsmethode** vor und (2.2) heißt Galerkin-Bedingung. Falls $K_m \neq L_m$ gilt, liegt eine **schiefe Projektionsmethode** vor und (2.2) heißt Petrov-Galerkin-Bedingung.

Definition 2.2. Eine **Krylov-Unterraum-Methode** ist eine Projektionsmethode zur Lösung der Gleichung (2.1), bei der K_m den Krylov-Unterraum

$$K_m = K_m(A, \underline{r}_0) = \text{span} \{ \underline{r}_0, A\underline{r}_0, \dots, A^{m-1}\underline{r}_0 \}$$

mit $\underline{r}_0 = \underline{b} - A\underline{x}_0$ darstellt.

2.1.2 Beschreibung des Verfahrens

Das in diesem Abschnitt beschriebene Verfahren eignet sich zur näherungsweise Bestimmung der Lösung des Gleichungssystems (1.16) für die Basisfunktion

$$\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}, \quad r \in \mathbb{R}^3, c \in \mathbb{R}. \quad (2.3)$$

Bei der Basisfunktion (2.3) handelt es sich um eine bedingt positiv definite Funktion der Ordnung 1, es genügt demnach, in (1.13) Polynome vom Grad 0 – also Konstanten – zu berücksichtigen. Zur Bestimmung der Koeffizienten der Interpolierenden

$$s(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \sqrt{\|x - x_i\|^2 + c^2} + \alpha, \quad x \in \mathbb{R}^3 \quad (2.4)$$

mit den gegebenen Interpolationszentren $\{x_i\}_{i=1}^N$ und den zugehörigen Funktionswerten $f_i = f(x_i)$, sowie dem gegebenen reellen Parameter c , ist somit das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \Phi & \underline{1} \\ \underline{1}^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\lambda} \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{f} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

zu lösen.

In weiterer Folge bezeichne X den linearen Funktionenraum von Funktionen $s : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ der Form (2.4) mit den gegebenen Interpolationszentren $\{x_i\}_{i=1}^N$, wobei die Koeffizienten $\lambda_i, i = 1, \dots, N$ die Nebenbedingung

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i = 0$$

erfüllen.

Die Grundlage für das Lösungsverfahren bildet das von ϕ induzierte **semi-innere Produkt**

$$\langle s, t \rangle_\phi = -\underline{\lambda}^\top \Phi \underline{\mu} \quad (2.6)$$

für $s, t \in X$ mit $s(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \phi(\|x - x_i\|) + \alpha$ und $t(x) = \sum_{i=1}^N \mu_i \phi(\|x - x_i\|) + \beta$. Dabei bezeichne Φ den ϕ zugeordneten Kern.

Das so definierte semi-innere Produkt ist äquivalent zum semi-inneren Produkt (1.2.3). Eine Herleitung dazu findet sich in [4, Kap. 5], weiterführende Betrachtungen z. B. in [30].

Das semi-innere Produkt $\langle \cdot, \cdot \rangle_\phi$ induziert eine **Halbnorm**

$$|s|_\phi = \langle s, s \rangle_\phi^{1/2} = \left(-\underline{\lambda}^\top \Phi \underline{\lambda} \right)^{1/2}.$$

Für die Berechnung des semi-inneren Produktes $\langle s, t \rangle_\phi$ muss, sofern die Funktionswerte von s oder t in den gegebenen Interpolationszentren bekannt sind, kein Matrix-Vektor-Produkt berechnet werden:

$$\begin{aligned} \langle s, t \rangle_\phi &= -\underline{\lambda}^\top \Phi \underline{\mu} \\ &= -\sum_{i=1}^N \lambda_i \left\{ \sum_{j=1}^N \phi(\|x_i - x_j\|) \mu_j \right\} \\ &= -\sum_{i=1}^N \lambda_i \left\{ \sum_{j=1}^N \mu_j \phi(\|x_i - x_j\|) + \beta x_i \right\} \\ &= -\sum_{i=1}^N \lambda_i t(x_i). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Wegen der Symmetrie $\langle s, t \rangle_\phi = \langle t, s \rangle_\phi$ gilt

$$-\sum_{i=1}^N \lambda_i t(x_i) = -\sum_{i=1}^N \mu_i s(x_i).$$

Daraus folgt direkt, dass, falls $s^* \in X$ die Interpolierende für die Funktion f mit den gegebenen Funktionswerten $f_i = f(x_i)$ ist, gilt:

$$\langle s, s^* \rangle_\phi = -\sum_{i=1}^N \lambda_i s^*(x_i) = -\sum_{i=1}^N \lambda_i f_i.$$

Zur Beschreibung der wesentlichen Eigenschaften des Lösungsverfahrens bezeichne s^* die gesuchte Interpolierende und k die jeweilige Iterationszahl im iterativen Verfahren. Dabei ist $s^{(k)}$ die Interpolierende am Beginn der k -ten Iteration

$$s(x)^{(k)} = \sum_{i=1}^N \lambda_i^{(k)} \phi(\|x - x_i\|) + \alpha^{(k)},$$

das **Residuum** am Beginn der k -ten Iteration ist demnach

$$r_i^{(k)} = f_i - s^{(k)}(x_i), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.8)$$

Das Verfahren wird abgebrochen, wenn das **Abbruchkriterium**

$$\|r^{(k)}\|_\infty \leq \varepsilon \quad (2.9)$$

erfüllt ist, wobei $\varepsilon \geq 0$ die gegebene geforderte Genauigkeit der Lösung bezeichnet.

Für die im Algorithmus definierten Suchrichtungen $d^{(k)} \in X, k = 1, 2, \dots$ wird das **Konjugiertenkriterium**

$$\langle d^{(k)}, d^{(k-1)} \rangle_\phi = 0, \quad \text{für } k \geq 2 \quad (2.10)$$

sowie die Orthogonalität

$$\langle s^* - s^{(k)}, d^{(k)} \rangle_\phi = 0, \quad \text{für } k \geq 1 \quad (2.11)$$

gefordert.

Entscheidend für die **Krylov-Unterraum** Eigenschaften des Verfahrens ist der in weiterer Folge beschriebene **lineare Operator** $A : X \rightarrow X$. A wird derart gewählt, dass für alle k die Suchrichtung $d^{(k)}$ im von den Funktionen $A^l s^*, l = 1, \dots, k$ aufgespannten Unterraum von X liegt. Weiters leistet A eine **Vorkonditionierung**. A ist dabei eine Approximation des optimalen Vorkonditionierungsoperators A^{opt} . Dieser Operator A^{opt} kann aus den Lösungen der Lagrange-Interpolationsaufgaben

$$\hat{u}_j(x) = \sum_{i=1}^N \zeta_{j,i} \phi(x - x_i) + \beta, \quad \text{für } x \in \Omega, j = 1, \dots, N, \quad (2.12)$$

unter den Lagrange-Bedingungen

$$u_j(x_i) = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (2.13)$$

wobei δ_{ij} das **Kronecker-Delta**

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

bezeichnet, konstruiert werden. Die Lösung der Interpolationsaufgaben (2.12) unter den Lagrange-Bedingungen (2.13) entspricht jedoch der Lösung des ursprünglichen Systems (1.16).

Zur Konstruktion von A werden die Funktionen u_j , $j = 1, \dots, N$ durch das Lösen der Interpolationsaufgaben auf höchstens q Punkte enthaltenden Teilmengen der Menge der gegebenen Interpolationszentren \mathcal{X} approximiert, wobei $q \ll N$ gilt. Diese Teilmengen werden \mathcal{L} -Sets genannt.

2.1.3 Algorithmische Formulierung des Lösungsverfahrens

SCHRITT 1: Die Interpolationszentren x_i , $i = 1, \dots, N$ sowie die zugehörigen Funktionswerte f_i werden angegeben. Ein ganzzahliger Wert $q \geq 2$ wird zur Bestimmung des linearen Krylov-Unterraum Operators gewählt. Typische Werte für q sind 30 bis 50.

SCHRITT 2: Die Approximierende $s^{(1)}$ wird mit den Parametern

$$\lambda_j^{(1)} = 0, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.14)$$

$$\alpha^{(1)} = \frac{1}{2} (\min(f_1, \dots, f_N) + \max(f_1, \dots, f_N)) \quad (2.15)$$

initialisiert. Weiters wird das initiale Residuum durch

$$r_i^{(1)} = f_i - s^{(1)}(x_i) = f_i - \alpha^{(1)}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.16)$$

bestimmt. Falls (2.9) erfüllt ist, bricht der Algorithmus ab, ansonsten bereiten die Schritte 3 bis 5 den iterativen Prozess vor.

Bemerkung 2.1. *Ist ein guter Schätzer \hat{s} für die gesuchte Interpolierende bekannt, kann dieser für die Berechnung verwendet werden. Dafür werden die rechten Seiten f_i , $i = 1, \dots, N$ durch $f_i - \hat{s}(x_i)$, $i = 1, \dots, N$ ersetzt. Der Algorithmus bestimmt dann eine Korrektur für den Schätzer \hat{s} .*

SCHRITT 3: Eine zufällige Permutation $\sigma(i)$, $i = 1, \dots, N$ der Indizes $\{1, \dots, N\}$ wird erzeugt, die Zählvariable m wird mit $m = 1$ initialisiert.

SCHRITT 4: Die Variable l wird auf $l = \sigma(m)$ gesetzt. Σ_l bezeichne die Menge der Indizes $\{\sigma(m), \dots, \sigma(N)\}$.

Falls $N - m + 1 > q$, wird die Punktmenge \mathcal{L}_l aus q Punkten derart zusammengestellt, dass $\|x_l - x_i\|_{i \in \mathcal{L}_l} \leq \|x_l - x_j\|_{j \in \Sigma_l \setminus \mathcal{L}_l}$ gilt. Ansonsten, falls also $n - m + 1 \leq q$ gilt, wird $\mathcal{L}_l = \{\sigma(m), \dots, \sigma(n)\}$ gewählt.

SCHRITT 5: Die Koeffizienten ζ_{lj} , $j \in \mathcal{L}_j$ und ψ_l der Funktionen

$$\hat{z}_l(x) = \sum_{j \in \mathcal{L}_l} \zeta_{lj} \phi(\|x - x_j\|) + \psi_l \quad (2.17)$$

werden bestimmt. Die zur Bestimmung benötigten Gleichungen ergeben sich dabei aus den Lagrange-Bedingungen

$$\hat{z}_l(x_j) = \delta_{lj}, \quad l \in \mathcal{L}_l \quad (2.18)$$

und der Nebenbedingung $\sum_{j \in \mathcal{L}_l} \zeta_{lj} = 0$, wobei δ_{lj} das Kronecker-Delta beschreibt. Solange $m \leq N - 2$ gilt, wird die Zählvariable m um 1 erhöht und zu Schritt 4 zurückgekehrt. Ansonsten wird der Iterationszähler k auf 1 gesetzt und mit Schritt 6 der Iterationsprozess begonnen.

SCHRITT 6: Die Koeffizienten der Funktion

$$t^{(k)}(x) = \sum_{j=1}^N \tau_j^{(k)} \Phi(x, x_j)$$

werden bestimmt. Dazu wird $\underline{\tau} = \underline{0}$ initialisiert. Danach durchläuft l die Indizes $\{\sigma(1), \dots, \sigma(N - 1)\}$. Für jedes l wird

$$\mu_l^{(k)} = \sum_{i \in \mathcal{L}_l} \zeta_{li} r_i^{(k)} / \zeta_{ll} \quad (2.19)$$

mit dem bekannten momentanen Residuum $r^{(k)}$ und den zuvor berechneten ζ_{ij} bestimmt, und für alle $j \in \mathcal{L}_j$ das Produkt $\mu_l^{(k)}$ zu $\tau_j^{(k)}$ addiert.

SCHRITT 7: Die Suchrichtung

$$d^{(k)}(x) = \sum_{j=1}^N \delta_j^{(k)} \Phi(x, x_j)$$

wird bestimmt. In der ersten Iteration ($k = 1$) wird $\underline{\delta}^{(1)} = \underline{\tau}^{(1)}$ gewählt. Sonst ($k > 1$) wird

$$\delta_j^{(k)} = \tau_j^{(k)} - \beta_k \delta_j^{(k-1)}, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.20)$$

mit

$$\beta_k = \sum_{i=1}^N \tau_i^{(k)} d^{(k-1)}(x_i) / \sum_{i=1}^N \delta_i^{(k-1)} d^{(k-1)}(x_i) \quad (2.21)$$

gesetzt.

SCHRITT 8: Das Produkt $\Phi \underline{\delta}$ wird berechnet, um die Funktionswerte $d^{(k)}(x_i)$, $i = 1, \dots, N$, zu bestimmen.

SCHRITT 9: Die Schrittweite der aktuellen Iteration wird durch

$$\gamma^{(k)} = \frac{\sum_{i=1}^N \delta_i^{(k)} r_i^{(k)}}{\sum_{i=1}^N \delta_i^{(k)} d^{(k)}(x_i)} \quad (2.22)$$

bestimmt. Damit wird die Approximierende $s^{(k+1)}$ durch

$$s^{(k+1)}(x) = s^{(k)}(x) + \gamma^{(k)} d^{(k)}(x) + \omega^{(k)} \quad (2.23)$$

berechnet, wobei $\omega^{(k)} \in \mathbb{R}$ noch zu bestimmen ist. Aus Gleichung (2.8) folgt, dass der neue Residuenvektor die Form

$$r_i^{(k+1)} = r_i^{(k)} - \gamma^{(k)} d^{(k)}(x_i) - \omega^{(k)}, \quad i = 1, \dots, N,$$

besitzt, und somit $\omega^{(k)}$ derart bestimmt wird, dass $\max\{|r_i^{(k+1)}|, i = 1, \dots, N\}$ minimiert wird. Die Koeffizienten der Interpolierenden $s^{(k+1)}$ werden durch

$$\begin{aligned} \lambda_i^{(k+1)} &= \lambda_i^{(k)} + \gamma^{(k)} \delta_i^{(k)}, \quad i = 1, \dots, N \\ \alpha^{(k+1)} &= \alpha^{(k)} + \omega^{(k)} \end{aligned}$$

bestimmt.

SCHRITT 10: Der Iterationszähler k wird um 1 erhöht. Falls die Abbruchbedingung (2.9) erfüllt ist, wird das Verfahren mit den Lösungskoeffizienten $\underline{\lambda}^{(k)}$ und $\alpha^{(k)}$ abgebrochen, ansonsten wird mit Schritt 5 eine neue Iteration begonnen.

2.1.4 Analyse des Verfahrens

Die in Schritt 7 definierten Suchrichtungen $d^{(k)}$ erfüllen das geforderte Konjugiertenkriterium (2.10) und mit der in Schritt 9 definierten neuen Approximierenden $s^{(k+1)}$ die Orthogonalität (2.11).

Unter Ausnutzung von (2.7) erkennt man im Zähler von (2.21) das semi-innere Produkt $-\langle t^{(k)}, d^{(k-1)} \rangle_\phi$ und im Nenner $-\langle d^{(k-1)}, d^{(k-1)} \rangle_\phi$. Damit ergibt sich für (2.20)

$$d^{(k)}(x) = t^{(k)}(x) - \frac{\langle t^{(k)}, d^{(k)} \rangle_\phi}{\langle d^{(k-1)}, d^{(k-1)} \rangle_\phi} d^{(k-1)}(x), \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

und daraus folgt direkt das Konjugiertenkriterium (2.10) für die Suchrichtungen $d^{(k)}$, $k \geq 2$.

Weiters liegen die Funktionen $s^* - s^{(k)}$ in \mathcal{S} und die Residuen (2.8) entsprechen den Werten $(s^* - s^{(k)})(x_i)$ für die gegebenen Interpolationszentren x_i , $i = 1, \dots, n$. Dadurch entspricht der Zähler der Schrittweite (2.22) unter erneuter Verwendung von (2.7) $-\langle d^{(k)}, s^* - s^{(k)} \rangle$ und der Nenner $-\langle d^{(k)}, d^{(k)} \rangle$. Einsetzen in (2.23) ergibt

$$(s^* - s^{(k)})(x) = (s^* - s^{(k)})(x) - \frac{\langle s^* - s^{(k)}, d^{(k)} \rangle}{\langle d^{(k)}, d^{(k)} \rangle} d^{(k)}(x) - \omega,$$

und somit die Orthogonalität (2.2).

Zur besseren Lesbarkeit wird in weiterer Folge die Permutation der Indizes der gegebenen Interpolationszentren nicht explizit geschrieben.

Der lineare Operator A ist durch

$$(As)(x) := \sum_{l=1}^N \frac{\langle \tilde{z}_l, s \rangle_\phi}{\langle \tilde{z}_l, \tilde{z}_l \rangle_\phi} \tilde{z}_l(x), \quad x \in \Omega, s \in X$$

definiert, wobei \tilde{z}_l die Funktion (2.17) ohne den konstanten Term bezeichnet. Damit kann gezeigt werden, dass die Koeffizienten $\tau_j^{(k)}$ aus Schritt 6 derart konstruiert sind, dass

$$t^{(k)} = A(s^* - s^{(k)})$$

gilt. Dabei ist zu beachten, dass $r_i^{(k)} = (s^* - s^{(k)})(x_i)$ gilt. Damit entspricht der Zähler aus (2.19) dem Semi-Skalarprodukt $-\langle \tilde{z}_l, s^* - s^{(k)} \rangle_\phi$. Weiters folgt aus den Lagrange-Bedingungen (2.18) und der Nebenbedingung $\sum_{j \in \mathcal{L}_j} \zeta_j = 0$ dass der Nenner aus (2.19) den Wert

$$\zeta_u = \sum_{j \in \mathcal{L}_j} \zeta_j \hat{z}_l(x_j) = \sum_{j \in \mathcal{L}_j} \zeta_j \tilde{z}_l(x_j) = -\langle \tilde{z}_l, \tilde{z}_l \rangle_\phi$$

annimmt. Dieser ist ungleich Null, da aufgrund der Lagrange-Bedingungen $\hat{z}_l \in X$ nicht konstant sein kann. Die Addition der Produkte $\mu_l^{(k)} \zeta_j$ zu $\tau_j^{(k)}$ für alle $j \in \mathcal{L}_l$ in Schritt 6 führt zu

$$t^{(k)} = \sum_{i=1}^{N-1} \mu_i^{(k)} \tilde{z}_i = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\langle \tilde{z}_i, s^* - s^{(k)} \rangle_\phi}{\langle \tilde{z}_i, \tilde{z}_i \rangle_\phi} \tilde{z}_i = A(s^* - s^{(k)}).$$

Zum Nachweis der Vorkonditionierungseigenschaft von A sowie für weitere Betrachtungen zur Konvergenz des Verfahrens sei auf [15] verwiesen.

2.2 Multipolmethoden

In diesem Abschnitt werden zunächst Multipolmethoden im Allgemeinen und danach eine spezielle Methode für den \mathbb{R}^3 eingeführt. Diese Einführung folgt [3]. Abschließend wird nach [8] eine Reihenentwicklung für die multiquadratische Basisfunktion angegeben.

2.2.1 Einführung

Multipolmethoden eignen sich zur schnellen Auswertung von Summen der Form

$$u(x) = \sum_{i=1}^N w_i K(x, y_i) \tag{2.24}$$

für Punkte $x \in \Omega$ und die **Quellen** $\{y_i\}_{i=1, \dots, N} \subset \Omega$ bezüglich des **Kerns** $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit reellen **Gewichten** w_i über dem Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$. Der Aufwand für die direkte

Auswertung von N Ausdrücken dieser Art beträgt im Allgemeinen $O(N^2)$. Das Ziel von Multipolmethoden ist die Reduktion dieser Kosten auf $O(N \log N)$ oder $O(N)$.

Zur Entwicklung der Multipolmethode betrachtet man eine Summe der Form (2.24), bei der sich der Kern als endliche Summe

$$K(x, y) = \sum_{k=1}^p \phi_k(x) \psi_k(y) \quad (2.25)$$

darstellen lässt. In diesem Fall lassen sich die **Momente**

$$A_k = \sum_{i=1}^N w_i \psi_k(y_i) \quad (2.26)$$

unabhängig von einem Auswertungspunkt x berechnen. Die Berechnung von $u(x)$ erfolgt dann durch die Evaluierung der Summe

$$u(x) = \sum_{k=1}^p A_k \phi_k(x).$$

Dadurch ergibt sich für die Auswertung an N Punkten ein Gesamtaufwand von $O(Np)$. Somit lässt sich für $p \ll N$ eine Reduktion des Berechnungsaufwandes erzielen.

In vielen praktischen Anwendungsfällen lässt sich der Kern $K(x, y)$ jedoch **nicht** durch eine endliche Summe (2.25) darstellen, wohl aber in eine unendliche Reihe

$$K(x, y) = \sum_{k=1}^{\infty} \phi_k(x) \psi_k(y)$$

entwickeln. Ist jedoch eine näherungsweise Auswertung der Summe (2.24) zulässig, kann man den Kern durch eine endliche Summe approximieren. In anderen Worten bedeutet das, dass die Anwendbarkeit der Multipolmethode durch die Zulässigkeit einer approximierten Auswertung bedingt ist.

2.2.2 Eine Multipolmethode im \mathbb{R}^3

In diesem Abschnitt wird zunächst eine geeignete Struktur im \mathbb{R}^3 vorgestellt und anschließend eine auf dieser Struktur basierende Multipolmethode formuliert. Betrachtet werden Summen der Form (2.24), für die sich der Kern $K(x, y)$ in eine Laurent-Reihe

$$K(x, y) = \sum_{n=b}^{\infty} a_n (x - y)^{-n}, \quad \text{für } |x - y| > r$$

und $b \in \mathbb{Z}$ beschränkt, entwickeln lässt. Da diese Reihenentwicklung konvergiert, falls der Evaluierungspunkt x hinreichend weit vom Entwicklungszentrum y entfernt liegt, spricht man von einer **Fernfeld-Entwicklung** mit Konvergenzradius r . Der Bereich,

in dem $|x - y| < r$ gilt, heißt **Nahfeld**. Innerhalb des Nahfeldes muss der Kern direkt ausgewertet werden.

Ein **Octree** ist eine hierarchische Struktur im \mathbb{R}^3 . Den Ausgangspunkt bildet die **Wurzel**, eine Box b_0^0 (ein Würfel), die das gesamte betrachtete Gebiet Ω beinhaltet. Der Wurzel wird die **Verfeinerungsstufe** 0 zugeordnet. Danach wird rekursiv jede Box b_i^l in ihre 8 **Kinder** b_j^{l+1} zerteilt. Dadurch gelangt man von Verfeinerungsstufe l zur Stufe $l + 1$. Die Box b_i^l wird dabei als **Vater** ihrer Kinder bezeichnet. Die Verfeinerung wird bis zum Erreichen eines Abbruchkriteriums fortgeführt. Insgesamt ergibt sich eine Baumstruktur, in der die Boxen den Baumknoten und die Vater-Kind-Relationen den Ästen entsprechen.

Definition 2.3. Man nennt zwei Octree-Boxen b_i^l und b_j^k **direkte Nachbarn**, wenn sie sich in der selben Verfeinerungsstufe des Octrees befinden und mindestens einen Randpunkt teilen. (Eine Box ist ein direkter Nachbar von sich selbst.)

Definition 2.4. Man nennt zwei Octree-Boxen b_i^l und b_j^k **voneinander getrennt**, falls sie sich in der selben Verfeinerungsstufe des Octrees befinden und sie keine direkten Nachbarn sind.

Definition 2.5. Jede Box b_i^l wird mit einer **Interaktionsliste** assoziiert. Diese Liste enthält alle Kind-Boxen der direkten Nachbarn der Vater-Box von b_i^l , die von b_i^l getrennt sind.

Über dieser Struktur lässt sich ein zweistufiges Multipolverfahren formulieren. Dazu werden die innerhalb einer Octree-Box b_j^i liegenden Quellen zu einem **Cluster** ω_i zusammengefasst. Für die Quellen innerhalb dieser Cluster werden in der **Vorbereitungsphase** gemeinsame Fernfeld-Entwicklungen bestimmt. In der **Auswertungsphase** werden die Summen (2.24) durch die Evaluierung dieser Fernfeld-Entwicklungen für hinreichend weit entfernte Cluster, sowie durch die direkte Auswertung der Quellen im Nahfeld näherungsweise bestimmt.

Algorithmische Beschreibung der Vorbereitungsphase

Die Vorbereitungsphase wird vor der ersten Auswertung der Summe (2.24) vorbereitend für alle Auswertungen ausgeführt.

SCHRITT 1: Die Quellen $\{y_i\}_{i=1}^N$ und die zugehörigen Gewichte w_i sowie ein höchstzulässiger Approximationsfehler ε werden angegeben. Weiters wird das zu betrachtende Gebiet Ω definiert.

SCHRITT 2: Der maximale Entwicklungsgrad p_ε der Fernfeld-Entwicklungen wird derart bestimmt, dass die gegebene Genauigkeit ε erreicht wird.

SCHRITT 3: Die maximale Verfeinerungsstufe m des Octree wird als $m \approx \log N$ bestimmt. Bei einer ungefähr gleichmäßigen Verteilung der Quellen wird damit in der

feinsten Stufe eine maximale Anzahl von Zentren pro Box, unabhängig von N , garantiert.

SCHRITT 4: Über dem gegebenen Gebiet Ω wird der Octree gebildet. Die gegebenen Quellen werden den sie enthaltenden Octree-Boxen zugeordnet.

SCHRITT 5: Ausgehend von der feinsten Verfeinerungsstufe bis zur Stufe 2 werden für die Octree-Boxen die gemeinsamen Fernfeld-Entwicklungen der darin liegenden Cluster bestimmt. Dazu werden die Koeffizienten der Reihendarstellung für jede Quelle innerhalb des Clusters bezüglich desselben Entwicklungszentrums bestimmt und aufsummiert. Als Entwicklungszentren werden die jeweiligen Mittelpunkte der Boxen gewählt.

Der Aufwand zur Erstellung der Baumstruktur beträgt $O(\log N)$ und für die Zuordnung der Quellen zu den zugehörigen Boxen $O(N \log N)$. Für die Reihenentwicklung sind für jede der N Quellen in jeder Verfeinerungsstufe (≥ 2) $O(p_\epsilon^2)$ Koeffizienten zu bestimmen. Dadurch ergibt sich ein Gesamtaufwand von

$$O(N p_\epsilon^2 \log N).$$

Bemerkung 2.2. *Daraus folgt, dass die Anwendung der Multipolmethode nur dann das Laufzeitverhalten verbessert, falls $p_\epsilon^2 \ll N$ gilt.*

Algorithmische Beschreibung der Auswertungsphase

Für ein $x \in \Omega$ erfolgt die Auswertung von (2.24) in den folgenden Schritten:

SCHRITT 1: Die betrachtete Verfeinerungsstufe wird auf $j = 2$ gesetzt. Man bestimmt jene Octreebox b_i^j in Level j , in der x liegt. Die Summe wird mittels $u(x) := 0$ initialisiert.

SCHRITT 2: Für alle Boxen in der Interaktionsliste der Box b_i^j werden die Fernfeld-Entwicklungen an der Stelle x evaluiert und das Ergebnis zu $u(x)$ addiert. Ist die momentan betrachtete Verfeinerungsstufe $j = m$, gehe zu Schritt 4, sonst gehe zu Schritt 3.

SCHRITT 3: Man bestimmt jene Kind-Box b_k^{j+1} von b_i^j , in der x liegt. Die momentan betrachtete Verfeinerungsstufe wird auf $j = j + 1$ gesetzt, der Index der momentan betrachteten Box auf $i = k$ und man geht zu Schritt 2.

SCHRITT 4: Im feinsten Level m angelangt, evaluiert man für die Boxen b_j^m in der direkten Nachbarschaft von b_i^m

$$u|_{\text{Nahfeld}}(x) = \sum_{b_j^m \text{ ist Nachbar}} \sum_{y_i \in b_j^m} d_i K(x, y_i) \quad (2.27)$$

und addiert das Ergebnis zu $u(x)$. Der Algorithmus terminiert.

In der Interaktionsliste einer Box befinden sich maximal 189 Boxen. Die Auswertung der Reihenentwicklungen an einer Stelle x benötigt $O(p_\varepsilon^2)$ Rechenschritte. Die Fernfeld-Entwicklungen werden in $O(\log N)$ Stufen ausgewertet. In der direkten Nachbarschaft einer Box befinden sich maximal 27 Boxen. Die Zahl der Quellen in einer Box ist unabhängig von N beschränkt und benötigt daher $O(1)$ Rechenschritte zur direkten Auswertung. Dadurch ergeben sich für N Auswertungen die Gesamtkosten von

$$O(189Np_\varepsilon^2 \log N + 27N). \quad (2.28)$$

Bemerkung 2.3. *Diese Methode lässt sich zu einer Methode mit einer Asymptotischen Laufzeit von $O(p_\varepsilon^\alpha N)$ Schritten für die Auswertung in N Punkten erweitern. Dazu müssen in der Vorbereitungsphase die Fernfeld-Entwicklungen jeder Octree-Box in lokale Entwicklungen umgewandelt werden. Für jede Box werden dann die Entwicklungszentren aller lokalen Entwicklungen der Boxen der Interaktionsliste in das Zentrum der Box verschoben und summiert. Beginnend mit Verfeinerungsstufe 2 werden die lokalen Entwicklungen in die Zentren der Kind-Boxen verschoben und zu den bestehenden lokalen Entwicklungen addiert. Der Exponent α in der asymptotischen Laufzeitentwicklung hängt dabei von der verwendeten Transformationsmethode ab. In der Auswertungsphase sind somit nur die Auswertung einer lokalen Entwicklung und die Auswertungen der Quellen in den direkten Nachbarn zu berechnen.*

2.2.3 Reihenentwicklung für die Basisfunktion $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$

Im Folgenden wird eine Reihenentwicklung und eine Fehlerabschätzung sowie eine Vorschrift zur effizienten Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten für die Basisfunktion $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$ nach der umfassenden Darstellung in [8] angegeben.

Zu Bestimmen ist eine Fernfeld-Entwicklung zur effizienten Berechnung von Summen der Form

$$u(x) = \sum_{i=1}^N w_i \phi(x), \quad (2.29)$$

wobei $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ die Basisfunktion

$$\phi(x) = \phi(x, c) = (x^2 + c^2)^{1/2} \quad (2.30)$$

mit $c \geq 0$ und $x \in \mathbb{R}^d$ bezeichnet.

Die in weiterer Folge dargestellten Reihenentwicklungen verwenden multivariaten Polynome P_l der Form

$$P_l(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{j=\lfloor \frac{l+1}{2} \rfloor}^l \binom{1/2}{j} \binom{j}{l-j} \beta^{2j-l} (\alpha\gamma)^{l-j}, \quad (2.31)$$

mit $l \geq 0$ und $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}^d$. Für negative l wird $P_l \equiv 0$ identifiziert.

Das folgende Lemma gibt eine Fernfeld-Entwicklung für die Basisfunktion (2.30), sowie eine Fehlerabschätzung für die endliche Entwicklung vom Grad $p + 1$ an.

Lemma 2.6. *Sei $t \in \mathbb{R}^d$ und $c \geq 0$. Für alle $x \in \mathbb{R}^d$ mit $\|x\| > \sqrt{\|t\|^2 + c^2}$ gilt*

$$\phi(x - t) = (\|x - t\|^2 + c^2)^{1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\|t\|^2 + c^2, -2\langle t, x \rangle, \|x\|^2) / \|x\|^{2l-1}$$

mit den Polynomen P_l wie in Gleichung (2.31). Weiters gilt für $\|x\| > \sqrt{\|t\|^2 + c^2}$ und für $p + 1 > 0$

$$\left| \phi(x - t) - \sum_{l=0}^{p+1} P_l(\|t\|^2 + c^2, -2\langle t, x \rangle, \|x\|^2) / \|x\|^{2l-1} \right| \leq (2\sqrt{\|t\|^2 + c^2}) \left(\frac{\sqrt{\|t\|^2 + c^2}}{\|x\|} \right)^{p+1} \frac{\|x\|}{\|x\| - \sqrt{\|t\|^2 + c^2}}.$$

Beweis. Siehe [8, Lemma 3.1]. □

Mit Lemma 2.6 lässt sich direkt eine Fernfeld-Entwicklung und eine Fehlerabschätzung für die Summe (2.29) angeben.

Satz 2.7. *Sei $t_i \in \mathbb{R}^d$, $\|t_i\| \leq r$ und $w_i \in \mathbb{R}$ für $1 \leq i \leq N$ und $r > 0$. Sei $c \geq 0$ und $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$*

$$u(x) = \sum_{i=1}^N \phi(x - t_i) = \sum_{i=1}^N w_i \left(\sqrt{\|x - t_i\|^2 + c^2} \right).$$

Mit den Polynomen P_l aus Gleichung (2.31) haben die homogenen Polynome

$$Q_l(x) = \sum_{i=1}^N w_i P_l(\|t_i\|^2 + c^2, -2\langle t_i, x \rangle, \|x\|^2), \quad l \in \mathbb{N}$$

die folgende Eigenschaft: Sei $p \in \mathbb{N}_0$ und sei

$$s_p(x) = \sum_{l=0}^{p+1} Q_l(x) / \|x\|^{2l-1}, \quad x \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}.$$

Dann gilt für $x \in \mathbb{R}^d$ und $R = \sqrt{r^2 + c^2}$ mit $\|x\| > R$

$$|s(x) - s_p(x)| \leq 2MR \left(\frac{1}{c} \right)^{p+1} \frac{1}{1 - 1/c},$$

wobei $M = \sum_{i=1}^N |w_i|$ und $c = \|x\|/R$.

Das folgende Lemma kann zur effizienten Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten herangezogen werden.

Lemma 2.8. *Die Polynome aus (2.31) erfüllen, für alle $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}^d$ und $l \in \mathbb{N}$, die Rekursionsgleichung*

$$(l+1)P_{l+1}(\alpha, \beta, \gamma) = \left(\frac{1}{2}\right) \beta P_l(\alpha, \beta, \gamma) + (2-l) \alpha \gamma P_{l-1}(\alpha, \beta, \gamma).$$

Beweis. Siehe [8, Lemma 2.5]. □

Als direkte Folgerung von Lemma 2.8 kann die folgende rekursive Vorschrift zur Bestimmung der Koeffizienten der Reihenentwicklung formuliert werden. Schreibt man

$$G_l(x) = P_l(\|t\|^2 + c^2, -2\langle t, x \rangle, \|x\|^2),$$

so ist G_l ein homogenes Polynom vom Grad l in x , das von c und t abhängt. Die Entwicklung für ein Zentrum mit Gewicht w ist dann

$$\sum_{l=0}^{p+1} w G_l(x) / \|x\|^{2l-1}.$$

Die Polynome G_l genügen dabei der Rekursionsvorschrift

$$G_l(x) = \begin{cases} 1, & l = 0, \\ -\langle x, t \rangle, & l = 1, \\ A_l \langle x, t \rangle G_{l-1}(x) + B_l \|x\|^2 (\|t\|^2 + c^2) G_{l-2}(x), & l \geq 2, \end{cases}$$

wobei

$$A_l = -\frac{2l-3}{l}, \quad B_l = \frac{3-l}{l}.$$

3 Bi-Laplace Gleichung

3.1 Einführung

In diesem Abschnitt wird der Bi-Laplace Operator und die homogene Bi-Laplace Gleichung nach [28] eingeführt. Danach wird die Wohlgestellttheit des Randwertproblems der Bi-Laplace Gleichung unter den möglichen Randbedingungen nach [18] untersucht.

Um die Bi-Laplace Gleichung formulieren zu können, werden zunächst die folgenden Differentialoperatoren definiert:

Definition 3.1. Der **Nabla** Operator ∇ in d Dimensionen ist definiert als

$$\nabla u(x) := \left(\frac{\partial}{\partial x_1} u(x), \dots, \frac{\partial}{\partial x_d} u(x) \right)^\top, \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^d.$$

Definition 3.2. Der **Laplace** Operator Δ in d Dimensionen ist definiert als

$$\Delta u(x) := (\nabla \cdot \nabla) u(x) = \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} u(x), \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^d.$$

Definition 3.3. Der **Bi-Laplace** oder **biharmonische** Operator Δ^2 in d Dimensionen ist als zweimalige Anwendung des Laplace Operators definiert als

$$\Delta^2 u(x) := \Delta \Delta u(x) = \sum_{i=1}^d \frac{\partial^4}{\partial x_i^4} u(x) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^d \frac{\partial^4}{\partial x_i^2 \partial x_j^2} u(x), \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^d.$$

Unter Anwendung des Bi-Laplace Operators wird die homogene **Bi-Laplace Gleichung** über dem betrachteten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ formuliert. Gesucht ist ein $u \in C^4(\Omega)$ derart, dass

$$\Delta^2 u(x) = 0, \quad \text{für } x \in \Omega. \quad (3.1)$$

Dabei sei das Gebiet Ω einfach zusammenhängend und beschränkt. Auf dem Rand Γ sei fast überall der äußere Einheitsnormalenvektor $\underline{n}(x)$, $x \in \Gamma$, gegeben. Multiplikation von (3.1) mit einer Testfunktion $v \in W_2^2(\Omega)$ und Integration über dem Gebiet Ω ergibt

$$\int_{\Omega} (\Delta^2 u(x)) v(x) dx = 0, \quad \text{für } x \in \Omega.$$

Nach zweimaliger partieller Integration und der Anwendung des Integralsatzes von Gauß-Ostrogradski ergibt sich die schwache Formulierung

$$\int_{\Omega} \Delta u(x) \Delta v(x) dx + \int_{\Gamma} (\underline{n}(x) \cdot \nabla(\Delta u(x))) v(x) ds_x - \int_{\Gamma} \Delta u(x) (\underline{n}(x) \cdot \nabla v) ds_x = 0 \quad (3.2)$$

für $u, v \in W_2^2(\Omega)$.

Aus dem ersten Randintegral in (3.2) ergeben sich die möglichen Randbedingungen

$$\begin{aligned} \text{(B1): } & u(x) = g_1(x), \\ \text{(B2): } & \underline{n}(x) \cdot \nabla(\Delta u(x)) = g_2(x), \end{aligned}$$

aus dem zweiten Randintegral in (3.2) ergeben sich die möglichen Randbedingungen

$$\begin{aligned} \text{(B3): } & \Delta u(x) = g_3(x), \\ \text{(B4): } & \underline{n}(x) \cdot \nabla u(x) = g_4(x) \end{aligned}$$

für $x \in \Gamma$.

Dadurch ergeben sich die möglichen Randbedingungskombinationen (B1 - B3), (B1 - B4), (B2 - B3) und (B2 - B4). Die Kombination (B2 - B3) führt jedoch nicht auf ein wohlgestelltes Problem. Dazu betrachte man die Formulierung von (3.1) als System

$$\begin{aligned} -\Delta u(x) &= \varphi(x) \\ -\Delta \varphi(x) &= 0. \end{aligned}$$

Die Kombination (B2 - B3) ist damit äquivalent zu den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \gamma_0^{\text{int}} \varphi(x) &= h_1(x) \\ \gamma_0^{\text{int}}(\underline{n}(x) \cdot \nabla(\varphi(x))) &= h_2(x). \end{aligned}$$

Dadurch ist die Gleichung zur Bestimmung von $\varphi(x)$ von der Gleichung für $u(x)$ entkoppelt.

Bemerkung 3.1. *In der mathematischen Modellierung physikalischer Prozesse tritt der Bi-Laplace Operator z. B. in der Elastizitätstheorie auf. So können die Komponenten der Lösung des homogenen Systems der linearen Elastizitätstheorie auf die Lösung einer Bi-Laplace Gleichung zurückgeführt werden (siehe z. B. [28]). Weiters tritt die Bi-Laplace Gleichung in der Kirchhoff'schen Plattentheorie auf (z. B. [10]).*

3.2 Fundamentallösungen

In diesem Abschnitt wird der Begriff der Fundamentallösung nach [28] eingeführt und danach eine Fundamentallösung für die Bi-Laplace Gleichung hergeleitet.

Zur Einführung des Begriffes der Fundamentallösung wird zunächst die partielle Differentialgleichung über einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$,

$$(Lu)(x) = f(x) \quad \text{für } x \in \Omega, \tag{3.3}$$

mit einem elliptischen Differentialoperator zweiter Ordnung,

$$(Lu)(x) = - \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left[a_{ji}(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) \right],$$

betrachtet. Die **innere Spur** einer im Gebiet Ω gegebenen Funktion g sei mit

$$\gamma_0^{\text{int}} g(x) := \lim_{\Omega \ni \tilde{x} \rightarrow x \in \Gamma} g(\tilde{x}) \quad \text{für } x \in \Gamma$$

bezeichnet. Am Rand Γ des Gebiets Ω sei fast überall der äußere Einheitsnormalenvektor $\underline{n}(x)$ gegeben. Dann bezeichnet

$$\gamma_1^{\text{int}} g(x) := \lim_{\Omega \ni \tilde{x} \rightarrow x \in \Gamma} \left[n_j(x) a_{ji}(\tilde{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} g(\tilde{x}) \right]$$

die **innere Konormalenableitung**.

Nach der Multiplikation beider Seiten von (3.3) mit einer hinreichend glatten Testfunktion v und der Integration über dem Gebiet Ω liefert partielle Integration und die Anwendung des Integralsatzes von Gauß-Ostrogradski die **erste Greensche Formel**

$$\sum_{i,j=1}^d \int_{\Omega} a_{ji}(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) \frac{\partial}{\partial x_j} v(x) dx = \int_{\Omega} (Lu)(x) v(x) dx + \int_{\Gamma} \gamma_1^{\text{int}} u(x) \gamma_0^{\text{int}} v(x) ds_x.$$

Vertauschen von u und v und Gleichsetzen der beiden rechten Seiten führt mit (3.3) auf die **zweite Greensche Formel**

$$\int_{\Omega} (Lv)(y) u(y) dy = \int_{\Gamma} \gamma_1^{\text{int}} u(y) \gamma_0^{\text{int}} v(y) ds_y - \int_{\Gamma} \gamma_1^{\text{int}} v(y) \gamma_0^{\text{int}} u(y) ds_y + \int_{\Omega} f(y) v(y) dy.$$

Für $x \in \Omega$ erfülle eine Funktion $v(y) := U^*(x, y)$

$$\int_{\Omega} (L_y U^*)(x, y) u(y) dy = u(x).$$

Dann folgt für $x \in \Omega$ die **Darstellungsformel**

$$u(x) = \int_{\Gamma} U^*(x, y) \gamma_1^{\text{int}} u(y) ds_y - \int_{\Gamma} \gamma_{1,y}^{\text{int}} U^*(x, y) \gamma_0^{\text{int}} u(y) ds_y + \int_{\Omega} U^*(x, y) f(y) dy. \quad (3.4)$$

Mit der Darstellungsformel (3.4) bestimmt sich jede Lösung der partiellen Differentialgleichung (3.3) allein aus der Kenntnis der Daten $[\gamma_0^{\text{int}} u(x), \gamma_1^{\text{int}} u(x)]$ für $x \in \Gamma$. Die Identität

$$u(x) = \int_{\Omega} \delta_0(y - x) u(y) dy, \quad \text{für } x \in \Omega,$$

führt zur folgenden Definition.

Definition 3.4. Sei L ein linearer partieller Differentialoperator. Dann heißt eine Funktion $U^*(x, y)$ **Fundamentallösung**, falls sie eine distributionelle Lösung der partiellen Differentialgleichung

$$(L_y U^*)(x, y) = \delta_0(y - x), \quad \text{für } x, y \in \mathbb{R}^d$$

ist.

3.2.1 Fundamentallösung des Bi-Laplace Operators

Für $d = 3$ lautet die Fundamentallösung des Laplace Operators [28]

$$U_{\Delta}^*(x, y) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x - y|}. \quad (3.5)$$

Aus der Kenntnis der Fundamentallösung des Laplace-Operators kann die Fundamentallösung des Bi-Laplace Operators bestimmt werden (siehe [1]). Dazu kann das folgende Lemma verwendet werden.

Lemma 3.5. *Sei Δ der Laplace-Operator im \mathbb{R}^3 und $0 \neq x \in \mathbb{R}^3$, dann gilt*

$$\Delta(|x|^p) = p(p+1)|x|^{p-2}.$$

Beweis. Die Aussage ergibt sich direkt durch die zweimalige partielle Ableitung von

$$|x|^p = \left(\sum_{i=1}^3 x_i^2 \right)^{p/2}$$

nach ∂x_j und der anschließenden Summation über $j = 1, \dots, 3$. □

Die Anwendung von Lemma 3.5 für $p = 1$ ergibt

$$\Delta^2(|x|) = \Delta(\Delta(|x|)) = \Delta\left(2\frac{1}{|x|}\right) = -8\pi\delta_0.$$

Damit ergibt sich die Fundamentallösung für den Bi-Laplace Operator im \mathbb{R}^3 als

$$U_{\Delta^2}^*(x, y) = \frac{1}{8\pi} |x - y|. \quad (3.6)$$

3.3 Methode der Fundamentallösungen

In diesem Abschnitt wird die Methode der Fundamentallösungen nach [19, 13] eingeführt, sowie eine direkte Anwendung zur Lösung der Bi-Laplace Gleichung nach [21] angegeben. Abschließend wird eine verbesserte Methode nach [19, 13, 25] vorgestellt.

Die traditionellen Methoden zur numerischen Lösung von elliptischen partiellen Differentialgleichungen sind die Finite Elemente Methode und die Finite Differenzen Methode. Zur Anwendung dieser Methoden muss das gesamte betrachtete Gebiet diskretisiert werden. Für eine gewisse Klasse von Problemstellungen eignen sich jedoch auch Methoden für deren Anwendung nur der Rand des betrachteten Gebietes diskretisiert werden muss, sogenannte Randmethoden. Bekannteste Vertreter der Randmethoden sind die Randelementmethoden (boundary element methods - BEM (z. B. [28])). Bei der Methode der Fundamentallösungen (method of fundamental solutions - MFS) handelt es sich ebenso um eine Randmethode. In der hier vorgestellten Form eignet sich

die Methode der Fundamentallösungen zur numerischen Bestimmung von Lösungen von homogenen partiellen Differentialgleichungen der Form

$$Lu(x) = 0, \quad x \in \Omega$$

über einem beschränkten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ mit einem linearen elliptischen partiellen Differentialoperator L , für den eine Fundamentallösung $U_L^*(x, y)$ in der Dimension d bekannt ist.

Die Grundidee der Methode der Fundamentallösungen ist die Darstellung der Lösung als Linearkombination von Fundamentallösungen

$$u_N(x) = \sum_{j=1}^N \mu_j U_L^*(x, y_j), \quad x \in \bar{\Omega} \quad (3.7)$$

mit den Singularitäten $\{y_j\}_{j=1}^N$ ausserhalb des Gebietes $\bar{\Omega}$.

3.3.1 Bi-Laplace Gleichung

Betrachtet wird die harmonische Bi-Laplace Gleichung (3.1) unter den Randbedingungen (B1) und (B3) oder (B1) und (B4).

Aus der Kenntnis der Fundamentallösung (3.6) des Bi-Laplace Operators lässt sich eine Näherungslösung der Form (3.7) konstruieren ([21]).

Zu bestimmen sind demnach die Koeffizienten $(\mu_j)_{j=1}^N$ der Darstellung

$$u_N(x) = \sum_{i=1}^N \mu_i U_{\Delta^2}^*(x, y_i), \quad x \in \bar{\Omega}. \quad (3.8)$$

Dafür werden Werte der Randbedingungen (B1) oder (B3) bzw. (B4) auf einer Menge $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^N \subset \Gamma$ von Punkten am Rand vorgegeben. Dabei wird die Randbedingung (B1) für die Knoten einer Teilmenge $\mathcal{I} \subset \mathcal{X}$ gesetzt. An den verbleibenden Randknoten aus der Menge $\mathcal{J} := \mathcal{X} \setminus \mathcal{I}$ wird Randbedingung (B3) bzw. (B4) angelegt. In vielen Anwendungsfällen gilt dabei $|\mathcal{I}| = |\mathcal{J}|$.

Um ein Gleichungssystem zur Bestimmung der Koeffizienten $\{\mu_j\}_{j=1}^N$ aufstellen zu können, müssen noch die Positionen der in der Formulierung (3.7) auftretenden Singularitäten $\{y_i\}_{i=1}^N$ vorgegeben werden. Eine Möglichkeit dafür ergibt sich aus der Vorgabe eines positiven reellen Parameters d und der Vorschrift

$$y_i := x_i + d \underline{n}(x_i). \quad (3.9)$$

Damit ergeben sich die gesuchten Koeffizienten durch das Lösen des linearen $N \times N$ -Gleichungssystems

$$A\mu = g, \quad (3.10)$$

wobei die Matrixeinträge durch $a_{ij} = U_{\Delta^2}^*(x_i, y_j)$ für $i \in \mathcal{I}$ und $a_{ij} = \frac{\partial}{\partial n} U_{\Delta^2}^*(x_i, y_j)$ (bzw. $a_{ij} = \Delta U_{\Delta^2}^*(x_i, y_j)$) für $i \in \mathcal{J}$ bestimmt sind. Die Einträge von g bestimmen sich durch $g_1(x_i)$ für $i \in \mathcal{I}$ und $g_3(x_i)$ (bzw. $g_4(x_i)$) für $i \in \mathcal{J}$.

Bemerkung 3.2. Durch die Bestimmung der Singularitäten mittels der Vorschrift (3.9) ergibt sich die Lösungsdarstellung

$$u_N(x) = \sum_{i=1}^N \mu_i \|x - x_i - d \underline{n}(x_i)\|, \quad d \in \mathbb{R}_+.$$

Die Interpolation mit radialen Basisfunktionen unter Verwendung der Basisfunktion $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$ führt zu

$$s(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \sqrt{\|x - x_i\|^2 + c^2} + \alpha, \quad c \in \mathbb{R}_+.$$

Diese Ähnlichkeit der Darstellungen liefert die Motivation zum Vergleich der Ergebnisse der Deformierung von Berechnungsgittern mittels Interpolation mit radialen Basisfunktionen mit der Basisfunktion $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$ und mittels der Methode der Fundamentallösungen zur numerischen Bestimmung einer Lösung der Bi-Laplace Gleichung.

Bemerkung 3.3. In bestimmten Konfigurationen entspricht die Interpolation mit radialen Basisfunktionen exakt der Methode der Fundamentallösungen in einer höheren Dimension ([1]). So entspricht die Interpolierende (im \mathbb{R}^2)

$$s(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \sqrt{\|x - x_i\|^2 + c^2}$$

für $x_i = (x_{i_1}, x_{i_2}) \in \mathbb{R}^2$ der Lösung mittels der Methode der Fundamentallösungen (im \mathbb{R}^3)

$$u_N(x) = \sum_{i=1}^N \mu_i \|x - y_i\|$$

bei der Vorgabe der Randknoten $x_i = (x_{i_1}, x_{i_2}, 0) \in \mathbb{R}^3$ und der Singularitäten $y_i = (x_{i_1}, x_{i_2}, c) \in \mathbb{R}^3$.

Eine Schwäche der Formulierung (3.8) ist, dass in den gegebenen Randknoten jeweils nur eine geforderte Randbedingung vorgegeben werden kann. In [19, 13, 25] wird eine verbesserte Methode vorgeschlagen, die es ermöglicht, in allen N Randpunkten beide geforderten Randbedingungen zu setzen.

Dazu wird eine Näherungslösung als Linearkombination von Fundamentallösungen des Bi-Laplace und des Laplace Operators gebildet:

$$u(x) = \sum_{i=1}^N \mu_j U_{\Delta^2}^*(x, y_i) + \sum_{i=1}^N \nu_j U_{\Delta}^*(x, y_i), \quad x \in \bar{\Omega}.$$

Die Koordinaten der Singularitäten ergeben sich erneut durch (3.9). Durch Setzen beider Randbedingungen in allen Randknoten $\{x_i\}_{i=1}^N$ bestimmen sich die Koeffizienten μ_j und ν_j durch das Lösen des linearen $2N \times 2N$ -Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} A_{1,\Delta^2} & A_{1,\Delta} \\ A_{(3,4),\Delta^2} & A_{(3,4),\Delta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\mu} \\ \underline{\nu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{g}_1 \\ \underline{g}_{(3,4)} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Die Gleichungssysteme (3.10) und (3.11) sind im Allgemeinen schlecht konditioniert. Die spektralen Konditionszahlen der quadratischen Matrizen hängen indirekt proportional von den Separationsradien der gegebenen Randpunkte $\{x_i\}_{i=1}^N$ ab. Zwar verbessert sich das Konvergenzverhalten der Methode der Fundamentallösungen mit fest gewählten Positionen der Singularitäten durch einen größeren Abstand d der Singularitäten $\{y_i\}_{i=1}^N$ zu den gegebenen Randpunkten $\{x_i\}_{i=1}^N$, jedoch führt dies zu einer weiteren Verschlechterung der Konditionierung des linearen Gleichungssystems. Bei Einsatz iterativer Verfahren zur näherungsweise Bestimmung der Lösung muss deshalb eine geeignete Vorkonditionierung verwendet werden (z. B. [28]).

4 Deformierung von Berechnungsgittern

In diesem Kapitel werden zunächst die betrachteten Berechnungsgitter beschrieben und die Aufgabenstellung bei deren Deformierung formuliert. Danach werden häufig verwendete Deformierungsmethoden und die Gittertypen, auf denen diese angewendet werden können, kurz vorgestellt. Die Notation und die gewählten Bezeichnungen sind dabei an [28] angelehnt.

4.1 Einführung

4.1.1 Berechnungsgitter

Gegenstand aller folgenden Betrachtungen sind in der numerischen Strömungsmechanik verwendete Berechnungsgitter. Ein (Berechnungs-)Gitter ist die diskrete Unterteilung eines beschränkten Gebietes $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ mit polyhedralem Rand als Vereinigung konvexer polyedrischer **Zellen** oder **Elemente** τ_l , also

$$\bar{\Omega} = \bar{\mathcal{T}}_N = \bigcup_{l=1}^N \bar{\tau}_l. \quad (4.1)$$

Die Menge der Ecken $\{x_k\}_{k=1}^M$ der Polyeder τ_l bezeichnet man als die **Knoten** des Gitters. Man nennt die Verbindung von Zellen **konform** oder **zulässig**, wenn die Schnittmenge zweier benachbarter Elemente genau einen Knoten, genau eine Kante oder genau eine Fläche enthält. Gitter, in denen nur konforme Verbindungen auftreten, nennt man konform, ansonsten nennt man diese nicht-konform.

Die Art der verwendeten Polyeder dient zur Namensgebung verschiedener Netztypen. So spricht man z. B. von Tetraeder- oder Hexaedergittern. Treten in einem Netz verschiedene allgemeine Polyeder auf, spricht man von einem Polyedergitter. Eine weitere gebräuchliche Bezeichnung ist Hexaeder-dominiertes Hybridnetz für Gitter, die zum Großteil aus Hexaedern bestehen, jedoch auch Tetraeder, dreiseitige Prismen, vierseitige Pyramiden sowie Oktaeder beinhalten können.

Bemerkung 4.1. *Für die numerische Strömungsmechanik werden in vielen Fällen eine oder mehrere prismatische Randschichten benötigt. Diese beeinflussen die Namensgebung im Allgemeinen nicht. So werden z. B. Tetraedernetze mit prismatischer Randschicht kurz als Tetraedernetze bezeichnet.*

Treten regelmäßige Topologien auf, so spricht man von **strukturierten** Gebieten, Blöcken oder Netzen. Unter einem blockstrukturierten Hexaedernetz versteht man ein konformes Hexaedergitter, welches in logische Blöcke zerlegt werden kann. Jeder dieser Blöcke ist in den drei Hauptrichtungen in $l \times m \times n$ Hexaeder unterteilt. So kann man innerhalb eines Blocks jede Zelle τ durch ein Tripel (i_τ, j_τ, k_τ) und gleichermaßen jeden Knoten x durch ein Tripel $(\iota_x, \kappa_x, \lambda_x)$ identifizieren.

4.1.2 Deformierung von Berechnungsgittern

In vielen Anwendungsfällen ändert sich die Geometrie des betrachteten Gebietes Ω . Beispiele hierfür sind zeitlich veränderliche Modelle (z. B. der Brennraum eines Motors mit beweglichen Ventilen und Kolben), Fluid-Struktur-Interaktionen oder Simulationen zur Optimierung der Bauform technischer Bauteile.

Um ein verändertes Gebiet abzubilden, besteht die Möglichkeit, dieses von Grund auf neu zu diskretisieren. Abhängig von der verwendeten Vernetzungsmethode kann dies – auch bei einer nur geringfügig veränderten Geometrie – zu stark unterschiedlichen Gittertopologien führen.

Eine weitere Möglichkeit liegt in der Deformierung einer vorhandenen Diskretisierung. Dabei bleibt die Topologie des Gitters unverändert, die Positionen der Knoten des Gitters werden der veränderten Geometrie des Gebietes angepasst. Dies führt im Allgemeinen zu folgender Aufgabenstellung:

Gegeben ist eine Diskretisierung $\bar{\mathcal{T}}_N = \bigcup_{l=1}^N \bar{\tau}_l$ eines Gebietes Ω mit den Knoten $\{x_k\}_{k=1}^M$, sowie eine vektorwertige Bewegungsvorschrift $\{d_j\}_{j \in \mathcal{J}}$ für eine Teilmenge $\{x_j\}_{j \in \mathcal{J}}$ der gegebenen Knoten ($\mathcal{J} \subset \{1, \dots, M\}$).

Gesucht ist eine vektorwertige Bewegungsvorschrift $\{d_i\}_{i \in \mathcal{I}}$ für die übrigen Knoten $\{x_i\}_{i \in \mathcal{I}}$, sodass die Gitterqualität ausreichend erhalten bleibt ($\mathcal{I} = \{1, \dots, M\} \setminus \mathcal{J}$).

Bemerkung 4.2. *Diese Formulierung ist bewusst allgemein gewählt. In vielen Anwendungsfällen beinhaltet die Menge $\{x_j\}_{j \in \mathcal{J}}$ genau die Knoten am Rand des diskretisierten Gebietes Ω , gesucht ist dann eine Bewegungsvorschrift für alle inneren Knoten. Ebenso ist die Bewertung der Gitterqualität sehr stark von der jeweiligen Anwendung abhängig. Im folgenden Abschnitt werden einige häufig verwendeten Kriterien genannt.*

4.1.3 Gitterqualität

In diesem Abschnitt wird der Begriff der Formregularität eingeführt. In weiterer Folge werden Kriterien genannt, die in der numerischen Strömungsmechanik zur Beurteilung der Gitterqualität verwendet werden.

Definition 4.1. *Für eine Zelle τ_l bezeichnet*

$$\Delta_l := \int_{\tau_l} dx$$

das **Volumen**, sowie

$$h_l := \Delta_l^{1/d}$$

die **lokale Maschenweite**. Weiters heißt

$$d_l := \sup_{x,y \in \tau_l} |x - y|$$

Durchmesser einer Zelle. Der **Radius** der größten in einer Zelle enthaltenen Kugel wird mit r_l bezeichnet.

Die Zellen eines Gitters (4.1) heißen **formregulär**, falls ihre Durchmesser gleichmäßig durch ein Vielfaches der Radien abgeschätzt werden können, also

$$d_l \leq c_F r_l \quad \text{für alle } l = 1, \dots, N$$

für eine von der Diskretisierung unabhängigen Konstante c_F gilt. Für dreidimensionale Gitter gilt damit

$$\frac{4}{3}\pi r_l^3 \leq \Delta_l = h_l^3 \leq d_l^3 \leq c_F^3 r_l^3.$$

Für die numerische Strömungsmechanik gilt neben der topologischen Korrektheit eines Gitters $\bigcup_{l=1}^M \tau_l$ die Konvexität der einzelnen Zellen τ_l als notwendiges Kriterium für die Gültigkeit eines Berechnungsgitters.

Definition 4.2. Eine Zelle τ_l ist genau dann konvex, wenn für alle Punkte $x, y \in \bar{\tau}_l$ auch alle Punkte der Strecke $\lambda x + (1 - \lambda)y$ in $\bar{\tau}_l$ liegen ($\lambda \in [0, 1]$).

Beinhaltet eine Begrenzungsfläche einer Zelle mehr als drei Knoten, so liegen diese im Allgemeinen nicht mehr in einer Ebene.

Definition 4.3. Als **Mittelpunkt** (Zentrum) c_l einer **Zelle** τ_l bezeichnet man das arithmetische Mittel der Koordinaten ihrer Knoten $x_{l,j}$, $j = 1, \dots, M_l$,

$$c_l := \frac{1}{M_l} \sum_{j=1}^{M_l} x_{l,j}. \quad (4.2)$$

Definition 4.4. Seien $\{\chi_{l,k}\}_{k=1}^{K_l}$ die begrenzenden Flächen der Zelle τ_l . Dann definiert man den **Mittelpunkt** (das Zentrum) $f_{l,k}$ der **Fläche** das arithmetische Mittel der Ecken $x_{l,\chi_{l,k}}$.

Definition 4.5. Als **Teiltetraeder** einer Zelle τ_l betrachtet man die folgenden Fälle für die Zerlegung:

1. Beinhaltet eine Fläche $\chi_{l,k}$ genau drei Knoten, so bildet man aus dieser Fläche und dem Zellzentrum c_l einen Tetraeder.
2. Beinhaltet eine Fläche $\chi_{l,k}$ $n > 3$ Knoten, so bildet man n Tetraeder aus jeweils einer Kante der Fläche, dem Zentrum der Fläche $f_{l,k}$ und dem Zellzentrum c_l .

Als gegenüber der Konvexität abgeschwächtes Kriterium wird ein Kriterium für die Teiltetraeder σ_k einer Zelle τ_l formuliert. Betrachtet wird zunächst das **Referenztetraeder**

$$\sigma = \left\{ \xi \in \mathbb{R}^3 : 0 \leq \xi_1 \leq 1, 0 \leq \xi_2 \leq 1 - \xi_1, 0 \leq \xi_3 \leq 1 - \xi_1 - \xi_2 \right\}.$$

Für $x \in \sigma_k$ gilt damit die lokale Parameterdarstellung

$$x = x_{k_1} + \sum_{i=1}^3 \xi_i (x_{k_{i+1}} - x_{k_1}) = x_{k_1} + J_k \xi, \quad \text{für } \xi \in \sigma.$$

Dann wird für alle Teiltetraeder σ_k gefordert, dass

$$\int_{\sigma_k} ds_x = \int_{\sigma} \det J_k d\xi > 0$$

erfüllt ist.

Definition 4.6. Als **Schiefe (skewness)** s_l einer Zelle τ_l mit Zentrum c_l und den Knoten $\{x_j\}_{j=1,\dots,M_l}$ definiert man den Wert

$$s_l = \frac{\max_{j=1,\dots,M_l} \|x_j - c_l\| - \min_{j=1,\dots,M_l} \|x_j - c_l\|}{\max_{j=1,\dots,M_l} \|x_j - c_l\|}. \quad (4.3)$$

Die Schiefe s_l kann Werte aus dem Intervall $[0, 1]$ annehmen, wobei größere Werte stärkeren Verzerrungen der Zellen zugeordnet sind.

Im folgenden bezeichne τ_l eine Zelle und $\chi_{l,f}$ eine ihrer Grenzflächen, sowie τ_n die an die selbe Fläche grenzende Nachbarzelle. Die entsprechenden Zellzentren seien c_l und c_n , $f_{\chi_{l,f}}$ sei das Zentrum von $\chi_{l,f}$ und $n_{\chi_{l,f}}$ der bezüglich τ_l nach außen gerichtete (gemittelte) Normalenvektor von $\chi_{l,f}$ in $f_{\chi_{l,f}}$.

Definition 4.7. Der **Zellen-Flächen-Zellen-Winkel** α_{cfc} ist als

$$\alpha_{cfc} = \angle \left(f_{\chi_{l,f}} - c_l, c_n - f_{\chi_{l,f}} \right), \quad (4.4)$$

definiert, falls $\chi_{l,f}$ nicht auf dem Rand Γ des diskretisierten Gebietes Ω liegt, und als

$$\alpha_{cfc} = \angle \left(f_{\chi_{l,f}} - c_l, n_{\chi_{l,f}} \right) \quad (4.5)$$

sonst.

Definition 4.8. Der **Zellen-Zellen-Flächen-Winkel** α_{ccf} ist definiert als

$$\alpha_{ccf} = \angle \left(c_n - c_l, n_{\chi_{l,f}} \right) \quad (4.6)$$

falls $\chi_{l,f}$ nicht auf dem Rand Γ des diskretisierten Gebietes Ω liegt, und als

$$\alpha_{ccf} = \angle \left(f_{\chi_{l,f}} - c_l, n_{\chi_{l,f}} \right) \quad (4.7)$$

sonst.

4.2 Interpolationsmethoden

Dieser Abschnitt behandelt die Anwendung von Interpolationsmethoden zur Deformierung von Berechnungsgittern. Dabei ist eine vektorwertige Bewegungsvorschrift für eine Menge von Knoten des Gitters gegeben und eine Vorschrift zur Bewegung der übrigen Knoten des Gitters soll daraus durch Interpolation bestimmt werden.

4.2.1 Transfinite Interpolation

Transfinite Interpolation eignet sich zur Deformierung von blockstrukturierten Gittern in zwei oder drei Dimensionen mit gegebenen Verschiebungen an den Rändern der jeweiligen Blöcke. Im folgenden wird ein einzelner Block des Gitters als betrachtetes Gebiet Ω angenommen. Die Anwendung auf allgemeinen Gittern entspricht der wiederholten Anwendung des Verfahrens auf jeden Block. Dieser Abschnitt gibt eine Einführung in die zweidimensionale transfinite Interpolation nach [9].

Den Ausgangspunkt für die transfinite Interpolation bildet eine univariate Interpolationsmethode und - im zweidimensionalen Fall - die Bildung eines zweidimensionalen Tensorproduktes.

Dazu wird angenommen, dass die gegebenen Verschiebungen der Einschränkung einer Funktion f auf den Rand $\partial\Omega = \Gamma$ des Gebietes Ω entsprechen. Betrachtet wird das Gebiet $\tilde{\Omega} := (0, 1) \times (0, 1)$ mit dem Rand $\tilde{\Gamma}$. Gesucht ist eine Funktion $u : \tilde{\Omega} \rightarrow \Omega$, die am Rand der Funktion $f : \tilde{\Gamma} \rightarrow \Gamma$ entspricht

$$u|_{\tilde{\Gamma}} = f,$$

oder in parametrisierter Schreibweise

$$\begin{aligned} u(0, \eta) &= f(0, \eta), & u(\xi, 0) &= f(\xi, 0), \\ u(1, \eta) &= f(1, \eta), & u(\xi, 1) &= f(\xi, 1). \end{aligned}$$

Unter Verwendung von Lagrange-Polynomen als univariater Interpolationsmethode ergibt sich für den zweidimensionalen Fall

$$\begin{aligned} u(\xi, \eta) &= (1 - \xi)f(0, \eta) + \xi f(1, \eta) + (1 - \eta)f(\xi, 0) + \eta f(\xi, 1) \\ &\quad - [(1 - \xi)(1 - \eta)f(0, 0) + (1 - \xi)\eta f(0, 1) + \xi(1 - \eta)f(1, 0) + \xi\eta f(1, 1)]. \end{aligned}$$

4.2.2 Interpolation mit radialen Basisfunktionen

Dieser Abschnitt behandelt die Anwendung der Interpolation mit radialen Basisfunktionen auf die Deformierung von Berechnungsgittern im \mathbb{R}^3 nach [11].

Für die Deformierung von Berechnungsgittern mittels Interpolation mit radialen Basisfunktionen ist die Bewegungsvorschrift im Allgemeinen als Menge von diskreten Verschiebungen $\{d_i\}_{i=1}^N \subset \mathbb{R}^3$ in N Punkten $\{x_i\}_{i=1}^N \subset \mathbb{R}^3$ gegeben. Die Punkte x_i

müssen dabei nicht notwendigerweise Knoten des betrachteten Gitters $\bar{\mathcal{T}}_M = \bigcup_{l=1}^M \tau_l$ sein.

Zur Bestimmung der Bewegungsvorschrift für die Knoten des Gitters wird angenommen, dass diese im diskretisierten Gebiet Ω von einer Funktion $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ beschrieben wird. Dabei wird f komponentenweise als f_x, f_y und f_z betrachtet. Die Funktionen $f_* : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ sollen durch Approximierende $s_* : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ der Form (1.13) unter den Interpolationsbedingungen (1.14) und den Nebenbedingungen (1.15) angenähert werden.

Name	$\phi(r)$		Ordnung k
Polyharmonic spline	r^m	$m \in \mathbb{N}$ ungerade	2
	$r^m \log r$	$m \in \mathbb{N}$ gerade	2
Thin-plate spline	$r^2 \log r$		2
Multiquadric biharmonics	$\sqrt{r^2 + c^2}$	$c \in \mathbb{R}$	1
Inverse multiquadric biharmonics	$\frac{1}{\sqrt{r^2 + c^2}}$	$c \in \mathbb{R}$	0
Gaussian	e^{-r^2}		0

Tabelle 4.1: Basisfunktionen mit globalem Träger

Name	$\phi(r)$
CP C ⁰	$(1 - r)^2$
CP C ²	$(1 - r)^4(4r + 1)$
CP C ⁴	$(1 - r)^6(\frac{35}{3}r^2 + 6r + 1)$
CP C ⁶	$(1 - r)^8(32r^3 + 25r^2 + 8r + 1)$
CPTS C ⁰	$(1 - r)^5$
CPTS C ⁴	$1 + \frac{80}{3}r^2 - 40r^3 + 15r^4 - \frac{8}{3}r^5 + 20r^2 \log r$
CPTS C _a ²	$1 - 30r^2 - 10r^3 + 45r^4 - 6r^5 - 60r^3 \log r$
CPTS C _b ²	$1 - 20r^2 + 80r^3 - 45r^4 - 16r^5 + 60r^4 \log r$

Tabelle 4.2: Basisfunktionen mit kompaktem Träger

In Tabelle 4.1 sind einige (bedingt) positiv definite Basisfunktionen mit globalem Träger und ihre Ordnungen aufgeführt. In Tabelle 4.2 finden sich positiv definite Basisfunktionen mit kompaktem Träger.

Für positiv definite Basisfunktionen bestimmen sich die Koeffizienten der Interpolierenden (1.13) durch die Lösung eines Gleichungssystems der Form

$$\Phi \underline{\lambda} = \underline{d}.$$

Bedingt positiv definite Basisfunktionen der Ordnung 0 ergeben Gleichungssysteme

$$\begin{pmatrix} \Phi & \underline{1} \\ \underline{1}^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\lambda} \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{d} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

und bedingt positiv definite Basisfunktionen der Ordnung 1 ergeben Systeme der Form

$$\begin{pmatrix} \Phi & P \\ P^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\lambda} \\ \underline{\omega} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{d} \\ \underline{0} \end{pmatrix}.$$

Die Einträge der $N \times N$ -Matrix ergeben sich aus dem der Basisfunktion ϕ zugeordneten Kern $\Phi_{x_i, x_j} = \Phi(x_i, x_j) = \phi(\|x_i - x_j\|)$ und die Zeilen der $N \times 4$ -Matrix P aus $[1, x_{x_i}, y_{x_i}, z_{x_i}]$, wobei x_{x_i}, y_{x_i} und z_{x_i} die Koordinaten der Punkte x_i sind.

Bemerkung 4.3. *Die Bewegungsvorschriften bei der Deformierung mit Interpolation mit radialen Basisfunktionen ergeben sich aus den Positionen der Punkte, in denen die Bewegung vorgegeben ist, und den Positionen der Gitterknoten im Raum – die Methode ist demnach **unabhängig vom Netztyp**.*

4.3 Anwendung partieller Differentialgleichungen

Eine weitere Klasse von Deformationsmethoden fordert für die Bewegungsvorschrift $\underline{u}(x)$ das Erfüllen einer Differentialgleichung für $x \in \Omega$ unter gegebenen Nebenbedingungen. In diesem Abschnitt werden einige häufig für die Deformierung von Berechnungsgittern verwendeten Differentialgleichungen und die jeweiligen Randbedingungen kurz vorgestellt.

4.3.1 Laplace Gleichung

Den einfachsten Fall für die Anwendung einer linearen partiellen Differentialgleichung zweiter Ordnung zur Bestimmung der vektorwertigen Deformierungsvorschrift $\underline{u}(x) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ ist die Laplace Gleichung ([2]).

Betrachtet wird das Dirichlet-Randwertproblem im Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$,

$$-\Delta \underline{u}(x) = \underline{0}, \quad \text{für } x \in \Omega, \quad (4.9)$$

unter der Randbedingung

$$\underline{u}(x) = \underline{g}(x), \quad \text{für } x \in \Gamma. \quad (4.10)$$

Aus der Formulierung folgt direkt die Möglichkeit (4.9) und (4.10) als entkoppeltes System partieller Differentialgleichungen in den einzelnen Komponenten $u_x(x)$ zu betrachten:

$$-\Delta u_i(x) = 0, \quad \text{für } x \in \Omega, \quad u_i(x) = g_i(x), \quad \text{für } x \in \Gamma, \quad i = 1, \dots, 3.$$

4.3.2 Lineare Elastostatik

Ein gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung ist das System der linearen Elastostatik. Hier eine kurze Einführung nach [28].

Zu bestimmen ist das vektorwertige Verschiebungsfeld \underline{u} , $x \in \Omega$, sodass für einen Körper mit elastischem, reversiblen, isotropem und homogenem Materialverhalten in einem beschränkten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ die Gleichgewichtsgleichungen

$$-\sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}(\underline{u}, x) = f_i(x) \quad \text{für } x \in \Omega, i = 1, \dots, 3,$$

für die Komponenten des Spannungstensors $\sigma_{ij}(\underline{u}, x)$ erfüllt sind. Unter der Annahme kleiner Deformationen und mit dem Hookeschen Gesetz ergibt sich unter Verwendung der Laméschen Elastizitätskonstanten (siehe [28]) das System

$$-\mu \Delta \underline{u}(x) - (\lambda + \mu) \text{grad div } \underline{u}(x) = \underline{f}(x) \quad \text{für } x \in \Omega. \quad (4.11)$$

Die Bewegungsvorschriften sind am Rand des Gebietes Γ in Form von Dirichlet-Randbedingungen

$$\underline{u}(x) = \underline{g}(x) \quad \text{für } x \in \Gamma$$

gegeben.

4.3.3 Bi-Laplace Gleichung

In diesem Abschnitt wird eine Einführung in die Deformierung von Berechnungsgittern unter Verwendung des Bi-Laplace Operators nach [18] gegeben.

Die in den Abschnitten 4.3.1 und 4.3.2 beschriebenen Methoden führen auf partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung in Form von Dirichlet-Randwertproblemen. Durch das Setzen der Dirichlet-Randbedingungen wird mit

$$\underline{u}(x) = \underline{g}_D(x), \quad \text{für } x \in \Gamma,$$

die Deformierung am Rand Γ des betrachteten Gebietes Ω vorgegeben. Neumann-Randbedingungen der Form

$$\frac{\partial}{\partial \underline{n}} \underline{u}(x) = \underline{g}_N(x), \quad \text{für } x \in \Gamma,$$

beeinflussen bei der Gitterdeformierung das Verhalten der Gitterknoten nahe des Randes, der sogenannten Randschicht. Die Gitterqualität der Randschicht ist in der numerischen Strömungsmechanik von besonderem Interesse. Um sowohl Dirichlet- als auch Neumann-Randbedingungen am gesamten Rand setzen zu können wird in [18] die Formulierung einer partiellen Differentialgleichung vierter Ordnung vorgeschlagen.

Betrachtet wird die Bi-Laplace Gleichung

$$\Delta^2 \underline{u}(x) = \underline{0}, \quad \text{für } x \in \Omega. \quad (4.12)$$

Nach den Ergebnissen aus Abschnitt 3.1 ist das Randwertproblem mit Dirichlet- und Neumann-Randbedingung wohlgestellt. Zu bestimmen ist demnach die vektorwertige Lösung $\underline{u}(x)$ der Gleichung (4.12) unter den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \underline{u}(x) &= \underline{g}(x), & \text{für } x \in \Gamma, \\ \frac{\partial}{\partial \underline{n}} \underline{u}(x) &= \underline{0}, & \text{für } x \in \Gamma. \end{aligned}$$

Die einzelnen Raumrichtungen der vektorwertigen Funktion $\underline{u}(x)$ sind entkoppelt. Die Verwendung der Bi-Laplace Gleichung zur Deformierung von Berechnungsgittern lässt sich demnach schreiben als

$$\Delta^2 u_i(x) = 0, \quad \text{für } x \in \Omega, \quad (4.13)$$

unter den Randbedingungen

$$u_i(x) = g_i(x), \quad \text{für } x \in \Gamma, \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial \underline{n}} u_i(x) = 0, \quad \text{für } x \in \Gamma, \quad (4.15)$$

für $i = 1, \dots, 3$.

Bemerkung 4.4. *Eine Möglichkeit zur numerischen Bestimmung einer Lösung von (4.13) unter den Nebenbedingungen (4.14) und (4.15) liegt in der Verwendung der Methode der Fundamentallösungen. Die Lösung wird dabei ausschließlich aus der Kenntnis der Positionen der Gitterknoten im Raum und den vorgegebenen Verschiebungen am Rand bestimmt. Die Deformierung von Berechnungsgittern unter Verwendung des Bi-Laplace Operators mit der Methode der Fundamentallösungen ist somit ein **netz-unabhängiges Verfahren**.*

4.4 Diskrete Formulierungen

Bei den in Abschnitt 4.3 vorgestellten Methoden handelt es sich um kontinuierliche Formulierungen. Eine weitere Möglichkeit zur Deformierung von Berechnungsgittern ist eine Formulierung auf der durch das Gitter gegebenen diskreten Struktur.

Eine häufig verwendete Methode ist die Betrachtung der Kanten eines Gitters als Hooke'sche Federn (z. B. [5]). Dabei ist die Steifigkeit k_{ij} einer Feder zwischen zwei Knoten x_i und x_j indirekt proportional zu ihrer Länge $l_{ij} = |x_i - x_j|$,

$$k_{ij} \propto \frac{1}{l_{ij}}.$$

Am Rand des Gitters wird eine Verschiebung vorgegeben. Dadurch ändert sich die Länge, und damit die Steifigkeit, der mit den bewegten Knoten verbundenen Federn. Das System wird solange iterativ neu bestimmt, bis ein Gleichgewichtszustand erreicht wird. Diese Formulierung verhindert die Kollision zweier Knoten, sie verhindert jedoch nicht, dass ein Knoten durch eine ihm in einer Zelle gegenüberliegende Fläche tritt. Dadurch können, besonders bei starken Deformierungen der Geometrie, Zellen mit negativen Volumina entstehen. Für Tetraedergitter wurde deshalb eine Erweiterung mit Torsionsfedern vorgeschlagen. Dabei werden in den Tetraedern weitere Dreiecke eingeschrieben. In den Ecken der eingeschriebenen Dreiecke werden Torsionsfedern modelliert, deren Steifigkeit indirekt proportional zu ihrem Öffnungswinkel ist. Eine ausführliche Beschreibung findet sich z. B. in [12, 14].

5 Ergebnisse

5.1 Wahl der Basisfunktion

De Boer et al. betrachten in [11] die Wahl verschiedener Basisfunktionen sowohl mit kompaktem, als auch mit globalem Träger. Die Wahl von Basisfunktionen mit globalem Träger führt zu einer voll besetzten Teilmatrix Φ in (1.16). Die in den Punkten $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^N$ gegebenen Verschiebungen beeinflussen dann die Werte von $s(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^3$, also insbesondere alle weiteren Knoten des gegebenen Gitters.

Wird bei Basisfunktionen mit kompaktem Träger der Trägerradius r so gewählt, dass nicht für jeden gegebenen Punkt x_i die gesamte Menge \mathcal{X} innerhalb der Kugel $\mathcal{B}_r(x_i)$ liegt, ist die Teilmatrix Φ nicht voll besetzt. Dadurch verringern sich sowohl der Berechnungs- als auch der Speicheraufwand in der numerischen Behandlung. Die in den Punkten x_i gegebenen Verschiebungen beeinflussen demnach nur Punkte innerhalb der Kugeln $\mathcal{B}_r(\xi)$. Somit ist für jeden Anwendungsfall ein von der Geometrie des Gebietes und den gegebenen Verschiebungen abhängiger Radius r zu wählen.

Bei den in [11] behandelten Beispielen wird die Zellqualität - aus der Klasse der Basisfunktionen mit globalem Träger - mit den Basisfunktionen $\phi(r) = r^2 \log r$ und $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$ am besten erhalten.

Aufgrund dieser Ergebnisse und der Verfügbarkeit der in Kapitel 2 behandelten effizienten Lösungsverfahren wurde diese Arbeit auf die Betrachtung der Basisfunktion

$$\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2} \tag{5.1}$$

eingeschränkt.

5.2 Laufzeitverhalten der Bestimmung der Interpolierenden

Betrachtet werden die Laufzeitergebnisse der Deformierung eines Berechnungsgitters mittels Interpolation mit radialen Basisfunktionen unter Verwendung der in Kapitel 2 beschriebenen Verfahren zur Bestimmung der Interpolationskoeffizienten. Alle Berechnungen wurden auf einer Workstation mit zwei Intel Xeon X5670 CPUs mit jeweils sechs Kernen bei einer Taktung von 2.93GHz durchgeführt.

Zur Betrachtung des Laufzeitverhaltens einer Implementierung zur Bestimmung der Interpolationskoeffizienten dienen die Diskretisierungen einer Kugel mit verschiedenen

Schrittweiten als Testgeometrien. Zur Bestimmung des Laufzeitverhaltens der Deformierung mittels Evaluierung der Interpolierenden werden verschiedene Diskretisierungen eines innerhalb der gegebenen Kugel liegenden Würfels betrachtet. Die auszuwertende Interpolierende hat dabei $\approx 9 \cdot 10^5$ Interpolationszentren.

Abbildung 5.1 zeigt das Laufzeitverhalten für die Bestimmung der Interpolierenden. Dabei werden die Laufzeiten für die Konstruktion der in Abschnitt 2.1 beschriebenen \mathcal{L} -Sets sowie die Laufzeiten der Iterationen des Lösungsverfahrens getrennt aufgetragen. Abbildung 5.2 zeigt die Laufzeiten der Auswertung.

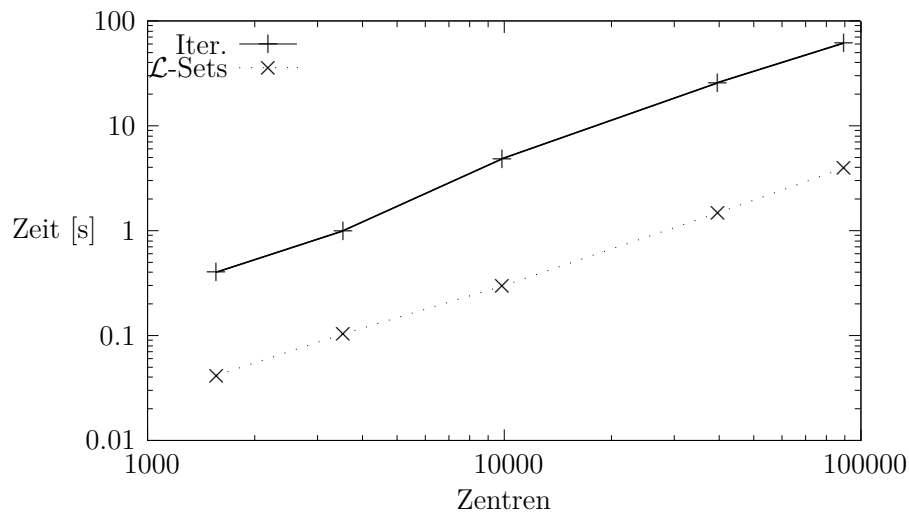


Abbildung 5.1: Laufzeiten der Iterationen des Lösungsverfahrens und der Konstruktion der \mathcal{L} -Sets

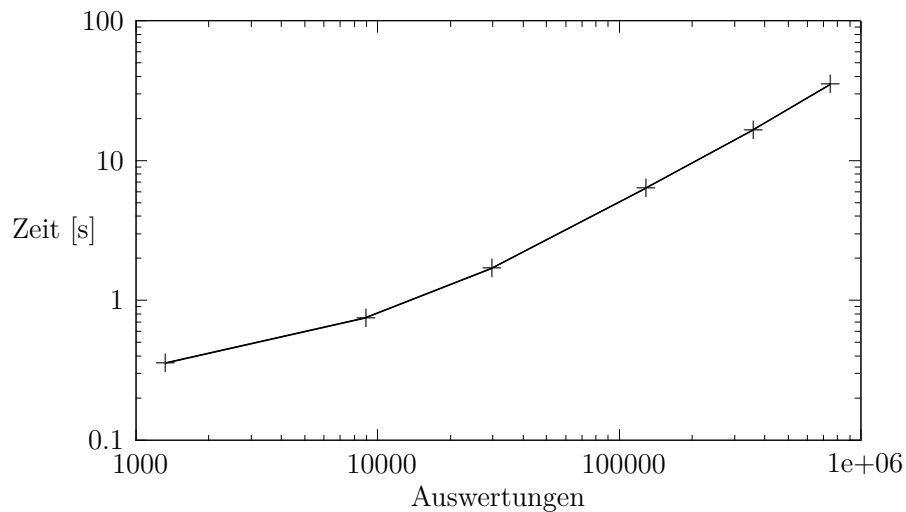


Abbildung 5.2: Laufzeiten zur Auswertung der Interpolierenden

5.3 Vergleich der Deformierungsmethoden

In diesem Abschnitt werden Ergebnisse der Deformierung eines Berechnungsgitters mittels Interpolation mit radialen Basisfunktionen und unter Anwendung der Methode der Fundamentallösungen zur Lösung der Bi-Laplace Gleichung verglichen.

Als erste Testgeometrie dient eine Diskretisierung eines Stabes. Die Diskretisierungsschrittweite beträgt $h \approx 0.002$. Die Abbildungen 5.3 und 5.4 zeigen die Oberfläche und einen Schnitt durch die Diskretisierung der Ausgangsgeometrie. Abbildung 5.5 zeigt die Oberfläche der deformierten Geometrie.

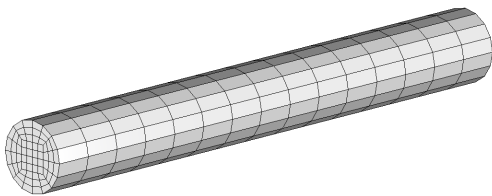


Abbildung 5.3: Ausgangsoberfläche

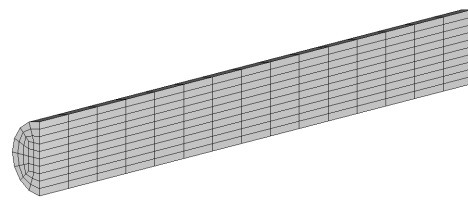


Abbildung 5.4: Schnitt durch die Diskretisierung

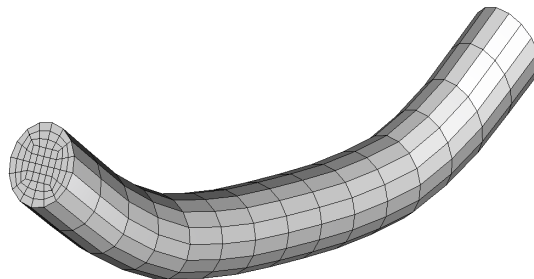


Abbildung 5.5: Deformierte Oberfläche

Dieses Gitter wurde mittels Interpolation mit radialen Basisfunktionen deformiert. Als Parameter der Basisfunktion (5.1) wurde $c = 0.001$ gewählt. Abbildung 5.6 zeigt einen Schnitt durch das resultierende Gitter. Für die Deformierung mit der Methode der Fundamentallösungen zur Lösung der Bi-Laplace Gleichung wurde der Parameter zur Bestimmung der Position der Singularitäten (3.9) $d = 0.002$ gewählt. Abbildung 5.7 zeigt einen Schnitt durch das daraus resultierende Gitter.

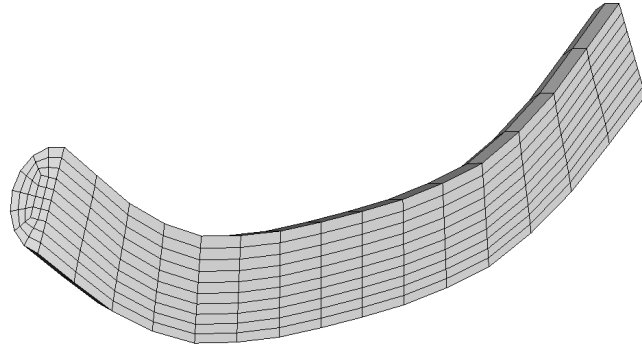


Abbildung 5.6: Ergebnis mit RBF Interpolation - $c = 0.001$

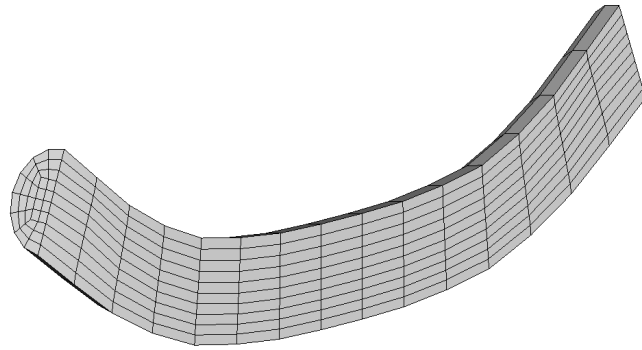


Abbildung 5.7: Ergebnis mit MFS Bi-Laplace - $d = 0.001$

Die unter Anwendung der beiden Verfahren deformierten Gitter sind nahezu deckungsgleich. Beide Verfahren eignen sich gleichermaßen zur Deformierung dieser Testgeometrie.

Als nicht konvexe Testgeometrie wurde eine Platte in einem Würfel untersucht. Zur Deformierung wird die Platte verschoben und rotiert, die Oberfläche des umschließenden Würfels wird dabei fest gehalten. Abbildung 5.8 zeigt die Oberfläche der Ausgangsgeometrie. Es wurden zwei Varianten dieser Konfiguration untersucht. In Variante 1 wird die Platte leicht gegenüber der Grundfläche verschoben und um 30° um eine Hauptrichtung rotiert. In Variante 2 wird die Platte stärker gegenüber der Grundfläche verschoben und um 60° rotiert. Abbildung 5.9 zeigt die Oberfläche in Variante 1, Abbildung 5.10 die Oberfläche in Variante 2.

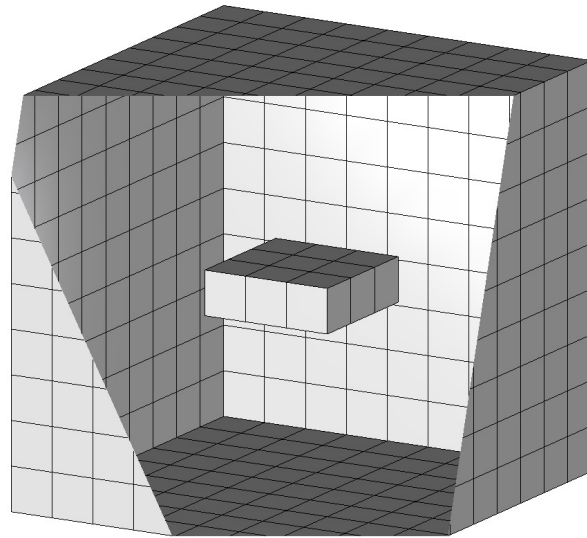


Abbildung 5.8: Ausgangsoberfläche

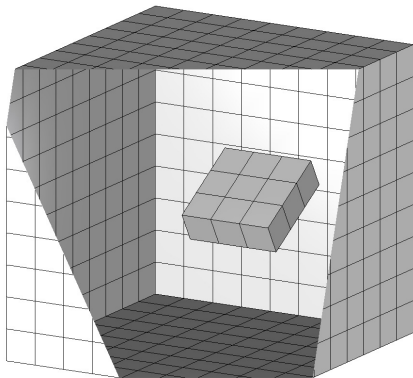


Abbildung 5.9: Oberfläche - Variante 1

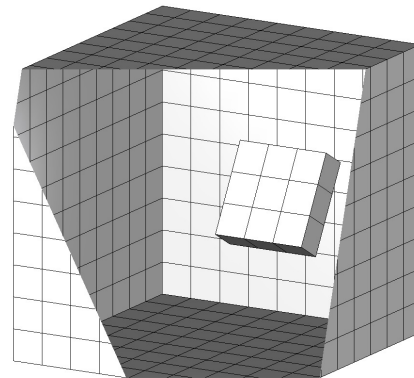


Abbildung 5.10: Oberfläche - Variante 2

Deformiert wird eine Diskretisierung mit Diskretisierungsschrittweite $h = 0.01$. Zur besseren Beurteilbarkeit der Bewegungsergebnisse wurden an der Oberfläche 5 Rand-

schichten mit einer Stärke von etwa 0.0005 aufgetragen. Abbildung 5.11 zeigt einen Schnitt durch die Diskretisierung der Ausgangsgeometrie.

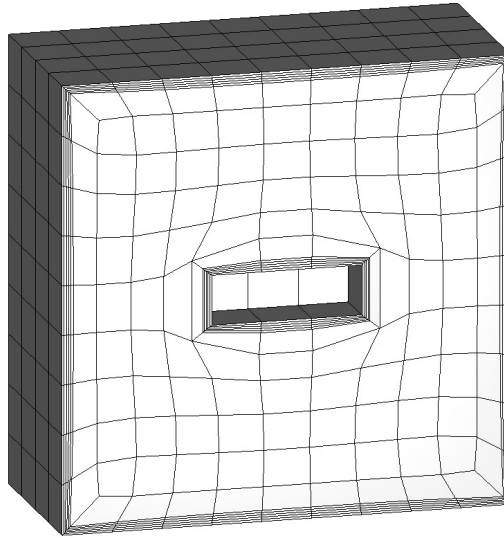


Abbildung 5.11: Schnitt durch die Diskretisierung

Zur Deformierung mit der Interpolation mit radialen Basisfunktionen wurde in beiden Varianten der Parameter der Basisfunktion (5.1) $c = 0.02$ gewählt. Zur Bestimmung der Singularitäten bei der Deformierung mittels der Bi-Laplace Gleichung wurde in beiden Varianten der Parameter (3.9) $d = 0.002$ gewählt. In den Abbildungen 5.12 und 5.13 werden Schnitte durch die resultierenden Gitter in Variante 1 gezeigt.

Die Abbildungen 5.14 und 5.15 zeigen die Ergebnisse in Variante 2. Die Abbildungen 5.16 und 5.17 zeigen die Randschichten um die verschobene und rotierte Platte in Variante 2. Bei der Deformierung mit der Interpolation mit radialen Basisfunktionen bleibt das Gitter in diesem Bereich gültig. Bei der Deformierung mit der Bi-Laplace Gleichung treten in diesem Bereich bereits invertierte Zellen auf.

Bei der Anwendung der Methode der Fundamentallösungen auf nicht-konvexen Gebieten ist die Wahl der Positionen für die in der Lösungsdarstellung (3.7) auftretenden Singularitäten eingeschränkt. Damit ist die Methode der Fundamentallösungen zur numerischen Bestimmung einer Lösung der Bi-Laplace Gleichung in der in dieser Arbeit betrachteten Formulierung nur bedingt zur Deformierung von nicht-konvexen Geometrien geeignet.

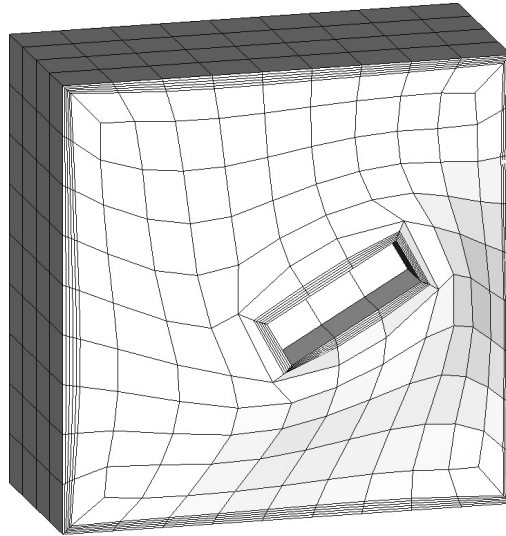


Abbildung 5.12: Ergebnis in Variante 1 mit RBF - $c = 0.02$

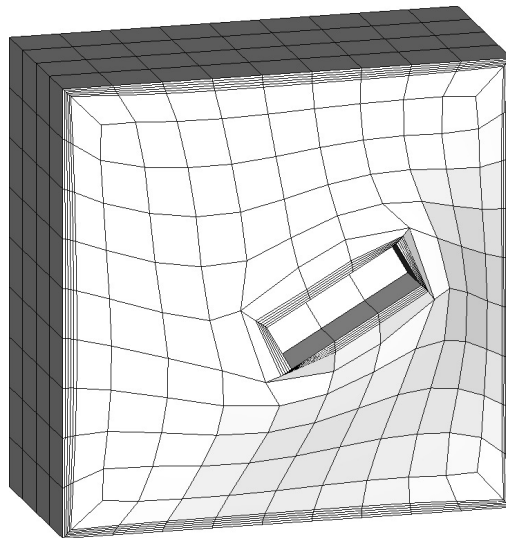


Abbildung 5.13: Ergebnis in Variante 1 mit MFS Bi-Laplace - $d = 0.002$

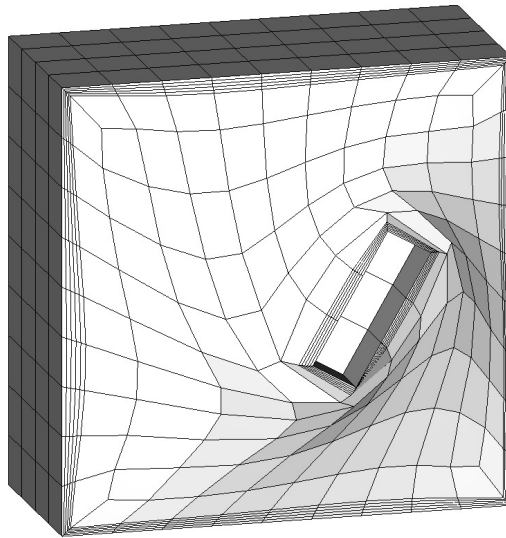


Abbildung 5.14: Ergebnis in Variante 2 mit RBF - $c = 0.02$

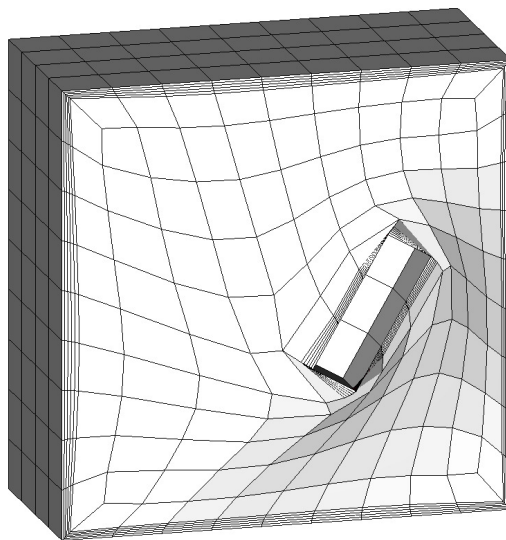


Abbildung 5.15: Ergebnis in Variante 2 mit MFS Bi-Laplace - $d = 0.002$

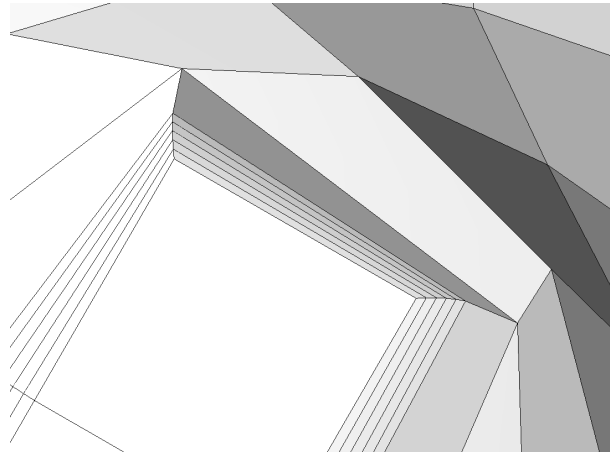


Abbildung 5.16: Detail der starken Deformierung mit RBF - $c = 0.02$

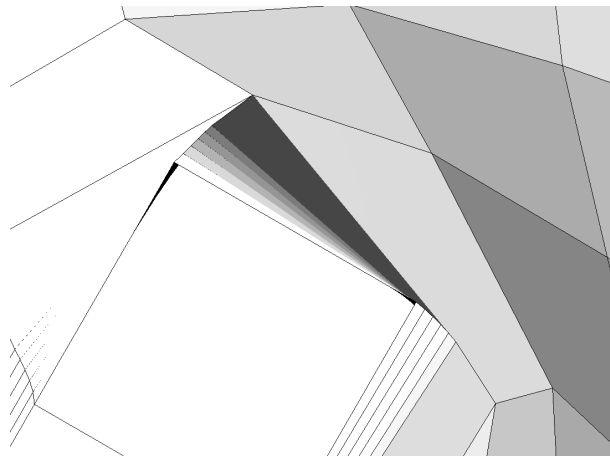


Abbildung 5.17: Detail der starken Deformierung mit MFS Bi-Laplace - $d = 0.002$

5.4 Verbrennungsmotor

In diesem Abschnitt wird die Deformierung eines Berechnungsgitters eines Teiles des Brennraums eines Verbrennungsmotors mittels Interpolation mit radialen Basisfunktionen zur Demonstration der Anwendbarkeit dieser Methode auf praxisrelevante Beispiele gezeigt.

Das zu deformierende Berechnungsgitter besteht aus $\approx 3,8 \cdot 10^5$ Zellen mit $\approx 4,0 \cdot 10^5$ Knoten. Die Anzahl der Knoten am Rand des Gitters – die Anzahl der gegebenen diskreten Verschiebungen – beträgt $\approx 3,9 \cdot 10^4$.

Das im Rahmen dieser Arbeit implementierte Verfahren zur Lösung der Bi-Laplace Gleichung mit der Methode der Fundamentallösungen eignet sich aufgrund der großen Zahl der gegebenen Verschiebungen nicht mehr zur Deformierung des hier betrachteten Gitters.

Betrachtet wird der Brennraum eines Verbrennungsmotors mit realer Geometrie am Brennraumdach und vereinfachter Geometrie am Kolben. In der behandelten Konfiguration sind zwei Ventile geöffnet. Die in den geöffneten Ventilen entstehenden Ventilspalte und ein Teil der daran anschließenden Kanäle sind ebenfalls diskretisiert. Abbildung 5.18 zeigt die Oberfläche der Ausgangsgeometrie, Abbildung 5.19 zeigt einen Schnitt durch die Oberfläche der Ausgangsgeometrie parallel zur Zylinderachse durch ein geöffnetes Ventil.

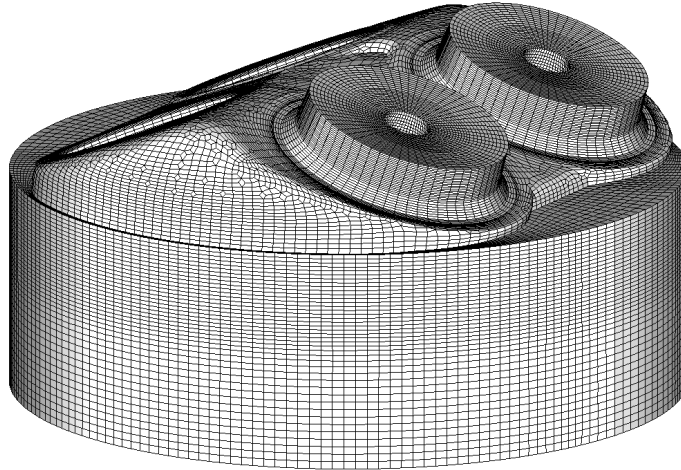


Abbildung 5.18: Ausgangsoberfläche - 420° Kurbelwinkel

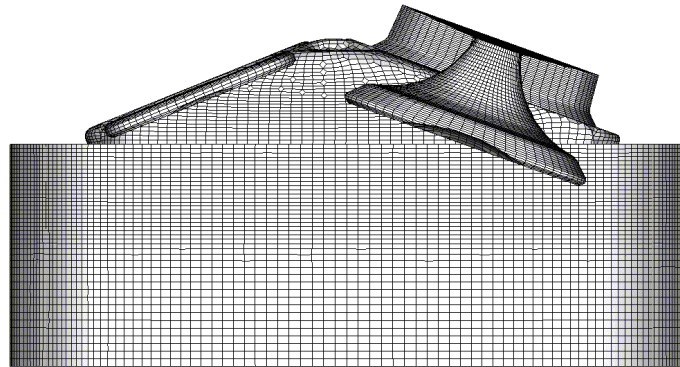


Abbildung 5.19: Schnitt durch die Ausgangsoberfläche

Ziel der Deformierung ist die Darstellung eines anderen Zeitpunktes im Verbrennungszyklus. Hier sollen zwei weitere Zeitpunkte des Zyklus dargestellt werden. Die Positionen der Oberfläche werden zur leichteren Orientierung mit dem von der Kurbelwelle des Motors zu diesem Zeitpunkt überstrichenen Winkels identifiziert. Das Ausgangsgitter entspricht in diesem Modell einer Position von 420° Kurbelwinkel. Das in diesem Beispiel behandelte Gitter soll zu den 400° bzw. 460° Kurbelwinkel entsprechenden Positionen deformiert werden. Die Abbildungen 5.20 und 5.21 zeigen Schnitte durch die Oberfläche der Geometrie bei den Zielpositionen.

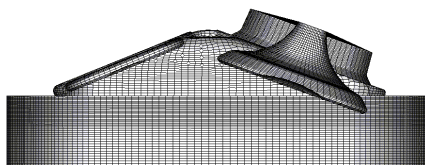


Abbildung 5.20: Schnitt - 400°

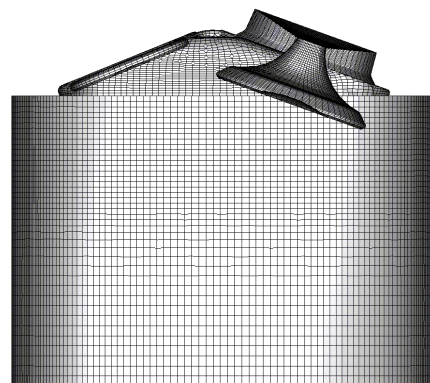


Abbildung 5.21: Schnitt - 460°

Abbildung 5.22 zeigt einen Schnitt durch die Diskretisierung der Ausgangsgeometrie. Die Abbildungen 5.23 und 5.24 zeigen Schnitte durch die resultierenden Gitter nach der Deformierung mit Interpolation mit radialen Basisfunktionen.

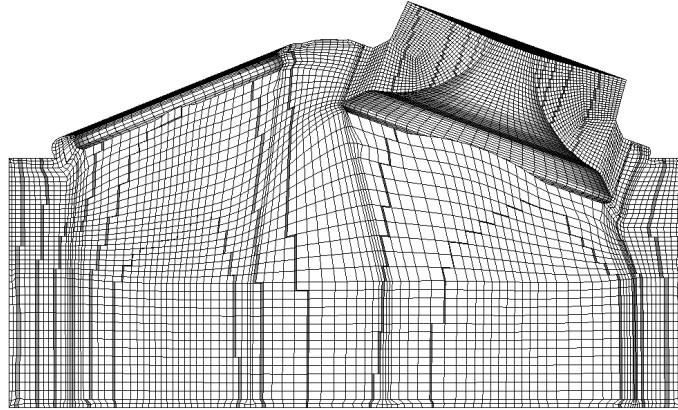


Abbildung 5.22: Schnitt durch das Ausgangsgitter - 420 Grad Kurbelwinkel

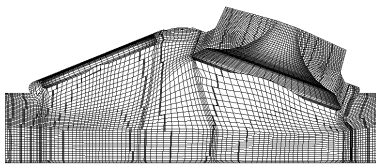


Abbildung 5.23: Schnitt - 400°

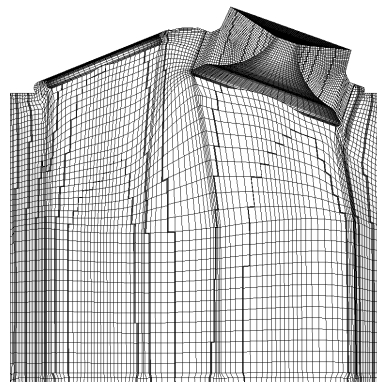


Abbildung 5.24: Schnitt - 460°

Abbildung 5.25 zeigt einen Schnitt durch die Diskretisierung der Ausgangsgeometrie. Der dargestellte Ausschnitt zeigt den Ventilspalt, einen Teil des Ventils sowie den anschließenden Teil des Brennraumes. Die Abbildungen 5.26 und 5.27 zeigen diesen Ausschnitt nach der Deformierung.

Dieses Testgitter stammt aus einer Anwendung in der numerischen Strömungsmechanik. Bei beiden Deformierungen bleibt die, für die Anwendbarkeit der Gitter geforderte, Gitterqualität bei der Deformierung mittels Interpolation mit radialen Basisfunktionen in ausreichendem Maße erhalten.

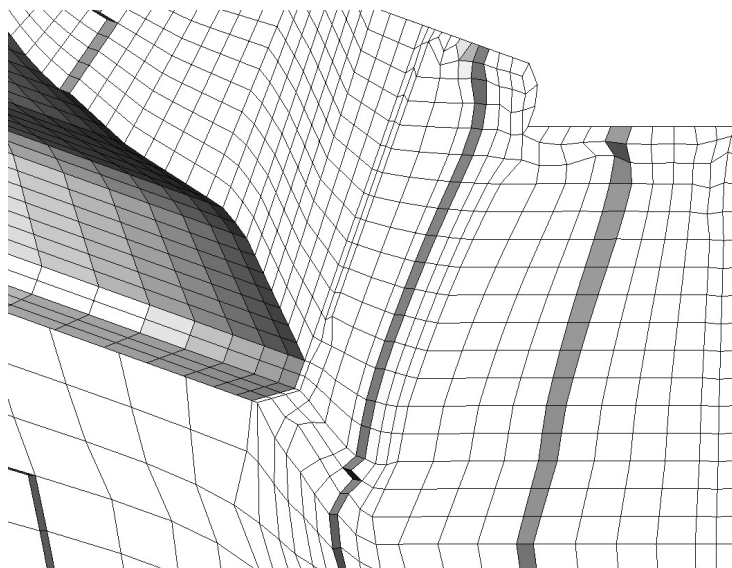


Abbildung 5.25: Detail des Ausgangsgitters - 420° Kurbelwinkel

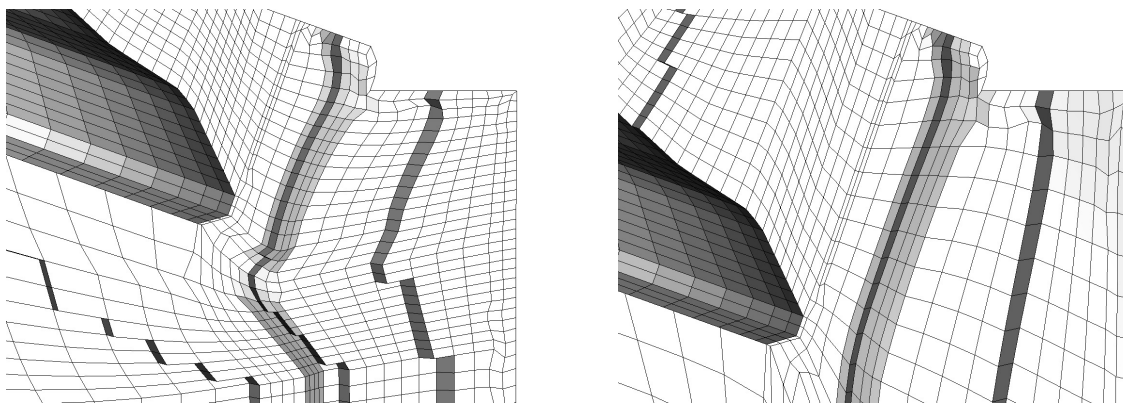


Abbildung 5.26: Detail - 400° Kurbelwinkel Abbildung 5.27: Detail - 460° Kurbelwinkel

6 Ausblick

In diesem Kapitel wird ein kurzer Ausblick auf weiterführende Fragestellungen und Themen aus dem Umkreis dieser Diplomarbeit gegeben.

6.1 Interpolation mit radialen Basisfunktionen

6.1.1 Untersuchung weiterer Basisfunktionen im \mathbb{R}^3

De Boer et al. testen in [11] verschiedene Basisfunktionen für die Gitterdeformierung – vorrangig für Deformierungsprobleme im \mathbb{R}^2 . Aufgrund des hohen Rechenaufwandes bei Anwendungen im \mathbb{R}^3 steht ein umfassender Vergleich von Ergebnissen mit verschiedenen Basisfunktionen bei praxisrelevanten Beispielen für dreidimensionale Probleme noch aus.

6.1.2 Weitere Anwendung der Interpolation mit radialen Basisfunktionen im Bereich der Gittergenerierung

Durch ein Verfahren zur effizienten Bestimmung der Trajektorien einer Interpolierenden werden weitere Anwendungsmöglichkeiten der Interpolation mit radialen Basisfunktionen im Bereich der Gittergenerierung eröffnet. Ein Beispiel dafür ist die Rekonstruktion fehlerhafter Oberflächendaten (z. B. [6]) als Eingabedaten für automatisierte Diskretisierungsmethoden. Eine weitere Anwendungsmöglichkeit besteht in der Skelettierung von Eingabedaten (z. B. [22]).

6.2 Partielle Differentialgleichungen vierter Ordnung

6.2.1 Weitere Verfahren zur Lösung der Bi-Laplace Gleichung

Die in dieser Arbeit behandelte Methode der Fundamentallösung zur Lösung der Bi-Laplace Gleichung eignet sich nur zur Deformierung von Gittern mit einer vergleichsweise kleinen Zahl an Knoten. Weiters ist die Möglichkeit zur Positionierung der im Verfahren auftretenden Singularitäten außerhalb des betrachteten Gebietes bei nicht-konvexen Geometrien eingeschränkt.

Somit eröffnet sich die Frage nach Deformierungsergebnissen unter Anwendung anderer Verfahren zur numerischen Bestimmung einer Lösung für die Bi-Laplace Gleichung, z. B. der Randelementmethode.

6.2.2 Erweiterung der betrachteten Differentialgleichungen

Helenbrook motiviert in [18] die Wahl einer partiellen Differentialgleichung vierter Ordnung für die Bestimmung der Deformationsvorschrift mit der Möglichkeit, Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen am gesamten Rand des betrachteten Gebietes setzen zu können. Daraus ergibt sich die Frage nach der Anwendbarkeit von weiteren partiellen Differentialgleichungen vierter Ordnung für die Deformierung von Berechnungsgittern.

Die Bi-Laplace Gleichung kann als Generalisierung vierter Ordnung der Laplace-Gleichung betrachtet werden. In der Bi-Laplace Gleichung treten die Raumdimensionen entkoppelt auf. Bei der Deformierung mit linearer Elastizität treten die Raumrichtungen im resultierenden System partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung gekoppelt auf. Damit ergibt sich die Generalisierung vierter Ordnung des Systems (4.11) als mögliches, zu betrachtendes System partieller Differentialgleichungen.

Literaturverzeichnis

- [1] C. J. S. Alves. RBF as MFS approximations in higher dimension. In *Procs. of the VIII World Congress on Computational Mechanics, WCCM'08*. Springer, 2008.
- [2] K. J. Bathe, Zhang H., and Ji S. Finite element analysis of fluid flows fully coupled with structural interactions. *Comput. Struct.*, 72(1–3):1 – 16, 1999.
- [3] R. K. Beatson and L. Greengard. A short course on fast multipole methods. In *Wavelets, Multilevel Methods and Elliptic PDEs*, pages 1–37. Oxford University Press, 1997.
- [4] M. D. Buhmann. *Radial basis functions: theory and implementations*. Cambridge monographs on applied and computational mathematics. Cambridge University Press, 2003.
- [5] C. O. E. Burg. A robust unstructured grid movement strategy using three-dimensional torsional springs. In *AIAA Paper 2004-2529, 34th AIAA Fluid Dynamics Conference*, Portland, Oregon, June 2004.
- [6] J. C. Carr, R. K. Beatson, J. B. Cherrie, T. J. Mitchell, W. R. Fright, B. C. McCallum, and T. R. Evans. Reconstruction and representation of 3d objects with radial basis functions. In *Proceedings of the 28th annual conference on Computer graphics and interactive techniques, SIGGRAPH '01*, pages 67–76, New York, NY, USA, 2001. ACM.
- [7] C. S. Chen, Y. C. Hon, and R. A. Schaback. *Scientific computing with radial basis functions*. Georg-August-Universität zu Göttingen, 2003. Unpublished manuscript.
- [8] J. B. Cherrie, R. K. Beatson, and G. N. Newsam. Fast evaluation of radial basis functions: Methods for generalized multiquadrics in rn. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23(5):1549–1571, 2002.
- [9] T. J. Chung. *Computational Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2002.
- [10] P. G. Ciarlet. *Mathematical Elasticity Volume II: Theory of Plates*, volume 27 of *Studies in Mathematics and Its Applications*. Elsevier, 1997.
- [11] A. de Boer, M. S. van der Schoot, and H. Bijl. Mesh deformation based on radial basis function interpolation. *Comput. Struct.*, 85:784–795, June 2007.
- [12] C. Degand and C. Farhat. A three-dimensional torsional spring analogy method for unstructured dynamic meshes. *Comput. Struct.*, 80(3–4):305 – 316, 2002.
- [13] G. Fairweather and A. Karageorghis. The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems. *Adv. Comput. Math.*, 9:69–95, 1998.

- [14] C. Farhat, C. Degand, B. Koobus, and M. Lesoinne. Torsional springs for two-dimensional dynamic unstructured fluid meshes. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 163:231–245, 1998.
- [15] A. C. Faul, G. Goodsell, and M. J. D. Powell. A Krylov subspace algorithm for multiquadric interpolation in many dimensions. *IMA J. Num. Anal.*, 25(1):1–24, 2005.
- [16] A. C. Faul and M. J. D. Powell. Krylov subspace methods for radial basis function interpolation. In D. F. Griffiths, editor, *Numerical Analysis 1999*, page 115–141. Chapman and Hall, 2000.
- [17] N. A. Gumerov and R. Duraiswami. Fast radial basis function interpolation via preconditioned krylov iteration. *SIAM J. Sci. Comput.*, 29(5):1876–1899, 2007.
- [18] B. T. Helenbrook. Mesh deformation using the biharmonic operator. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 56(7):1007–1021, 2003.
- [19] A. Karageorghis and G. Fairweather. The method of fundamental solutions for the numerical solution of the biharmonic equation. *J. Comp. Phys.*, 69(2):434 – 459, 1987.
- [20] E. Kreyszig. *Advanced Engineering Mathematics, 8th ed.* John Wiley & Sons, Inc., 1999.
- [21] Y. J. Liu, N. Nishimura, and Z. H. Yao. A fast multipole accelerated method of fundamental solutions for potential problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 29(11):1016 – 1024, 2005.
- [22] W. Ma, F. Wu, and M. Ouhyoung. Skeleton extraction of 3d objects with radial basis functions. In *Proceedings of the Shape Modeling International 2003*, pages 207–, Washington, DC, USA, 2003. IEEE Computer Society.
- [23] A. Meister. *Numerik linearer Gleichungssysteme: eine Einführung in moderne Verfahren.* Vieweg, 2008.
- [24] C.A. Micchelli. Interpolation of scattered data: Distance matrices and conditionally positive definite functions. *Constructive Approx.*, 1:11–22, 1986.
- [25] A. Poullikkas, A. Karageorghis, and G. Georgiou. Methods of fundamental solutions for harmonic and biharmonic boundary value problems. *Comp. Mech.*, 21:416–423, 1998.
- [26] T. C. S. Rendall and C. B. Allen. Unified fluid–structure interpolation and mesh motion using radial basis functions. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 74(10):1519–1559, 2008.
- [27] W. Rudin. *Functional analysis.* International series in pure and applied mathematics. McGraw-Hill, 1991.
- [28] O. Steinbach. *Numerische Näherungsverfahren für elliptische Randwertprobleme.* Advances in Numerical Mathematics. B. G. Teubner Verlag, 2003.
- [29] H. Wendland. *Konstruktion und Untersuchung radialer Basisfunktionen mit kompaktem Träger.* Georg-August-Universität zu Göttingen, 1996.

- [30] H. Wendland. *Scattered Data Approximation*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press, 2010.
- [31] D. Widder. *The Laplace Transform*. Princeton University Press, 1946.

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Graz, am
.....
(Unterschrift)