Diplomarbeit

Gitterfreie Methoden zur Berechnung harmonischer baryzentrischer Koordinaten für die Geometrieverarbeitung

vorgelegt von

Tobias G. Pfeiffer

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom-Mathematiker

Fachbereich Mathematik und Informatik

Freie Universität Berlin

Betreuer: Prof. Dr. Konrad Polthier

Zusammenfassung

Verallgemeinerte baryzentrische Koordinaten sind ein wichtiges Hilfsmittel in der Geometrieverarbeitung, Numerik und Computergrafik. Ihre Anwendungen reichen von der Interpolation von auf einem Gebietsrand gegebenen Daten bis hin zur Deformation komplexer 3D-Geometrien. *Harmonische Koordinaten* sind dabei aufgrund besonderer analytischer Eigenschaften eine beliebte Wahl.

In dieser Arbeit wird zunächst ein Überblick über die vielfältigen Anwendungsbereiche baryzentrischer Koordinaten und bekannte Eigenschaften harmonischer Funktionen gegeben. Im Anschluss werden nach einer kurzen Vorstellung populärer gitterbasierter Lösungsverfahren vor allem solche Verfahren beleuchtet, für die kein Gitter im Rechenbereich erzeugt werden muss; dabei wird der Fokus auf die Anwendbarkeit zur Berechnung harmonischer Koordinaten gelegt. Die vorgestellten Verfahren werden im Hinblick auf verschiedene Aspekte (u. a. Laufzeit, Speicherverbrauch) analysiert und verglichen.

Der wesentliche Beitrag dieser Arbeit besteht in der Präsentation und Evaluation verschiedener Verfahren in einem einheitlichen Rahmen. Neben den theoretischen Grundlagen jeder Methode wird das nötige Wissen vermittelt, um eine prototypische Implementierung vornehmen zu können. Es werden weiterhin die Ähnlichkeiten zwischen den vorgestellten Verfahren aufgezeigt und Empfehlungen für die Wahl eines konkreten Verfahrens vor dem Hintergrund verschiedener Problemparameter gegeben.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Ich versichere außerdem, dass die vorliegende Arbeit noch nicht einem anderen Prüfungsverfahren zugrunde gelegen hat.

Berlin, den 20. April 2011

Eigener Beitrag

Harmonische baryzentrische Koordinaten haben vielfältige Anwendung in der Geometrieverarbeitung, Numerik und Computergrafik. Sie sind Lösungen des Laplace-Problems mit Dirichlet-Randbedingen und werden als solche häufig mit der Finite-Elemente-Methode berechnet. Damit sind jedoch Probleme verknüpft, beispielsweise die Schwierigkeit, stetig differenzierbare Lösungen zu berechnen, oder die Notwendigkeit, ein Gitter im Rechenbereich zu erstellen. Gitterfreie Methoden erzeugen glatte Lösungen im Rechengebiet und benötigen dabei höchstens ein Gitter auf dem Rand dieses Gebietes.

Diese Arbeit versteht sich als breit angelegte Referenz zum Thema harmonische Koordinaten mit einem Schwerpunkt auf der Berechnung derselben durch gitterfreie Verfahren. In einem einheitlichen Rahmen werden

- Anwendungszwecke verallgemeinerter baryzentrischer Koordinaten,
- analytische Eigenschaften harmonischer Funktionen,
- etablierte gitterbasierte (Finite-Differenzen-, Finite-Elemente-Methode) und
- weniger etablierte gitterfreie Verfahren (Methode der Fundamentallösungen, komplexwertige Randelementmethode, Randelementmethode, Szegő-Integralgleichungsmethode)

vorgestellt. Dabei wird Wert darauf gelegt, einen Pfad vom theoretischen Fundament und Existenzsätzen im glatten Fall bis hin zu einer prototypischen Implementierbarkeit zu legen. Eine umfangreiche Literaturliste ermöglicht das Nachlesen der Grundlagen oder die Vertiefung in ein bestimmtes Gebiet.

Zwei der vorgestellten Verfahren, die Methode der Fundamentallösungen und die Szegő-Integralgleichungsmethode, wurden im JAVAVIEW-Framework implementiert, um die Deformation von 2D-Geometrien mittels harmonischer Koordinaten zu ermöglichen.

Die Szegő-Integralgleichungsmethode (SIEM) hat eine funktionentheoretische Basis und war bisher auf glatt berandete Gebiete beschränkt, da dort Kernfunktionen eine wichtige Rolle spielen, die an den Ecken eines Polygons singulär werden. In dieser Arbeit ist die SIEM erstmalig auf ein polygonal berandetes Gebiet übertragen worden, wobei durch die Wahl der Quadraturpunkte in der Nyström-Methode die Behandlung unstetiger rechter Seiten und auftretender Singularitäten ermöglicht wurde.

Inhaltsverzeichnis

1 Baryzentrische Koordinaten in der Geometrieverarbeitung **1**
1.1 Klassische Baryzentrische Koordinaten 1
1.2 Verallgemeinerte Baryzentrische Koordinaten 4
1.3 Harmonische Koordinaten 7

2 Harmonische Funktionen **11**
2.1 Das Dirichlet-Problem 11
2.2 Klassische Lösungen des Dirichlet-Problems 11
2.2.1 Eindeutigkeit 11
2.2.2 Existenz 13
2.2.3 Darstellungen 14
2.3 Schwache Lösungen des Dirichlet-Problems 16

3 Gitterbasierte Methoden zur Lösung des Dirichlet-Problems **21**
3.1 Finite-Differenzen-Methode 22
3.1.1 Theoretische Grundlagen 22
3.1.2 Uniforme Gitter 23
3.1.3 Triangulierungen 25
3.2 Finite-Elemente-Methode 28
3.2.1 Theoretische Grundlagen 28
3.2.2 Diskretisierung 28
3.2.3 Algorithmus 29

4 Gitterfreie Methoden zur Lösung des Dirichlet-Problems **32**
4.1 Methode der Fundamentallösungen 35
4.1.1 Theoretische Grundlagen & Diskretisierung 35
4.1.2 Algorithmus 37
4.2 Komplexe Randelement-Methode 40
4.2.1 Theoretische Grundlagen 40
4.2.2 Diskretisierung 42
4.2.3 Algorithmus 46
4.3 Randelement-Methode 48
4.3.1 Theoretische Grundlagen 48
4.3.2 Diskretisierung 53
4.3.3 Algorithmus 56

4.4 Szegő-Integralgleichungsmethode 58
4.4.1 Theoretische Grundlagen 58
4.4.2 Diskretisierung 65
4.4.3 Algorithmus 67
4.5 Analyse 69
4.5.1 Vergleich der Vorgehensweisen 69
4.5.2 Speicher 71
4.5.3 Laufzeit 71
4.5.4 Bemerkungen 73

5 Zusammenfassung & Ausblick **76**

Literatur **78**

A Harmonische Funktionen und Brown'sche Bewegung **82**
A.1 Physikalische Grundlagen 82
A.2 Mathematische Betrachtung 83
A.3 Algorithmische Umsetzung 83

B Periodische lineare Spline-Interpolation **86**

C Integration singulärer Funktionen **89**
C.1 Einfachschichtpotential 90
C.2 Doppelschichtpotential 94

D Szegő-Kern und Riemann'scher Abbildungssatz **95**

1 Baryzentrische Koordinaten in der Geometrieverarbeitung

1.1 Klassische Baryzentrische Koordinaten

Baryzentrische Koordinaten sind ein von AUGUST FERDINAND MÖBIUS (1790–1868) im Jahre 1827 eingeführtes Hilfsmittel, um einen Punkt, der sich in einem im $\mathbb{R}^d$ eingebetteten Dreieck befindet, nicht über seine kartesischen Koordinaten zu beschreiben, sondern über seine relative Position in Bezug auf die Ecken des Dreiecks.

d: Dimension des umgebenden Raumes

Im Allgemeinen lassen sich für einen $(n-1)$-Simplex $T \subset \mathbb{R}^d$, also die konvexe Hülle von n Punkten $v_1, \ldots, v_n$ im $\mathbb{R}^d$ in allgemeiner Lage, in eindeutiger Weise *Koordinatenfunktionen* $\psi_1, \ldots, \psi_n \colon T \to \mathbb{R}$ finden, so dass für alle $p \in T$

T: Simplex
$v_1, \ldots, v_n$: Ecken von T
p: Punkt im Simplex

$$p = \sum_{i=1}^{n} \psi_i(p) \cdot v_i \tag{1.1}$$

gilt. $\big(\psi_1(p), \ldots, \psi_n(p)\big) \in \mathbb{R}^n$ heißen die *baryzentrischen Koordinaten von p* in Bezug auf T. Die Funktionen ψ_i sind auf T linear, nicht-negativ und eine Teilung der 1. Bekanntestes Beispiel und gleichzeitig Namensgeber dürfte der Schwerpunkt (*Baryzentrum*) eines Dreiecks sein, der die baryzentrischen Koordinaten $(1/3, 1/3, 1/3)$ besitzt.

$\psi_i(p)$: Koordinaten von p

Die Darstellung (1.1) von p ist insbesondere bei der numerischen Behandlung im Computer häufig von Vorteil, da sie *inhärent* die Information „p befindet sich in T“ besitzt und diese somit – im Gegensatz zur Speicherung kartesischer Koordinaten – auch beim Auftreten numerischer Rundungsfehler erhalten bleibt. Andererseits kann man diese relative Darstellung auch nutzen, um an den Ecken v_i gegebene Werte f_i linear zu interpolieren:

f_i: Funktionswert an Ecke v_i

$$F(p) := \sum_{i=1}^{n} \psi_i(p) \cdot f_i \tag{1.2}$$

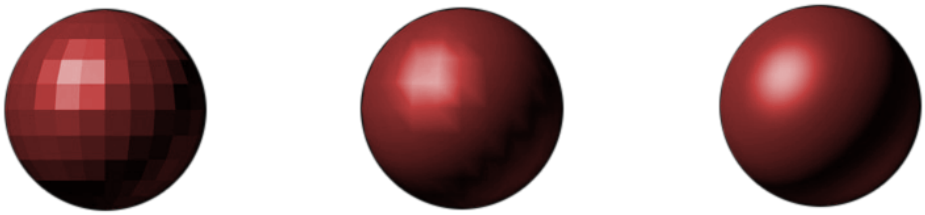
Die f_i können dabei aus einer konvexen Menge X eines beliebigen $\mathbb{R}$-Vektorraums stammen. Damit erhält man eine Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten:

X: Bildraum der zu interpolierenden Daten

- Beleuchtung von 3D-Geometriemodellen: Beim *Shading* von 3D-Geometrien im Computer ergibt sich die Farbe bzw. Helligkeit eines Punktes aus dem Winkel zwischen Flächennormale und Betrachtungsrichtung. Da die Normale auf einer triangulierten Fläche unstetig ist, führt dies auch zu unstetigen Farbwerten (Abbildung 1a).

  Beim *Gouraud-Shading* [Gou71] werden an den Ecken der Triangulierung berechnete Farbwerte mittels baryzentrischer Koordinaten nach innen transportiert; so ist ein stetiger Farbverlauf auf der Fläche gewährleistet (Abb 1b).

  Beim *Phong-Shading* [Pho75] werden stattdessen die an den Ecken gegebenen Normalen des Modells interpoliert, so dass an jedem Punkt eines Dreiecks eine eigene Farbe ausgerechnet werden kann. Dadurch werden auch bei niedriger Anzahl von Dreiecken harte Kanten im gerenderten Bild vermieden (Abbildung 1c).



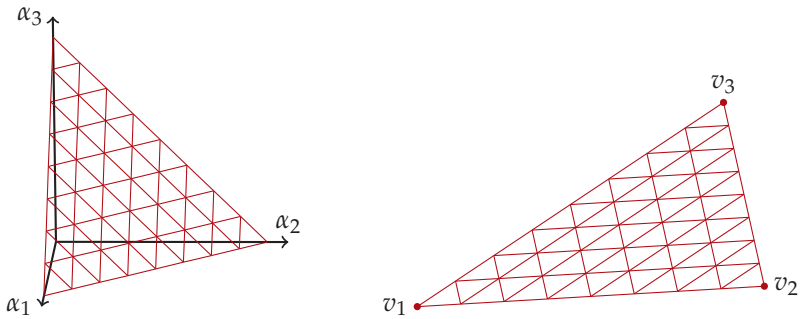
(a): Flat-Shading: In jeder Fläche ist die Farbe konstant.

(b): Gouraud-Shading: Farben werden linear interpoliert.

(c): Phong-Shading: Normalen werden linear interpoliert.

Abbildung 1: Verbessertes Shading durch Interpolation mit baryzentrischen Koordinaten [Sal].

- Gittergenerierung: Es ist einfach möglich, wie folgt ein gleichmäßiges Gitter in T zu erzeugen. Jeder Punkt $(\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \in \mathbb{R}^n$ auf dem $(n-1)$-Einheitssimplex repräsentiert über die Darstellung $p_\alpha := \sum_{i=1}^n \alpha_i \cdot v_i$ einen Gitterpunkt in T. Hat man also ein Gitter (d. h. Punkte und kombinatorischer Zusammenhang) auf dem $(n-1)$-Einheitssimplex, so induziert dies sofort ein Gitter auf einem beliebig eingebetteten geometrischen Simplex gleicher Dimension, siehe Abbildung 2.



(a): Gitter auf dem Einheitssimplex.

(b): Auf einem beliebig eingebetteten geometrischen Simplex induziertes Gitter.

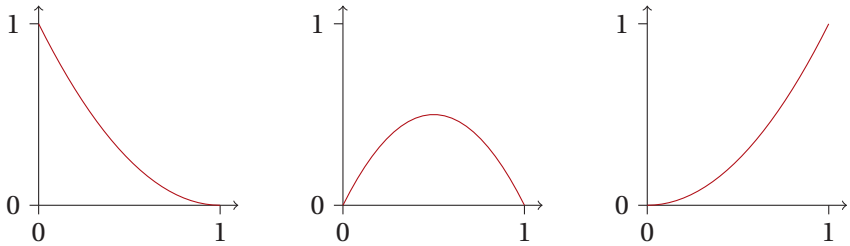
Abbildung 2: Gittergenerierung durch baryzentrische Koordinaten

- Multivariate Polynome: Baryzentrische Koordinaten können genutzt werden, um eine Basis für den Raum der Polynome g-ten Grades zu berechnen. Die *klassischen Bernstein-Polynome* (nach SERGEI NATANOWITSCH BERNSTEIN, 1880–1968) vom Grad g auf einem 1-Simplex (auf einer über $t \in [0,1]$ parametrisierten Strecke) haben die Form

$$B_k^g(t) = \binom{g}{k} \cdot t^k \cdot (1-t)^{(g-k)}$$

für $0 \leq k \leq g$, siehe Abbildung 3. Sie stellen eine Basis der Polynome vom Grad $\leq g$ dar.

Dies kann man auf höherdimensionale Simplizes verallgemeinern [Far02]. Dazu verwendet man die Multiindex-Schreibweise $\vec{k} = (k_1, \ldots, k_n)$, identifiziert einen Punkt p



(a): $B_0^2(t) = (1-t)^2$ (b): $B_1^2(t) = 2 \cdot t \cdot (1-t)$ (c): $B_2^2(t) = t^2$

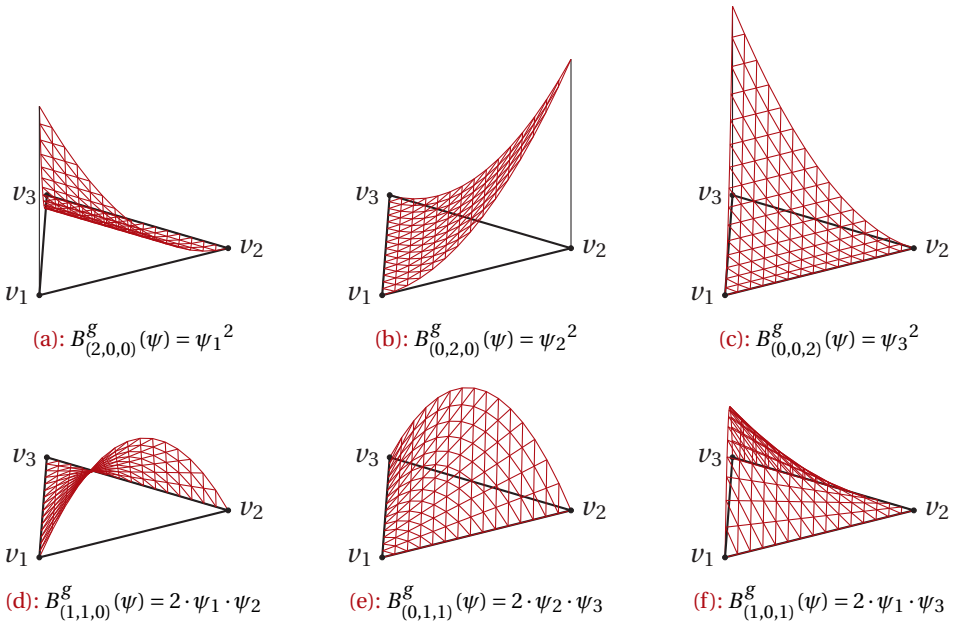
Abbildung 3: Bernstein-Polynome vom Grad 2 auf dem Intervall $[0,1]$.

mit seinen baryzentrischen Koordinaten $\psi = \big(\psi_1(p), \ldots, \psi_n(p)\big)$ und definiert analog zu oben die *multivariaten Bernstein-Polynome* vom Grad g als

$$B_{\vec{k}}^g(\psi) = \binom{g}{\vec{k}} \cdot \prod_{i=1}^{n} \psi_i^{k_i}$$

für $\sum_{i=1}^n k_i = g$, wobei unter $\binom{g}{\vec{k}}$ der Multinomialkoeffizient $\frac{(g)!}{\prod_{i=1}^n (k_i)!}$ verstanden sein soll. Sie stellen eine Basis der Polynome vom Grad $\leq g$ auf T dar. Die so erhaltenen Basisfunktionen kann man z. B. verwenden, um *Bézier-Flächen* zu berechnen.

Für $g = 2$ und T ein Dreieck erhält man die Bernstein-Polynome wie in Abbildung 4.



(a): $B_{(2,0,0)}^g(\psi) = {\psi_1}^2$ (b): $B_{(0,2,0)}^g(\psi) = {\psi_2}^2$ (c): $B_{(0,0,2)}^g(\psi) = {\psi_3}^2$

(d): $B_{(1,1,0)}^g(\psi) = 2 \cdot \psi_1 \cdot \psi_2$ (e): $B_{(0,1,1)}^g(\psi) = 2 \cdot \psi_2 \cdot \psi_3$ (f): $B_{(1,0,1)}^g(\psi) = 2 \cdot \psi_1 \cdot \psi_3$

Abbildung 4: Bernstein-Polynome vom Grad 2 auf einem Dreieck.

1.2 Verallgemeinerte Baryzentrische Koordinaten

T: Polytop

n: Anzahl Ecken von T

Wenn es sich bei T nicht mehr um einen Simplex handelt, sondern um ein beliebiges Polytop[1] mit n Ecken im $\mathbb{R}^d$, ist die Lösung für das Problem

$$p = \sum_{i=1}^{n} \psi_i(p) \cdot v_i \tag{1.3}$$

nicht mehr eindeutig. Eine Möglichkeit, einen einfachen Satz an solchen *verallgemeinerten baryzentrischen Koordinaten* für ein $p \in T$ zu erhalten, besteht darin, T zu *triangulieren*,[2] d. h. in Simplizes $\{\tau_1, \ldots, \tau_N\}$ zu partitionieren, und für den p enthaltenden Simplex τ_i die klassischen baryzentrischen Koordinaten zu berechnen.[3] Zum Einen ist eine solche Triangulierung aber nicht eindeutig, zum anderen sind die entsprechenden Koordinatenfunktionen auf T i. A. nicht mehr stetig. Andere Methoden, solche Koordinaten zu definieren sowie daraus resultierende Eigenschaften werden im Abschnitt 1.3 vorgestellt.

Die Anwendungen verallgemeinerter baryzentrischer Koordinaten basieren wiederum auf Interpolation wie in (1.2) und enthalten natürlich die Anwendungen klassischer Koordinaten als Teilmenge, bieten aber noch mehr:

- Deformation: Eine Anwendung, die in der Geometrieverarbeitung eine wichtige Rolle spielt, ist die *Deformation* von Geometrien, vgl. [DMJ+07, WBCG09, LLCO08]. Dazu wird um eine (große) Punktmenge $S \subset \mathbb{R}^d$ ein (einfacher) polytoper „Käfig“ T gelegt und für jedes $p \in S$ die baryzentrischen Koordinaten $\psi_i(p)$ mit Bezug auf die Ecken von T berechnet. Wird nun ∂T durch eine Abbildung $v_i \mapsto v_i'$ deformiert, induziert dies über
$$p \mapsto \sum_{i=1}^{n} \psi_i(p) \cdot v_i'$$
auch eine Deformation des Inneren von T, also insbesondere von S.

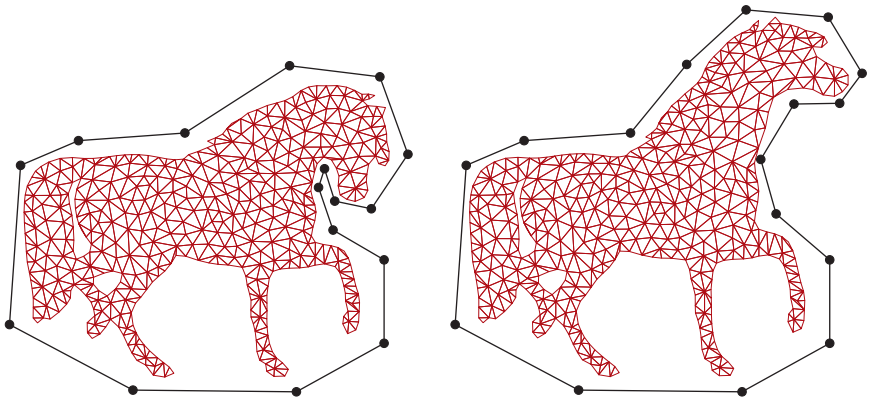
  Damit kann beispielsweise der Benutzer einer 3D-Animationssoftware komplizierte Geometrien mit vielen Punkten verformen, muss die Deformation aber nur an den wenigen Punkten des Käfigs vorgeben, vgl. Abbildung 5.

  Verglichen mit Deformationstechniken, die mit einer konkreten *Fläche* arbeiten, induziert die Methode der baryzentrischen Koordinaten eine Deformation des gesamten eingeschlossenen *Volumens*, so dass z. B. beim Modellieren in einem Programm eine niedrig aufgelöste Version des Modells verwendet werden kann, beim Rendering die gleiche Deformation aber auch auf eine entsprechende hoch aufgelöste Version (eine sog. *Subdivisionsfläche*) angewendet werden kann.

[1] Ein k-Polytop ist in dieser Arbeit eine *offene*, einfach zusammenhängende, *nicht notwendigerweise konvexe* Teilmenge des $\mathbb{R}^d$.

[2] In dieser Arbeit wird versucht, so selten wie möglich eine Beschränkung auf eine bestimmte Dimension vorzunehmen. Mit Triangulierungen sind beispielsweise immer verallgemeinerte Triangulierungen gemeint, also auch die Partitionierung eines 3-Polytops in Tetraeder.

[3] In OpenGL wird das Shading von `GL_QUAD`- und `GL_POLYGON`-Primitiven genau so umgesetzt.



(a): Original-Geometrie mit Käfig (b): Deformierte Geometrie mit Käfig

Abbildung 5: Eine punktbasierte Geometrie wird verändert, indem der grob aufgelöste Käfig verändert und über baryzentrische Koordinaten eine Deformation des eingeschlossenen Gebietes induziert wird.

- Basisfunktionen für Finite-Elemente-Methoden: In der Finite-Elemente-Methode (siehe auch Abschnitt 3.2) zerlegt man das Rechengebiet in eine Menge von Gitterelementen – in der Regel simplizialer Natur – und berechnet in einem festgelegten Funktionenraum auf jedem dieser Elemente die Koeffizienten der entsprechenden Basisfunktionen, die dann eine Lösung auf dem gesamten Rechengebiet bestimmen.

  Bei topologischen Änderungen des Rechengebiets, beispielsweise der Simulation von Rissen oder adaptiver Verfeinerung, muss jedoch ein *Remeshing* durchgeführt werden, was vor allem im Fall $d = 3$ zu einer komplexen Aufgabe werden kann, wenn dabei bestimmte Formkriterien an die einzelnen Elemente erfüllt werden müssen. In [WBG07] wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem allgemeine konvexe Polyeder als Gitterelemente eingesetzt werden können, auf denen baryzentrische Koordinatenfunktionen als Basisfunktionen verwendet werden. In [MKB+08] wird das Verfahren dahingehend erweitert, harmonische Koordinatenfunktionen zu verwenden, so dass auch nicht-konvexe Elemente verwendet werden können.

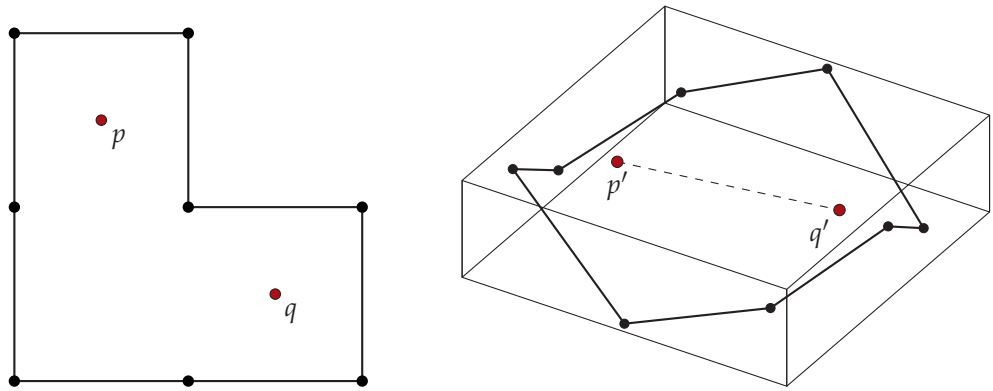
- Bestimmung eines intrinsischen Abstandsmaßes: Die Berechnung des Abstandes zweier Punkte p, q in einem Polytop T, definiert über die Länge ihrer kürzesten Verbindung, ist schon für (nicht-konvexe) Polyeder NP-schwer. Man kann aber über verallgemeinerte baryzentrische Koordinaten ein alternatives intrinsisches Abstandsmaß definieren, vgl. [RLF09].

  Dabei wird $\partial T \subset \mathbb{R}^d$ über eine Abbildung $v_i \mapsto v_i'$ auf den Ecken in einen höherdimensionalen Raum $\mathbb{R}^{d'}$ eingebettet. Dies induziert für Punkte im Innern von T über die baryzentrischen Koordinaten ebenfalls eine Abbildung, analog zur oben beschriebenen

Deformation. Jetzt definiert für zwei Punkte $p, q \in T$ der euklidische Abstand

$$\left\| \sum_{i=1}^{n} \psi_i(p) \cdot v_i' - \sum_{i=1}^{n} \psi_i(q) \cdot v_i' \right\|$$

ein Abstandsmaß auf T, das tatsächlich den Forderungen einer Metrik entspricht.



(a): Lage der Punkte im Ursprungspolygon

(b): Lage der Punkte im eingebetteten Polygon

Abbildung 6: Berechnung eines intrinsischen Abstands mit Hilfe baryzentrischer Koordinaten (Grafik nach [RLF09])

- Gittergenerierung: Im Abschnitt 1.1 wurde zu einem Punkt $(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ auf dem $(n-1)$-Einheitssimplex (d. h. $\sum_i \alpha_i = 1$, $\alpha_i \geq 0$) ein entsprechender Punkt auf einem im $\mathbb{R}^d$ eingebetteten $(n-1)$-Simplex berechnet, um darüber ein Gitter zu erzeugen.

  Analog kann auch in einem *beliebigen* Polytop mit n Ecken aus einem Tupel $(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ mit $\sum_i \alpha_i = 1$ und $\alpha_i \geq 0$ ein Punkt berechnet werden, einen Satz verallgemeinerter baryzentrischer Koordinatenfunktionen ψ_i vorausgesetzt. Dafür muss derjenige Punkt p_α mit den baryzentrischen Koordinaten α gefunden werden, d. h. $\psi^{-1}(\alpha)$ berechnet werden. Ein solches Verfahren könnte beispielsweise verwendet werden, um ein Gitter mit bestimmten Eigenschaften für ein numerisches Verfahren zu erzeugen.

Wie erwähnt, sind die Koordinatenfunktionen ψ_i nicht mehr eindeutig bestimmt, wenn T ein beliebiges Polytop ist. Dies führt zu der Frage, welche Kriterien an „gute“ Koordinaten gestellt werden müssen, um den Anforderungen der (auf Interpolation basierenden) Anwendungen gerecht zu werden.

Sei im Folgenden T ein k-Polytop, $k \geq 2$, dessen Rand ∂T nur aus $(k-1)$-Simplizes besteht.[4] Seien weiter $f_1, \ldots, f_n$ an den Ecken $v_1, \ldots, v_n$ von T gegebene Daten und die Funktion F über Interpolation dieser Daten wie in (1.2) definiert.

[4] Dies sind z. B. ein Polygon, Tetraeder, Ikosaeder, aber z. B. kein Würfel.

Die Erwartungen an eine „vernünftige“ Interpolationsmethode sind mindestens:

A1. Um mit dem Wertebereich von F innerhalb der am Rand vorgegebenen Interpolationswerte zu bleiben, sollte das Maximumprinzip gelten, d. h.

$$\min |f_i| \leq \inf_{p \in T} |F(p)| \leq \sup_{p \in T} |F(p)| \leq \max |f_i|$$

A2. F sollte tatsächlich die Randwerte interpolieren, d. h.

$$\lim_{p \to v_i} F(p) = f_i$$

A3. F sollte mindestens stetig sein.

A4. Lineare Funktionen sollten auch linear interpoliert werden, um überhaupt (1.3) erfüllen zu können.

Daraus ergeben sich direkt notwendige Bedingungen an die Koordinatenfunktionen ψ_i:

1. $\forall\, p \in T : 0 \leq \psi_i(p) \leq 1$
2. $\psi_i(v_j) = \delta_{ij}$
3. ψ_i muss mindestens stetig sein.
4. $\forall\, p \in T : \sum_{i=1}^{n} \psi_i(p) \cdot G(v_i) = G(p)$ für jede affin lineare Funktion G

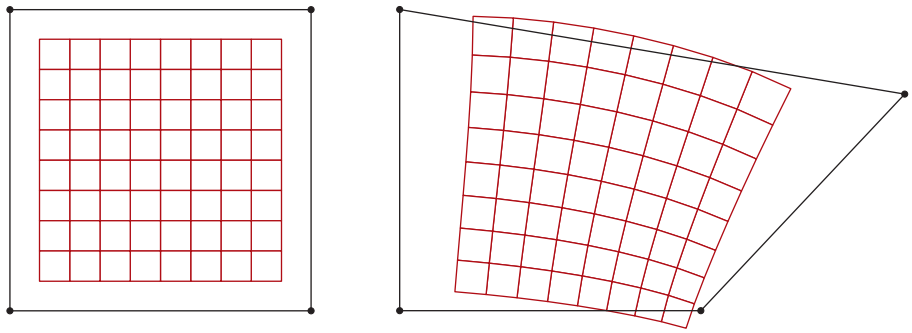
In [FHK06] werden aus den genannten Anforderungen noch weitere Bedingungen an „vernünftige“ baryzentrische Koordinatenfunktionen abgeleitet. Beispielsweise lassen sich untere und obere Schranken auf T sowie die Linearität solcher Funktionen auf jeder Seite von ∂T zeigen.

1.3 Harmonische Koordinaten

Im Laufe der Zeit wurden verschiedene Methoden entwickelt, die Koordinatenfunktionen zu wählen. Unter den bekanntesten sind:

- Wachspress-Koordinaten [Wac75, War96]
- Mean-Value-Koordinaten [Flo03, JSW05]
- Harmonische Koordinaten [DM06, DMJ+07]
- Maximum-Entropy-Koordinaten [HS08]
- Green-Koordinaten [LLCO08]
- Cauchy-Koordinaten [WBCG09]

Die beiden letztgenannten sind keine baryzentrischen Koordinaten im ursprünglichen Sinne: Green-Koordinaten verwenden neben Gewichten für die Ecken auch Gewichte für die Flächennormalen von T. Cauchy-Koordinaten hingegen verwenden komplexwertige statt reeller Gewichte, sind jedoch nur für $\mathbb{C}$ definiert und sind dort äquivalent zu den Green-Koordinaten im $\mathbb{R}^2$, allerdings leichter zu berechnen. Beide Verfahren sind *nicht* affin-invariant, aber induzieren *konforme* (winkelerhaltende) bzw. fast-konforme Abbildungen (siehe Abbildung 7) und erzeugen damit in der Geometriedeformation teilweise intuitivere Ergebnisse als solche, die über rein reellwertige Eckengewichtung machbar sind.



(a): Original-Geometrie mit Käfig (b): Deformierte Geometrie mit Käfig

Abbildung 7: Die Verwendung von Cauchy- bzw. Green-Koordinaten induziert winkeltreue Deformationen des eingeschlossenen Gebiets.

[HS08] gibt einen kurzen Überblick über das Feld der verallgemeinerten baryzentrischen Koordinaten. Danach sind Wachspress-Koordinaten zwar effizient berechenbar, aber nur auf konvexen Gebieten definiert. Mean-Value-Koordinaten können in einer modifizierten Version zwar auch auf nicht-konvexen Gebieten definiert werden, verlieren dann aber ihre Positivität. Eine weitere Modifikation [LKCOL07] verhindert das, führt allerdings auch zum Verlust der Differenzierbarkeit an gewissen Stellen. Maximum-Entropy-Koordinaten sind nichtnegativ und können auch auf nicht-konvexen Gebieten berechnet werden, globale Differenzierbarkeit konnte bisher allerdings nicht bewiesen werden.

Mit harmonischen Koordinaten schließlich soll sich diese Arbeit befassen. Sie wurden 2006 zunächst in einem *Technical Memo* von TONY DEROSE und MARK MEYER vorgestellt [DM06] und ein Jahr später in einer ausführlicheren Version noch einmal veröffentlicht [DMJ+07].

δ_{ij}: Kronecker-Delta
Δ: Laplace-Operator

Die harmonischen Koordinatenfunktionen $\{\psi_1, \ldots, \psi_n\}$ sind derart definiert, dass sie auf dem Rand ∂T mit den dort definierten *Hütchenfunktionen* zusammenfallen,[5] d. h. $\psi_i(v_j) = \delta_{ij}$, und sich ins Innere von T *harmonisch* fortsetzen, also $\Delta\psi_i = 0$ gilt, siehe Abbildung 8.

[5] Falls T nicht-simpliziale Seiten hat, ist diese Randbedingung i. A. nicht umsetzbar. In diesem Fall fordert man, dass ψ_i auf jeder Seite von ∂T mit den dort definierten lokalen harmonischen Koordinaten einer Dimension niedriger übereinstimmt. Da die harmonischen Koordinaten auf Simplizes linear sind, fällt diese rekursive Definition mit der oben genannten Definition zusammen, wenn T simplizial berandet ist.

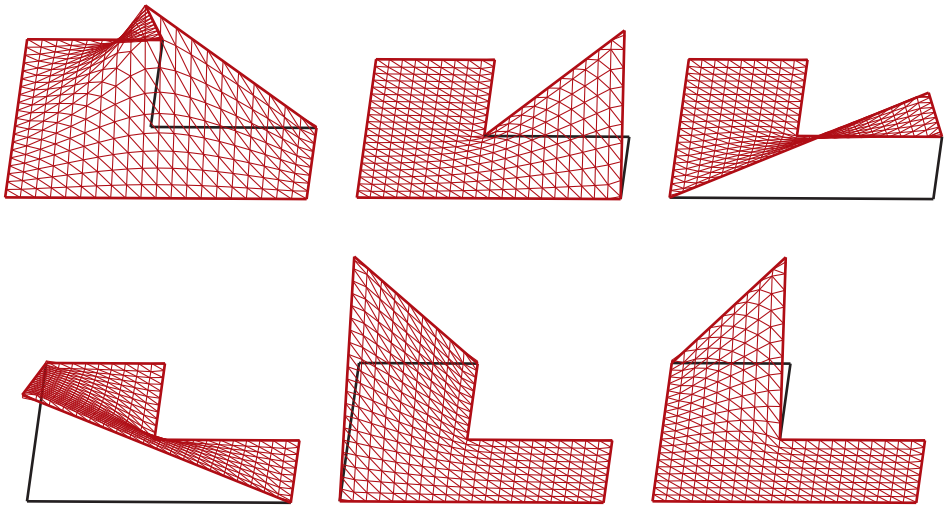


Abbildung 8: Die zu den Ecken $v_1, \ldots, v_n$ des Polygons gehörenden harmonischen Koordinatenfunktionen $\psi_1, \ldots, \psi_n$.

Satz 1.1 (Eigenschaften harmonischer Koordinaten) Harmonische Koordinaten sind verallgemeinerte baryzentrische Koordinaten. Für alle Koordinatenfunktionen ψ_i gilt:

(i) $\forall\, p \in T : 0 \leq \psi_i(p) \leq 1$

(ii) $\psi_i(v_j) = \delta_{ij}$

(iii) $\psi_i \in C^\infty(\mathring{T})$

(iv) $\forall\, p \in T : \sum_{i=1}^n \psi_i(p) \cdot G(v_i) = G(p)$ für jede affin lineare Funktion G

Bis auf (ii), das direkt aus der Definition folgt, lassen sich all diese Eigenschaften auf Eigenschaften harmonischer Funktionen zurückführen, der Beweis sei daher für den Moment nach hinten verschoben.

Harmonische Koordinaten erfüllen alle Anforderungen, die oben an „gute“ baryzentrische Koordinaten gestellt wurden. Ihre Berechnung ist allerdings deutlich rechenintensiver als die der anderen genannten Koordinaten. In [FHK06] beispielsweise wurden die harmonischen Koordinaten unabhängig von [DM06] entdeckt, aber nicht weiter untersucht:

> “…it is easy to show that these *harmonic coordinates* $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ constitute a set of smooth barycentric coordinates with similarity invariance. Moreover, they clearly extend to *any* polygon. However, since it appears that no explicit formula for these coordinates is known, they are less attractive for computational purposes.”

In [DMJ+07] wird auf diese Aussage Bezug genommen und erklärt, warum man die harmonischen Koordinaten trotzdem für einen verfolgungswürdigen Ansatz hält:

> "Independent of our work, Floater and co-workers recently observed that solutions to Laplace's equation in two dimensions could be used as generalized barycentric coordinates. They did not pursue the observation because their objective was to find a closed-form formulation. However, for character articulation, non-negativity and interior locality are far more important than closed-form expressions. Harmonic coordinates are the only coordinates we are aware of that possess these crucial properties."

φ_i: Randfunktion, zu der Dirichlet-Problem gelöst werden soll

Um eine harmonische Koordinatenfunktion ψ_i zu berechnen, muss man einen Spezialfall des sogenannten *Dirichlet-Problems* lösen: Finde zu einer konkreten, auf dem Rand ∂T vorgegebenen Funktion φ_i in der Form einer Hütchenfunktion eine harmonische Fortsetzung in das Innere von T. Umgekehrt gilt, dass $\{\psi_1, \ldots, \psi_n\}$ eine Basis des Vektorraums harmonischer Funktionen mit stückweise linearen Randwerten ist. Somit kann man, sind alle harmonischen Koordinatenfunktionen für T berechnet, durch einfache Linearkombination das Dirichlet-Problem zu *jeder* vorgegebenen, stückweise linearen Funktion auf ∂T lösen.

In den folgenden Abschnitten sollen verschiedene Methoden vorgestellt und untersucht werden, um das Dirichlet-Problem zu lösen. Diese Analyse soll von dem Anwendungszweck der Berechnung harmonischer Koordinaten geprägt sein und insbesondere die weniger etablierten, gitterfreien Methoden beleuchten.

2 Harmonische Funktionen

2.1 Das Dirichlet-Problem

Im Folgenden soll die theoretische Grundlage für die Berechnung harmonischer Koordinaten gelegt werden. Sei dafür im Folgenden immer $d \in \mathbb{N}$ die Dimension des umgebenden Raums, und $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein offenes, beschränktes, einfach zusammenhängendes Gebiet mit stückweise glattem Rand sowie $\varphi \in C(\partial\Omega)$.

Ω: Gebiet für Dirichlet-Problem
$C(\partial\Omega)$: stetige Funktionen $\partial\Omega \to \mathbb{R}$
φ: Randfunktion für Dirichlet-Problem

Das *Dirichlet-Problem* (nach PETER GUSTAV LEJEUNE DIRICHLET, 1805–1859)[6] besteht dann darin, eine Funktion $U\colon \overline{\Omega} \to \mathbb{R}$ zu finden, so dass:

$$\begin{aligned} \Delta U_{|\Omega} &= 0 \\ U_{|\partial\Omega} &= \varphi \end{aligned} \tag{2.1}$$

U: Lösung des Problems im Innern

Eine Funktion $U \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$, die (2.1) erfüllt, heißt *klassische* bzw. *starke Lösung* des Dirichlet-Problems.

Die Laplace-Gleichung $\Delta U = 0$ ist der homogene Spezialfall der allgemeineren Poisson-Gleichung $\Delta U = F$, der bei physikalischen Phänomenen in der Natur allerdings häufig auftritt. Im Anhang A wird der Zusammenhang zwischen harmonischen Funktionen und der Diffusion von Teilchen erläutert und eine Methode vorgestellt, wie man aus dem Diffusionsprozess eine Lösung des Dirichlet-Problems erhalten kann.

2.2 Klassische Lösungen des Dirichlet-Problems

Um die Eigenschaften von Lösungen des Dirichlet-Problems zu klären, sollen zunächst einige grundlegende Eigenschaften harmonischer Funktionen genannt werden. Diese werden hier nur wiedergegeben, da es sich um wohlbekannte Resultate handelt, die in jedem einführenden Buch über partielle Differentialgleichungen oder Potentialtheorie vorkommen sollten.

2.2.1 Eindeutigkeit

Sei dafür $B_\varepsilon(x) := \{y \in \mathbb{R}^d \mid \|y - x\| < \varepsilon\}$ die Kugel um x mit Radius ε. Sei $B^d := B_1(0)$ die d-dimensionale Einheitskugel und ω_d ihre Oberfläche.[7]

$B_\varepsilon(x)$: Epsilon-Umgebung um x
B^d: offene d-dimensionale Einheitskugel

[6] In ausführlicher Form gesprochen ist dies das „Laplace-Problem mit Dirichlet-Randbedingungen“: $\Delta U = 0$ heißt *Laplace-Gleichung* (nach PIERRE-SIMON LAPLACE, 1749–1827), das *Laplace-Problem* ist die Suche nach einer entsprechenden Funktion. Solche Randbedingungen, bei denen man einen Funktions*wert* vorschreibt, heißen *Dirichlet-Randbedingungen*. Eine andere Möglichkeit sind *Neumann-Randbedingungen*, bei denen auf $\partial\Omega$ die Ableitung von U in Normalenrichtung vorgegeben wird; in dieser Arbeit werden allerdings nur Dirichlet-Randwerte behandelt.

[7] Diese Schreibweise ist an [Hac86] angelehnt. In der Literatur wird jedoch auch häufig mit ω_d das *Volumen* der d-dimensionalen Kugel bezeichnet, vgl. [Jos98], was zu anderen Formeln führt. Insbesondere ist $\operatorname{area}(\partial B^d) = d \cdot \operatorname{vol}(B^d)$.

Lemma 2.1 (Mittelwerteigenschaft [Hac86, Lemma 2.3.5 & Satz 2.3.8]) *Eine Funktion U ist genau dann harmonisch, wenn sie für alle x und für alle $\varepsilon > 0$ mit $B_\varepsilon(x) \subset \Omega$ die Mittelwerteigenschaft besitzt:*

$$U(x) = \frac{1}{\omega_d \cdot \varepsilon^{d-1}} \cdot \int_{\partial B_\varepsilon(x)} U(y)\, d\sigma_y$$

Eine äquivalente Formulierung, die sich nicht auf die Oberfläche, sondern auf das Volumen des umgebenden Balls bezieht, ist:

$$U(x) = \frac{d}{\omega_d \cdot \varepsilon^{d}} \cdot \int_{B_\varepsilon(x)} U(y)\, dy$$

Bemerkung 2.2 (Notation für Integrale) In dieser Arbeit kommen im Wesentlichen *Randintegrale* in verschiedenen Dimensionen vor, d. h. Integrale über Polygonränder oder Polyederoberflächen. Diese werden mit

$\int_{\partial\Omega} f(x)\,\mathrm{d}\sigma_x$: Randintegral

$$\int_{\partial\Omega} f(x)\,\mathrm{d}\sigma_x$$

bezeichnet, so dass z. B. für ein Polygon Ω der Term $\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{d}\sigma_x$ die Länge des Polygons als Streckenzug angibt.

$\int_\Omega f(x)\,\mathrm{d}x$: Lebesgue-Integral

Im Gegensatz dazu bezeichnet

$$\int_\Omega f(x)\,\mathrm{d}x$$

$\int_\Omega f(x)\,\mathrm{d}\mu(x)$: Integral bzgl. Maß μ

das klassische *Lebesgue-Integral* und

$$\int_\Omega f(x)\,\mathrm{d}\mu(x)$$

das *Integral bezüglich des Maßes μ*.

$\oint_{\partial\Omega} f(x)\,\mathrm{d}x$: komplexes Kurvenintegral

Für eine einfach zusammenhängende komplexe Menge $\Omega \subset \mathbb{C}$, deren Rand durch eine Kurve $\gamma\colon [0,1] \to \mathbb{C}$ parametrisiert ist, sei

$$\oint_{\partial\Omega} f(x)\,\mathrm{d}x = \oint_\gamma f(x)\,\mathrm{d}x := \int_0^1 f(\gamma(t)) \cdot \gamma'(t)\,\mathrm{d}t \left(\neq \int_{\partial\Omega} f(x)\,\mathrm{d}\sigma_x\,!\right)$$

das *komplexe Kurvenintegral*.

Lemma 2.3 (Maximumprinzip & Eindeutigkeit [Hac86, Satz 2.3.7 & 2.3.8]) *Eine nichtkonstante harmonische Funktion U besitzt kein Maximum und kein Minimum auf Ω.* Jede *auf $\partial\Omega$ stetig fortsetzbare harmonische Funktion U nimmt ihr Maximum und Minimum auf $\partial\Omega$ an und ist durch die Werte auf $\partial\Omega$ eindeutig bestimmt.*

Korollar 2.4 (Dirichlet-Problem: Eindeutigkeit der Lösung) *Die Lösung des Dirichlet-Problems* (2.1) *ist eindeutig.*

An dieser Stelle sind bereits alle Voraussetzungen geschaffen, um Satz 1.1 zu beweisen.

Beweis: (Satz 1.1, Eigenschaften harmonischer Koordinaten)

P.1 ψ_i ist die Lösung des Dirichlet-Problems zur Hütchenfunktion φ_i auf dem Rand. Es gilt das Maximumprinzip, d. h. auf Ω ist $0 \leq \psi_i \leq 1$.

P.2 ψ_i nimmt die Werte von φ_i auf $\partial\Omega$ an, d. h. insbesondere ist $\psi_i(v_j) = \delta_{ij}$.

P.3 Auf Ω ist $\Delta\psi_i = 0$, also ist ψ_i dort unendlich oft differenzierbar.

P.4 Sei $G\colon \overline{\Omega} \to X$ eine affin lineare Funktion, dann lässt sich $g := G_{|\partial\Omega}$ exakt als Linearkombination der Hütchenbasis darstellen: $g(x) = \sum_{i=1}^{n} G(v_i) \cdot \varphi_i(x)$. Weiterhin ist G harmonisch, d. h. G ist die Lösung des Dirichlet-Problems zum Randwert g.
Da $\sum_{i=1}^{n} G(v_i) \cdot \psi_i(x)$ *ebenfalls* die Lösung des Dirichlet-Problems zum Randwert g ist und diese Lösung nach Korollar 2.4 eindeutig ist, gilt also $\sum_{i=1}^{n} G(v_i) \cdot \psi_i(x) = G(x)$ für alle $x \in \Omega$. □

2.2.2 Existenz

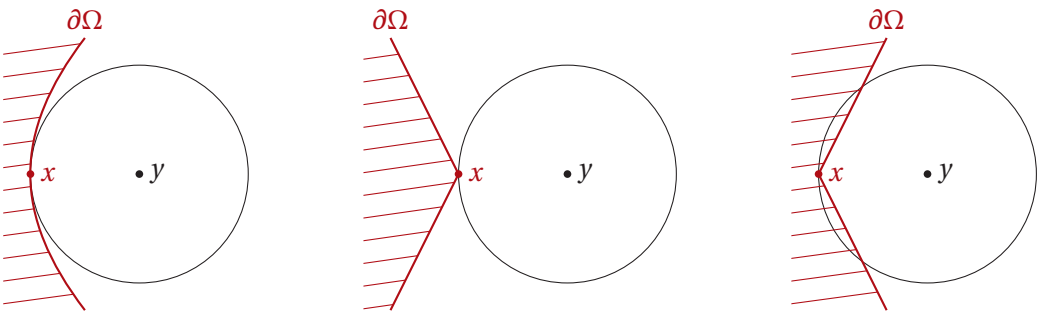
Die Frage nach der Eindeutigkeit einer existierenden Lösung für das Dirichlet-Problem kann also mit relativ einfachen Mitteln mit ja beantwortet werden. Die Frage nach der Existenz ist allerdings eine deutlich schwierigere. Es sei hier nur ein Existenzsatz zitiert:

Satz 2.5 (Dirichlet-Problem: Existenz der Lösung [GT01, Theorem 2.14]) Das Dirichlet-Problem in einem Gebiet Ω ist für beliebige stetige Randwerte φ genau dann lösbar, wenn alle Punkte von $\partial\Omega$ *regulär* sind.

Hinreichende Bedingungen für Regularität des Randes sind nach [GT01]:

- $d = 2$: Ω ist ein einfach zusammenhängendes Gebiet, dessen Rand eine stückweise C^2-glatte Kurve (aus endlich vielen Stücken) ist. Insbesondere gilt dies
  - für alle Gebiete mit global C^2-glattem Rand und
  - für polygonal berandete Gebiete.
- $d \geq 3$: Ω erfüllt die *äußere Kugelbedingung*, d. h. für alle $x \in \partial\Omega$ gibt es ein $y \in \mathbb{R}^d \setminus \overline{\Omega}$ und $\varepsilon > 0$ mit
$$\overline{B_\varepsilon(y)} \cap \overline{\Omega} = x$$
  Alle einfach zusammenhängenden Gebiete im $\mathbb{R}^d$ mit C^2-glattem Rand erfüllen diese Bedingung (Abbildung 9a), konvexe polytope Gebiete ebenfalls (Abbildung 9b). Ist Ω jedoch von polytoper Gestalt, aber nicht konvex, gibt es nach innen zeigende „Spitzen“, die die äußere Kugelbedingung verletzen (Abbildung 9c).[8] Die Existenz von Lösungen partieller Differentialgleichungen für polyedrische Gebiete ist ein aktuelles Forschungsgebiet, vgl. [RM10].

[8] Es gibt für $d = 3$ ein Beispiel von HENRI LÉON LEBESGUE (1875–1941) von einem Gebiet mit einer nach innen zeigenden Spitze, bei dem es zu einer konkreten stetigen Randfunktion tatsächlich keine Lösung des Dirichlet-Problems gibt.



(a): glatter Rand (b): Spitze nach außen (Ω konvex) (c): Spitze nach innen (Ω nicht konvex)

Abbildung 9: Die äußere Kugelbedingung für verschiedene Typen von Flächen.

Es wird hier zum ersten Mal deutlich, dass der Fall $d = 2$ sich in seiner Komplexität deutlich vom Fall $d \geq 3$ unterscheidet, schon allein in der Frage der Existenz einer Lösung. Für den Anwendungszweck der harmonischen Koordinaten ist dies ein unbefriedigendes Resultat, denn gerade für Geometriedeformationen wird man häufig nicht-konvexe Gebiete polytoper Gestalt als „Käfig“ für eine komplizierte 3D-Geometrie verwenden.

Es sind unter anderem diese Schwierigkeiten, die die Theorie der *schwachen Lösungen* motiviert haben, siehe Abschnitt 2.3. Im nächsten Abschnitt soll jedoch zunächst unter der Annahme der Existenz einer starken Lösung U des Dirichlet-Problems eine Darstellung in Abhängigkeit der Randdaten vorgestellt werden.

2.2.3 Darstellungen

ν: Außennormale von Ω

Ab hier sei Ω zusätzlich zu den bisherigen Bedingungen C^2-glatt berandet mit Außennormale ν. Insbesondere gilt dann für hinreichend glatte Funktionen U und V die *erste Green'sche Formel*,

$$\int_\Omega U \cdot \Delta V \,\mathrm{d}x = -\int_\Omega \nabla U \cdot \nabla V \,\mathrm{d}x + \int_{\partial\Omega} U \cdot \frac{\partial V}{\partial \nu} \,\mathrm{d}\sigma_x,$$

und es existiert nach Satz 2.5 eine eindeutige Lösung des Dirichlet-Problems für alle stetigen Randfunktionen φ. Es soll nun eine analytische Darstellung der Lösung gefunden und diverse dafür notwendige Begriffe vorgestellt werden.

s_a: Singularitätenfunktion $\mathbb{R}^d \setminus \{a\} \to \mathbb{R}$

Definition 2.6 (Singularitätenfunktion) Sei $a \in \Omega$. Die Funktion

$$s_a(x) := \begin{cases} -\frac{1}{\omega_d} \cdot \ln(\|x-a\|) & \text{falls } d = 2 \\ \frac{1}{(d-2)\cdot\omega_d} \cdot \|x-a\|^{2-d} & \text{falls } d > 2 \end{cases} \tag{2.2}$$

heißt *Singularitätenfunktion*.

Definition 2.7 (Fundamentallösung) Sei $a \in \Omega$ und $\Phi \in C^2(\overline{\Omega})$ harmonisch, dann heißt die Funktion

$$\gamma_a(x) := s_a(x) + \Phi(x) \tag{2.3}$$

eine *Fundamentallösung* der Laplace-Gleichung.[9]

γ_a: Fundamentallösung der Laplace-Gleichung

Durch Transformation des Laplace-Operators in Polarkoordinaten lässt sich zeigen, dass s_a harmonisch auf $\Omega \setminus \{a\}$ ist [Hac86, Lemma 2.2.1]. Damit ist eine Fundamentallösung ebenfalls harmonisch auf $\Omega \setminus \{a\}$ und hat eine Polstelle bei a.

Satz 2.8 (Green'scher Darstellungssatz [Hac86, Korollar 2.2.3]) Sei $U \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ harmonisch auf Ω und $a \in \Omega$. Dann gilt für jede Fundamentallösung γ_a:

$$U(a) = \int_{\partial\Omega} \gamma_a \cdot \frac{\partial U}{\partial \nu} - U \cdot \frac{\partial \gamma_a}{\partial \nu} \, \mathrm{d}\sigma_x \tag{2.4}$$

Insbesondere gilt dies für $\gamma_a = s_a$.

Satz 2.8 macht Hoffnung, dass man mit Kenntnis von s_a das Dirichlet-Problem durch ein einfach auszurechnendes Randintegral über $\partial\Omega$ lösen kann. Jedoch treten in der Darstellung (2.4) *sowohl* die Dirichlet-Randwerte U *als auch* die Ableitung in Normalenrichtung $\frac{\partial U}{\partial \nu}$ auf.[10] Aus Korollar 2.4 folgt jedoch, dass allein die Dirichlet-Randbedingungen die Funktion U auf ganz Ω schon eindeutig bestimmen; man kann daher nicht erwarten, zusätzlich noch beliebige Normalenableitungen vorgeben zu können und durch Einsetzen in (2.4) tatsächlich eine harmonische Funktion mit diesen Randdaten zu erhalten.

Angenommen, es wäre eine Fundamentallösung $\widetilde{\gamma_a}$ mit $\widetilde{\gamma_a}_{|\partial\Omega} \equiv 0$ bekannt, eine *Green'sche Funktion erster Art.*[11] Dann würde sich (2.4) vereinfachen zu

$$U(a) = -\int_{\partial\Omega} U \cdot \frac{\partial \widetilde{\gamma_a}}{\partial \nu} \, \mathrm{d}\sigma_x \tag{2.5}$$

und man könnte $U(a)$ tatsächlich durch ein einfaches Randintegral bestimmen. Ein Problem hierbei ist, dass die Berechnung einer solchen Funktion $\widetilde{\gamma_a}$ nicht trivial ist. Insbesondere ist Φ in der Darstellung (2.3) dann die Lösung zum Dirichlet-Problem mit den Randwerten $-s_a$ und damit genau so schwer zu lösen wie zu jedem anderen Randwert.

Korollar 2.9 (Poisson-Integralformel) *Sei $U \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ harmonisch. Dann gibt es genau eine, nur von Ω abhängige Funktion $p \in C(\Omega \times \partial\Omega)$, $(a, x) \mapsto p_a(x)$, so dass für alle $a \in \Omega$*

$$U(a) = \int_{\partial\Omega} p_a(x) \cdot U(x) \, d\sigma_x \tag{2.6}$$

gilt. Die Funktion $p_a \colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$ heißt Poisson-Kern.

p_a: Poisson-Kern $\partial\Omega \to \mathbb{R}$ zum Punkt a

[9] In der Literatur, z. B. in [Jos98], wird teilweise schon s_a als Fundamentallösung bezeichnet; γ_a heißt dann *Green'sche Funktion.*

[10] Das Paar $\left(U, \frac{\partial U}{\partial \nu}\right)$ heißt *Cauchy-Daten.*

[11] Eine *Green'sche Funktion zweiter Art* ist eine Fundamentallösung mit verschwindenden Neumann-Randwerten.

Beweis:

P.1 (**Existenz**) Die Existenz folgt sofort aus der Existenz einer Green'schen Funktion erster Art und der Darstellung (2.5), denn $p_a := -\frac{\partial \widetilde{\gamma_a}}{\partial \nu}$ erfüllt (2.6) für alle U.

P.2 (**Eindeutigkeit**) Angenommen, es gäbe für ein $a \in \Omega$ *zwei* Funktionen p_a und $\widetilde{p_a}$, die sich an einem Punkt $x_0 \in \partial\Omega$ und damit wegen ihrer Stetigkeit auch in einer Umgebung $V_0 \subset \partial\Omega$ unterscheiden. Es sei o. B. d. A. $p_a > \widetilde{p_a}$ auf V_0. Wähle eine harmonische Funktion U mit den Randdaten

$$U(x) \begin{cases} > 0 & \text{falls } x \in V_0 \\ = 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

(solch eine Funktion existiert). Wenn p_a und $\widetilde{p_a}$ die Darstellung (2.6) erfüllen, dann gilt:

$$\begin{aligned} 0 = U(a) - U(a) &= \int_{\partial\Omega} p_a \cdot U \,\mathrm{d}\sigma_x - \int_{\partial\Omega} \widetilde{p_a} \cdot U \,\mathrm{d}\sigma_x \\ &= \int_{\partial\Omega} (p_a - \widetilde{p_a}) \cdot U \,\mathrm{d}\sigma_x = \int_{V_0} (p_a - \widetilde{p_a}) \cdot U \,\mathrm{d}\sigma_x > 0 \end{aligned}$$

Dies ist offenbar ein Widerspruch, also ist p_a eindeutig bestimmt. □

Umgekehrt gilt, dass zu einer vorgegebenen, glatten Randfunktion φ über die Darstellung (2.6) das Dirichlet-Problem gelöst werden kann, solange die Lösung u in $C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ liegt. Die Kenntnis des Poisson-Kerns für ein Gebiet Ω würde also eine Möglichkeit schaffen, das Dirichlet-Problem mittels numerischer Quadratur an jeder beliebigen Stelle $a \in \Omega$ zu berechnen.[12] Für einige einfache Gebiete ist eine Green'sche Funktion erster Art und damit auch der Poisson-Kern bekannt, so dass sich hier die Lösung des Dirichlet-Problems explizit aufschreiben lässt.

Satz 2.10 (Poisson-Integralformel für die Kugel) Sei $\Omega := B_r(y)$ die Kugel um y mit Radius $r > 0$. Sei weiter $a \in \Omega$ und φ eine stetige Funktion auf $\partial\Omega$. Dann ist U mit

$$U(a) := \frac{r^2 - |a-y|^2}{(r \cdot \omega_d)} \cdot \int_{\partial\Omega} \frac{\varphi(x)}{|a-x|^d} \,\mathrm{d}\sigma_x \tag{2.7}$$

die Lösung des Dirichlet-Problems zum Randwert φ.

2.3 Schwache Lösungen des Dirichlet-Problems

Wie oben gesehen, bringt die Suche nach einer Lösung im Funktionenraum $C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ einige Schwierigkeiten mit sich; insbesondere die Existenz einer solchen Lösung ist nicht immer gegeben. Um mit diesem Problem umzugehen, formt man die gegebene partielle Differentialgleichung in eine Minimierungsaufgabe in Form einer *Variationsformulierung* um,

[12] Siehe auch Anhang A für eine andere Herleitung des Poisson-Kerns.

die auf eine größere Klasse von Funktionen anwendbar ist. Anschließend sucht man in diesem größeren Raum nach einer Lösung der Variationsformulierung, die dann bei genügender Glattheit mit der klassischen Lösung identisch ist.

Es sei $C^2_\varphi(\Omega)$ die Menge der Funktionen in $C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$, die die Randfunktion φ annehmen, d. h. die Randbedingungen werden bereits in den Funktionenraum „eingebaut". Das Dirichlet-Problem zum Randwert φ lässt sich dann auch formulieren als: Finde $U \in C^2_\varphi(\Omega)$ mit $\Delta U = 0$. Es sollen nun auf $C^2_\varphi(\Omega)$ dazu äquivalente Formulierungen gefunden werden. Sei

$C^2_\varphi(\Omega)$: Funktionen mit Randwert φ

$$J\colon C^2_\varphi(\Omega) \to \mathbb{R}, \quad V \mapsto \int_\Omega |\nabla V|^2 \,\mathrm{d}x$$

die *Dirichlet-Energie*.

J: Dirichlet-Energie $\int_\Omega |\nabla V|^2 \,\mathrm{d}x$

Satz 2.11 ([KS07, Satz 1.2 & 1.4]) Für eine Funktion $U \in C^2_\varphi(\Omega)$ sind äquivalent:

1. U löst das Dirichlet-Problem (2.1).
2. U minimiert die Dirichlet-Energie, d. h.

$$\forall\, V \in C^2_\varphi(\Omega) : J(U) \le J(V) \tag{2.8}$$

3. U ist Lösung von

$\langle \cdot, \cdot \rangle$: euklidisches Skalarprodukt

$$\forall\, V \in C^2_0(\Omega) : \int_\Omega \langle \nabla U, \nabla V \rangle \,\mathrm{d}x = 0, \tag{2.9}$$

wobei $C^2_0(\Omega)$ die Menge der Funktionen in $C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ mit Null-Randbedingungen ist. Die Gleichung (2.9) heißt *Variationsformulierung des Dirichlet-Problems*.

$C^2_0(\Omega)$: Funktionen mit Randwert 0

Nach Satz 2.11 scheint es naheliegend, das Dirichlet-Problem durch Minimieren von J zu lösen; diese Methode heißt *Dirichlet-Prinzip*. Es stellt sich allerdings die Frage, in welchem Raum dies passieren soll. Auf der einen Seite ist es nicht offensichtlich, dass es in $C^2_\varphi(\Omega)$ überhaupt ein Minimum von J gibt.[13] Auf der anderen Seite erlaubt die Formulierung (2.8) es prinzipiell auch, mit Funktionen zu arbeiten, die nur *einmal* stetig differenzierbar sind.

Man macht sich an dieser Stelle Erkenntnisse aus der Funktionalanalysis über *Hilberträume* (nach DAVID HILBERT, 1862–1943), d. h. vollständige normierte Vektorräume mit Skalarprodukt, wobei die Norm aus dem Skalarprodukt induziert wird, zunutze. Eine zentrale Eigenschaft von Hilberträumen liefert der folgende Satz:

[13] Es ist allerdings auch nicht trivial, ein Gegenbeispiel zu finden. KARL THEODOR WILHELM WEIERSTRASS (1815–1897) zeigte, dass es für das der Dirichlet-Energie sehr ähnliche Funktional $u \mapsto \int_\Omega \left|(x \cdot u'(x))\right|^2 \mathrm{d}x$ mit $\Omega = [-1, 1]$ und die Randwerte $\varphi(\pm 1) = \pm 1$ im Raum $C^2_\varphi(\Omega)$ kein Minimum gibt [Wer07, S. 136]. Für die Dirichlet-Energie selbst sind in ganz natürlicher Weise die Gebiete und Randfunktionen, für die es keine Lösung des Dirichlet-Problems gibt, Kandidaten für ein nicht-existentes Minimum.

H: Hilbertraum
$\langle\cdot,\cdot\rangle_H$: Skalarprodukt auf H
H^*: Dualraum von H

Satz 2.12 (Riesz'scher Darstellungssatz [GT01, Theorem 5.7]) Sei H ein Hilbertraum mit Skalarprodukt $\langle\cdot,\cdot\rangle_H$ und dem *Dualraum* H^*, d. h. dem Raum der stetigen linearen Funktionale auf H. Dann gibt es für jedes lineare Funktional $l \in H^*$ ein eindeutig bestimmtes $u \in H$ mit

$$\forall\, v \in H : \langle u, v\rangle_H = l(v) \tag{2.10}$$

Der Riesz'sche Darstellungssatz wird zur besseren Unterscheidung auch häufig als *Satz von Fréchet-Riesz* (nach FRIGYES RIESZ, 1880–1956, und MAURICE RENÉ FRÉCHET, 1878–1973) bezeichnet. Für die Theorie der partiellen Differentialgleichungen ist eine Folgerung daraus essentiell geworden, die diese Aussage nicht nur für das Skalarprodukt, sondern allgemeiner für gewisse Bilinearformen macht.

$\|\cdot\|_H$: Norm auf H

Satz 2.13 (Satz von Lax-Milgram [GT01, Theorem 5.8]) Sei H ein Hilbertraum mit Skalarprodukt $\langle\cdot,\cdot\rangle_H$, der davon induzierten Norm $\|\cdot\|_H$ und dem Dualraum H^*. Sei $a\colon H \times H \to \mathbb{R}$ eine beschränkte, elliptische Bilinearform, d. h. es gibt Konstanten $c, C > 0$ mit

$$\forall\, v \in H : c \cdot \|v\|_H \le a(v, v)$$

$$\forall\, v, w \in H : |a(v, w)| \le C \cdot \|v\|_H \cdot \|w\|_H$$

Dann gibt es für jedes lineare Funktional $l \in H^*$ ein eindeutig bestimmtes $u \in H$ mit

$$\forall\, v \in H : a(u, v) = l(v) \tag{2.11}$$

Man betrachte jetzt noch einmal die Gleichung (2.9): Gesucht wird dort ein $U \in C^2_\varphi(\Omega)$. Da $C^2_\varphi(\Omega)$ ein affiner Unterraum von $C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ ist, ist jedes solche U Summe eines beliebigen aber festen $U_\varphi \in C^2_\varphi(\Omega)$ und eines variablen $U_0 \in C^2_0(\Omega)$. Man kann dann (2.9) wie folgt umschreiben,

$$\begin{aligned}\forall\, V \in C^2_0(\Omega) : \int_\Omega \langle \nabla U, \nabla V\rangle \,\mathrm{d}x = \int_\Omega \langle \nabla U_\varphi + U_0, \nabla V\rangle \,\mathrm{d}x = 0 \\ \iff \forall\, V \in C^2_0(\Omega) : \int_\Omega \langle \nabla U_0, \nabla V\rangle \,\mathrm{d}x = -\int_\Omega \langle \nabla U_\varphi, \nabla V\rangle \,\mathrm{d}x,\end{aligned}$$

und hat damit die Suche nach einer Lösung wieder auf den Vektorraum $C^2_0(\Omega)$ zurückgeführt. Sei nun

$$a(U_0, V) := \int_\Omega \langle \nabla U_0, \nabla V\rangle \,\mathrm{d}x \quad \text{und} \quad l(V) := -\int_\Omega \langle \nabla U_\varphi, \nabla V\rangle \,\mathrm{d}x$$

In einem Hilbertraum H, in dem Beschränktheit und Elliptizität des so definierten a nachgewiesen werden können (Linearität von a und l folgt aus der Linearität des Integrals), kann man den Satz von Lax-Milgram anwenden und erhält – ein bekanntes U_φ vorausgesetzt – die eindeutige Lösbarkeit der Variationsformulierung des Dirichlet-Problems im Raum H.

$C^2_\varphi(\Omega)$ selbst erfüllt diese Voraussetzungen offenbar nicht (zumindest nicht für alle Ω), da es sonst immer eine Lösung des Dirichlet-Problems in diesem Raum gäbe. Man erweitert daher die Klasse der Funktionen, in der man nach Lösungen sucht, und verwendet dazu folgenden Raum:

Definition 2.14 (Sobolevraum [KS07, Definition 5.21]) Die Vervollständigung von

$$\left\{V \in C^\infty(\Omega) \,\middle|\, \langle V, V\rangle_{H^1(\Omega)} < \infty\right\}$$

wobei

$$\langle V, W\rangle_{H^1(\Omega)} := \int_\Omega V \cdot W \,\mathrm{d}x + \int_\Omega \nabla V \cdot \nabla W \,\mathrm{d}x$$

bezüglich der von diesem Skalarprodukt induzierten Norm $\|\cdot\|_{H^1(\Omega)}$ heißt *Sobolevraum* $H^1(\Omega)$ (nach SERGEI LWOWITSCH SOBOLEW, 1908–1989).

Satz 2.15 (Eigenschaften von $H^1(\Omega)$) Der Sobolevraum $H^1(\Omega)$ hat die folgenden Eigenschaften:

- $H^1(\Omega)$ ist ein Unterraum von $L^2(\Omega)$. Für jedes $V \in H^1(\Omega)$ und alle $i \in \{1, \dots, d\}$ gibt es eine Funktion $\partial^i v \in L^2(\Omega)$ mit

  $$\forall\, F \in C_0^\infty(\Omega) : \int_\Omega V \cdot \frac{\partial F}{\partial x_i} \,\mathrm{d}x = -\int_\Omega \partial^i V \cdot F \,\mathrm{d}x$$

  $\partial^i V$ heißt *schwache Ableitung* von V in Richtung x_i. [KS07, Def. 5.20 & Satz 5.22]
- $H^1(\Omega)$ ist ein Hilbertraum. [Wer07, Satz V.1.13]
- Wie $L^2(\Omega)$-Funktionen sind auch $H^1(\Omega)$-Funktionen auf Nullmengen nicht definiert. Es gibt auf $H^1(\Omega)$ allerdings einen stetigen linearen Operator $\mathrm{tr}_\nearrow$, so dass für alle Funktionen $v \in C(\overline{\Omega}) \cap H^1(\Omega)$ gilt: $\mathrm{tr}_\nearrow(v) = v_{|\partial\Omega}$. Analog gibt es auf $H^1(\mathbb{R}^d \backslash \overline{\Omega})$ einen Operator $\mathrm{tr}_\swarrow$ mit $\forall\, V \in C(\mathbb{R}^d \backslash \overline{\Omega}) : \mathrm{tr}_\swarrow(V) = V_{|\partial\Omega}$ [SS04, Satz 2.6.8].

$\mathrm{tr}_\nearrow$: innerer Spuroperator

$\mathrm{tr}_\swarrow$: äußerer Spuroperator

$\mathrm{tr}_\nearrow$ und $\mathrm{tr}_\swarrow$ heißen innerer bzw. äußerer *Spuroperator* und können als „Randwerte“ von $H^1(\Omega)$- bzw. $H^1(\mathbb{R}^d \backslash \overline{\Omega})$-Funktionen verstanden werden. Falls nicht explizit anders angegeben, soll unter $\mathrm{tr}(V)$ die *innere* Spur verstanden werden, ohne zu behaupten, dass äußere und innere Spur übereinstimmen.

$H^1_\varphi(\Omega)$: $H^1(\Omega)$-Funktionen mit Spur φ

In Analogie zu $C^2_\varphi(\Omega)$ kann nun eine Funktion in $H^1_\varphi(\Omega) := \left\{V \in H^1(\Omega) \,\middle|\, \mathrm{tr}(V) = \varphi\right\}$ gesucht werden, die die Dirichlet-Energie (mit „schwachen Gradienten“) minimiert:

Problem 2.1 (Schwache Formulierung des Dirichlet-Problems)
Sei $H^1_0(\Omega) := \left\{V \in H^1(\Omega) \,\middle|\, \mathrm{tr}(V) = 0\right\}$. Finde $U \in H^1_\varphi(\Omega)$ mit

$H^1_0(\Omega)$: $H^1(\Omega)$-Funktionen mit Spur 0

$$\forall\, V \in H^1_0(\Omega) : \int_\Omega \langle \nabla U, \nabla V\rangle \,\mathrm{d}x = 0 \tag{2.12}$$

Wie oben kann man das Problem auch im Raum $H_0^1(\Omega)$ formulieren:

Problem 2.2 (Schwache Formulierung des Dirichlet-Problems für $H_0^1(\Omega)$)
Sei $U_\varphi \in H_\varphi^1(\Omega)$ eine Funktion, deren Spur identisch mit dem Randwert φ ist.

Finde $U = U_\varphi + U_0$ mit $U_0 \in H_0^1(\Omega)$, so dass

$$\forall\, V \in H_0^1(\Omega) : \int_\Omega \langle \nabla U_0, \nabla V \rangle \,\mathrm{d}x = -\int_\Omega \langle \nabla U_\varphi, \nabla V \rangle \,\mathrm{d}x \tag{2.13}$$

$H_0^1(\Omega)$ ist selbst wieder ein Hilbertraum. Weiter ist die symmetrische Bilinearform $a(U,V) := \int_\Omega \langle \nabla U, \nabla V \rangle \,\mathrm{d}x$ nach [SS04, Lemma 2.10.1] elliptisch, erfüllt also die Voraussetzungen des Satzes von Lax-Milgram. Daher existiert in $H_0^1(\Omega)$ eine eindeutig bestimmte Lösung von Problem 2.2, eine sog. *schwache Lösung*. Ist diese Lösung genügend glatt, so ist sie außerdem identisch mit der starken Lösung, vgl. [SS04, Abschnitt 2.9.3].

$H^{1/2}(\partial\Omega)$: Spurraum von $H^1(\Omega)$-Funktionen
$H^{-1/2}(\partial\Omega)$: Dualraum von $H^{1/2}(\partial\Omega)$

Der Raum der Funktionen auf $\partial\Omega$, die als Spuren von $H^1(\Omega)$-Funktionen auftreten, heißt $H^{1/2}(\partial\Omega)$. Sein Dualraum bezüglich des Skalarprodukts $\langle v, w \rangle_{L^2(\partial\Omega)} = \int_{\partial\Omega} v \cdot w \,\mathrm{d}\sigma_x$ wird mit $H^{-1/2}(\partial\Omega)$ bezeichnet.

Fazit: Die Theorie der schwachen Lösungen sichert für einen geeignet gewählten Funktionenraum H Existenz und Eindeutigkeit eines Minimums der Dirichlet-Energie. Eine modifizierte Version des Satzes von Lax-Milgram (siehe Satz 3.4) bildet die Grundlage der Finite-Elemente-Methode und ermöglicht dort auch Konvergenzaussagen.

3 Gitterbasierte Methoden zur Lösung des Dirichlet-Problems

Die Grundlage gitterbasierter Lösungsverfahren besteht im Vergleich zum glatten Fall nicht darin, die Lösung u des Dirichlet-Problems in $C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ zu bestimmen, sondern in Ω ein *Gitter* zu konstruieren und dann entweder

1. an den Knoten dieses Gitters Funktionswerte zu berechnen, also nur punktweise eine Lösung zu bestimmen, oder
2. über das Gitter einen endlich-dimensionalen Funktionenraum zu induzieren, in dem eine Approximation der richtigen Lösung berechnet wird.

Man kann also zwischen *punktorientierten* Gittern, bei denen die Gitterpunkte und die Nachbarschaft untereinander im Vordergrund stehen (diese kommen bei der *Finite-Differenzen-Methode* zur Anwendung), und *elementorientierten* Gittern unterscheiden, bei denen es eher um die von den Gitterpunkten begrenzten Flächen geht (diese werden in der *Finite-Elemente-Methode* verwendet).

In der Praxis werden vielfältige Gitter eingesetzt, deren Anforderungen sich aus dem jeweiligen Anwendungszweck herleiten. Sie können

- unterschiedlich aufgelöst sein (uniform oder lokal verfeinert),
- aus verschiedenen Typen von Elementen bestehen (z. B. Dreiecks- oder Vierecksgitter),
- gerade/planare oder gekrümmte Elementgrenzen haben (*isoparametrische Gitter*),
- berandet oder periodisch sein

und viele weitere Eigenschaften haben, die teilweise auch erheblichen Einfluss auf Konvergenz und Stabilität eines numerischen Verfahrens haben.

In diesem Abschnitt sollen zwei klassische gitterbasierte Methoden zur Behandlung partieller Differentialgleichungen vorgestellt werden, um die Unterschiede zu den gitterfreien Methoden besser herausstellen zu können.

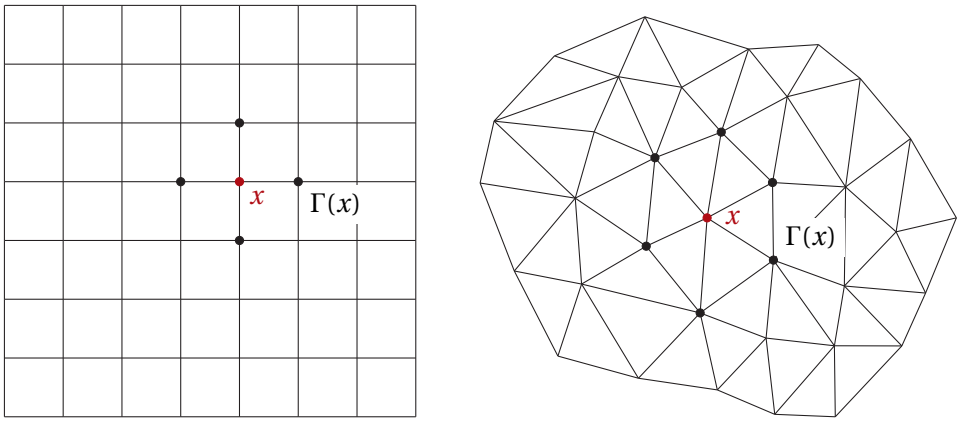
3.1 Finite-Differenzen-Methode

Die Finite-Differenzen-Methode (FDM) arbeitet auf einem punktorientierten Gitter und basiert auf der Diskretisierung des Laplace-Operators an den Gitterpunkten, indem er als gewichtete Summe von Differenzen von Funktionswerten an benachbarten Punkten dargestellt wird; daher auch der Name der Methode.

3.1.1 Theoretische Grundlagen

$\mathcal{V}$: Gitterpunkte
$\partial\mathcal{V}$: Rand-Gitterpunkte
2^X: Potenzmenge
Γ: Nachbarfunktion

Seien $\mathcal{V} \subset \Omega$ die Gitterpunkte eines Gitters in Ω, $\partial\mathcal{V} \subset \partial\Omega$ die Gitterpunkte auf $\partial\Omega$ und $\Gamma\colon \overline{\mathcal{V}} \to 2^{\overline{\mathcal{V}}}$ die Funktion, die zu einem Gitterpunkt $x \in \overline{\mathcal{V}}$ die Menge aller benachbarten Gitterpunkte angibt.



(a): Ein uniformes Gitter. (b): Eine Triangulierung.

Abbildung 10: Zwei verschiedene Gittertypen und die Nachbarfunktion Γ darauf.

U: gesuchte Funktion auf Gitterpunkten
$\vec{\varphi}$: auf $\partial\mathcal{V}$ vorgegebene Randwerte

Es sollen nun für alle Gitterpunkte in $\overline{\mathcal{V}}$ Funktionswerte bestimmt werden, die das Dirichlet-Problem approximativ lösen, d. h. es ist eine Funktion $U\colon \overline{\mathcal{V}} \to \mathbb{R}$ gesucht, die die Approximation einer harmonischen Funktion ist. Auf $\partial\mathcal{V}$ sind diese Werte durch die Vorgabe der Randwerte $\vec{\varphi} := \varphi(\partial\mathcal{V})$ bereits eindeutig bestimmt, d. h. es müssen noch Funktionswerte für Gitterpunkte in $\mathcal{V}$ bestimmt werden.

Δ_h: diskreter Laplace-Operator
$\omega_{x,y}$: Kantengewicht für die Differenz $U(y) - U(x)$

Um überhaupt von Harmonizität einer auf Punktwerten definierten Funktion sprechen zu können, muss zunächst ein diskreter Laplace-Operator Δ_h definiert werden, der möglichst viele Eigenschaften des glatten Laplace-Operators erhält. Man stellt $\Delta_h U(x)$ für $x \in \mathcal{V}$ als Summe von Differenzen zwischen Funktionswerten benachbarter Gitterpunkte dar:

$$\Delta_h U(x) := \sum_{y \in \Gamma(x)} \omega_{x,y} \cdot (U(y) - U(x)) \tag{3.1}$$

Diese Summe aus *Differenzen* lässt sich in eine Summe aller Funktions*werte* an Gitterpunkten umschreiben:

$$\Delta_h U(x) = \sum_{y\in\overline{\mathcal{V}}} m_{x,y}\cdot U(y) = \sum_{y\in\mathcal{V}} m_{x,y}\cdot U(y) + \sum_{y\in\partial\mathcal{V}} m_{x,y}\cdot\varphi(y) \tag{3.2}$$

mit

$$m_{x,y} = \begin{cases} -\sum_{z\in\Gamma(x)}\omega_{x,z} & \text{falls } x = y \\ \omega_{x,y} & \text{falls } y \text{ und } x \text{ benachbart} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{3.3}$$

$m_{x,y}$: Gewicht von $U(y)$ in $\Delta_h U(x)$

Jetzt lässt sich die Suche nach $\vec{U} := U(\mathcal{V})$ mit

$$A = \left(m_{x,y}\right)_{x\in\mathcal{V},y\in\mathcal{V}} \qquad \vec{b} = \left(-\sum_{y\in\partial\mathcal{V}} m_{x,y}\cdot\varphi(y)\right)_{x\in\mathcal{V}}$$

$\vec{U}$: gesuchte Funktionswerte an Gitterpunkten

als lineares Gleichungssystem $A\cdot\vec{U} = \vec{b}$ schreiben. A ist dünn besetzt, falls die Anzahl der Nachbarn eines Punktes $x\in\mathcal{V}$ nach oben durch eine Konstante beschränkt ist.

In dieser allgemeinen Beschreibung der Finite-Differenzen-Methode wurde noch nichts darüber gesagt, wie die Gewichte $\omega_{x,y}$ bzw. $m_{x,y}$ bestimmt werden. Diese müssen in Abhängigkeit des Gitters so gewählt werden, dass sie tatsächlich zu einer sinnvollen Approximation des Laplace-Operators und außerdem zu einer invertierbaren Matrix A führen. Am häufigsten wird für $\mathcal{V}$ ein uniformes Gitter (Abbildung 10a) verwendet, es ist aber prinzipiell auch die Anwendung auf einer Triangulierung von Ω (Abbildung 10b) möglich.

3.1.2 Uniforme Gitter

Sei zunächst Ω ein achsenparalleler Quader, begrenzt von den Punkten x_* und x^*, in das ein uniformes Gitter der *Gitterweite* $h\in\mathbb{R}$ einbeschrieben ist (vgl. Abbildung 10a), d. h.

h: Gitterweite

$$\overline{\mathcal{V}} = \left\{x\in\overline{\Omega}\,\middle|\,\exists\alpha\in\mathbb{N}^d : x = x_* + h\alpha\right\} \qquad \partial\mathcal{V} = \overline{\mathcal{V}}\cap\partial\Omega \qquad \mathcal{V} = \overline{\mathcal{V}}\setminus\partial\mathcal{V}$$

Der Punkt $x^* + h\alpha$, $\alpha\in\mathbb{N}^d$, sei mit x_α bezeichnet und $\Gamma_i(x_\alpha)$ die Menge der Nachbarn von x_α, die sich nur in der i-ten Komponente von x_α unterscheiden.

x_α: Gitterpunkt mit Gitterkoordinaten $\alpha\in\mathbb{N}^d$
$\Gamma_i(x)$: Nachbarfunktion in Dimension i

Beispiel 3.1 Für $d = 2$ ist

$$\Gamma(x_{i,j}) = \left\{x_{i-1,j}, x_{i+1,j}, x_{i,j-1}, x_{i,j+1}\right\} \quad \text{und} \quad \Gamma_i(x_{i,j}) = \left\{x_{i-1,j}, x_{i+1,j}\right\}$$

Bestimmung der Gewichte Der *diskrete Laplace-Operator auf einem uniformen Gitter* wird aus dem Differenzenquotienten hergeleitet. Für einen inneren Punkt x_α erhält man in der Darstellung (3.1) die (auf die *Differenz von Funktionswerten* bezogenen) Gewichte

$$\omega_{x_\alpha,y} = \begin{cases} \frac{1}{h^2} & \text{falls } y \text{ und } x_\alpha \text{ benachbart} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

und damit zu einer auf den Gitterpunkten gegebenen Funktion U:

$$\Delta_h U(x_\alpha) = \sum_{y \in \Gamma(x_\alpha)} \frac{1}{h^2} \cdot (U(y) - U(x_\alpha)) = \sum_{i=1}^{d} \sum_{y \in \Gamma_i(x_\alpha)} \frac{1}{h^2} \cdot (U(y) - U(x_\alpha)) \tag{3.4}$$

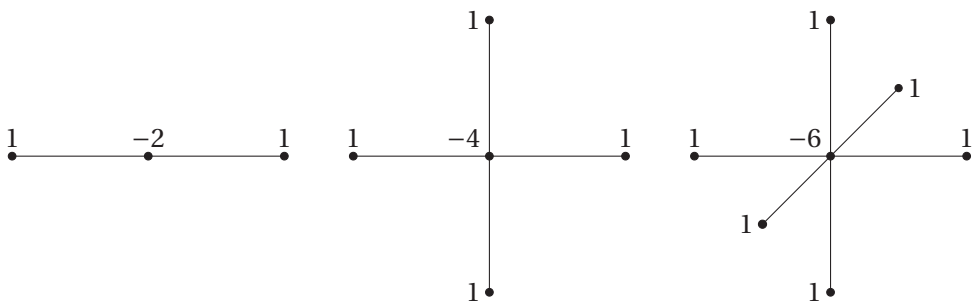
Daraus ergeben sich nach Summation die (auf die *Funktionswerte an Gitterpunkten* bezogenen) Gewichte

$$m_{x_\alpha, y} = \frac{1}{h^2} \cdot \begin{cases} -2d & \text{falls } x_\alpha = y \\ 1 & \text{falls } y \text{ und } x_\alpha \text{ benachbart} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

und damit folgt für die Darstellung (3.2):

$$\Delta_h U(x_\alpha) = \frac{1}{h^2} \cdot (-2d \cdot U(x_\alpha) + \sum_{y \in \Gamma(x_\alpha)} U(y)) \tag{3.5}$$

Die Gewichte $m_{x,y}$ lassen sich für verschiedene Dimensionen anschaulich aus einem sog. *Differenzenstern* herleiten, vgl. Abbildung 11.



(a): $d = 1$ (b): $d = 2$ (c): $d = 3$

Abbildung 11: Differenzensterne

Beispiel 3.2 Für den Fall $d = 2$ erhält man:

$$\Delta_h U(x_{i,j}) = \frac{1}{h^2} \cdot (U(x_{i-1,j}) + U(x_{i+1,j}) + U(x_{i,j-1}) + U(x_{i,j+1}) - 4 \cdot U(x_{i,j}))$$

Lösbarkeit & Konvergenz Diese Wahl der Gewichte für den diskreten Laplace-Operator ist durchaus vernünftig: Durch Taylorentwicklung kann man zeigen, dass er mit einer Ordnung von $O(h^2)$ gegen den glatten Laplace-Operator konvergiert [KS07, Lemma 4.4].[14] In jeder

[14] Es gibt auch Differenzensterne mit größerem „Träger“, die nicht nur die Funktionswerte an den unmittelbar benachbarten Gitterpunkten mit einbeziehen, sondern auch noch deren Nachbarn; so kann man auch höhere Konvergenzordnungen erreichen.

Zeile der Matrix M befinden sich höchstens fünf von Null verschiedene Einträge, zudem ist sie im Fall eines uniformen Gitters der angegebenen Gestalt symmetrisch. M ist invertierbar [KS07, Satz 4.9] und die resultierende Lösung U konvergiert – unter der Voraussetzung, dass die glatte Lösung in $C^3(\Omega)$ ist – punktweise mit Ordnung $O(h)$ gegen diese glatte Lösung [KS07, Satz 4.15].

Bewertung Die Finite-Differenzen-Methode ist eine direkt aus der Problemstellung diskretisierte Variante, um das Dirichlet-Problem zu lösen. Es wird zu vorgegebenen Randwerten eine punktweise definierte, diskret harmonische Funktion bestimmt. Das Verfahren ist in dem hier vorgestellten Spezialfall eines uniformen Gitters in einem achsenparallelen Quader mathematisch wenig komplex und leicht zu implementieren. Folgende Probleme sind jedoch mit der Methode verbunden:

- Die Lösung ist nur punktweise gegeben, nicht als Funktion auf ganz Ω. Will man U an einem Punkt $x \in \Omega \setminus \mathcal{V}$ auswerten, muss man x im Gitter lokalisieren und dann eine Form von Interpolation anwenden.
- Wird der Gebietsrand komplizierter, so dass nicht mehr alle inneren Gitterpunkte den gleichen Abstand h zu $\partial\Omega$ haben, müssen an diesen Stellen die Gewichte variiert werden. Es muss also eine weitere Klasse von Gitterpunkten eingeführt werden, die weder als vollständig innerer Punkt noch als Randpunkt betrachtet werden können. Für diese Punkte verschlechtert sich die Konvergenzordnung und die Implementierung wird komplizierter.
- Ähnliche Probleme treten auf, sobald das Gitter lokal verfeinert werden soll, um z. B. in bestimmten Gebieten eine höhere Präzision zu erreichen.

3.1.3 Triangulierungen

Für $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ kann man neben der Verwendung von uniformen Gittern auch Triangulierungen für die Finite-Differenzen-Methode verwenden (vgl. Abbildung 10b). Ein Problem, das hierbei auftritt, ist, dass sich nicht mehr in natürlicher Weise aus dem Differenzenquotienten eine Approximation des glatten Laplace-Operators definieren lässt: Einerseits fallen die Koordinatenrichtungen und die Richtung der benachbarten Gitterpunkte nicht mehr zusammen, andererseits kann es passieren, dass geometrisch nah beieinander liegende Punkte in der Kombinatorik der Triangulierung (graphentheoretischer Abstand) weit voneinander entfernt sind.

Bestimmung der Gewichte Es existieren verschiedene Varianten, einen diskreten Laplace-Operator auf einer Triangulierung zu definieren. Die ursprüngliche Motivation dafür kommt aus der diskreten Differentialgeometrie, in der man die Krümmung von diskreten Oberflächen an einem Punkt berechnen wollte. In [WMKG07] wird gezeigt, dass es mit einer gewissen

Menge an charakteristischen Eigenschaften des glatten Laplace-Operators (z. B. Maximumprinzip, Lokalität, ...) für *beliebige* Triangulierungen keine Definition eines diskreten Laplace-Operators gibt, die all diese Eigenschaften erhält.

Stellt man zusätzliche Bedingungen an die Triangulierung, z. B. eine *Delaunay-Eigenschaft* (nach BORIS NIKOLAJEWITSCH DELAUNAY, 1890–1980), d. h. der Umkreis jeden Dreiecks enthält keinen Eckpunkt eines anderen Dreiecks, so kann man mit der Cotangens-Formel aus [PP93] Kantengewichte für die Darstellung (3.1) aus der Form der an die Kante angrenzenden Dreiecke gewinnen,[15] vgl. Abbildung 12:

$$\omega_{x,y} = \begin{cases} \frac{1}{2} \cdot (\cot \alpha_{xy} + \cot \alpha_{yx}) & \text{falls } (x, y) \text{ eine innere Kante ist} \\ \frac{1}{2} \cdot \cot \alpha_{xy} & \text{falls } (x, y) \text{ eine Randkante ist} \end{cases}$$

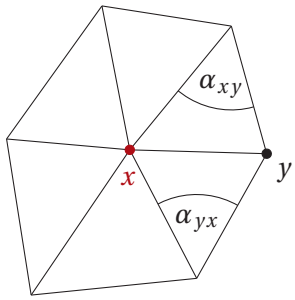


Abbildung 12: Bezeichnungen der Winkel für den Cotangens-Laplace-Operator

Daraus ergeben sich nach Summation die (auf die *Funktionswerte an Gitterpunkten* bezogenen) Gewichte

$$m_{x,y} = \begin{cases} -\sum_{z \in \Gamma(x)} \frac{1}{2} \cdot (\cot \alpha_{xz} + \cot \alpha_{zx}) & \text{falls } x = y \\ \frac{1}{2} \cdot (\cot \alpha_{xy} + \cot \alpha_{yx}) & \text{falls } y \text{ und } x \text{ benachbart} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{3.6}$$

Bemerkung 3.3 (Gewichte für höherdimensionale Gitter) Es gibt auch Ansätze, den Laplace-Operator nicht nur auf zweidimensionalen, stückweise glatten Mannigfaltigkeiten zu diskretisieren, sondern auch in höheren Dimensionen, vgl. beispielsweise [Gli09]. Damit lässt sich auch auf verallgemeinerten Triangulierungen im $\mathbb{R}^3$ analog vorgehen.

[15] Hat eine Triangulierung nicht die Delaunay-Eigenschaft, so kommt es bei der Verwendung des Cotangens-Laplace-Operators an den entsprechenden Stellen mit $\alpha_{xy} + \alpha_{yx} > \pi$ zu negativen Kantengewichten. Diese sind unerwünscht, weil sie z. B. zu einer Verletzung des Maximumprinzips führen. In [BS07] wird daher eine *intrinsische Delaunay-Triangulierung* berechnet und auf *dieser* die Cotangens-Formel verwendet. Dies führt zu nichtnegativen Gewichten, aber der Laplace-Operator hängt damit nicht mehr von denjenigen Knoten ab, die in der ursprünglichen Triangulierung benachbart sind, sondern von denjenigen, die in der berechneten intrinsischen Triangulierung benachbart sind. Weiterhin kann es u. U. sehr aufwändig sein, eine solche Triangulierung zu berechnen.

Lösbarkeit & Konvergenz Wie erwähnt sind die Cotangens-Gewichte für den diskreten Laplace-Operator ursprünglich zum Einsatz auf polyedrischen Flächen berechnet worden. Der Schwerpunkt bei der Untersuchung von Konvergenzeigenschaften liegt in der Literatur daher eher auf der Frage, inwieweit der Cotangens-Laplace-Operator einer polyedrischen Fläche gegen den Laplace-Beltrami-Operator einer glatten Fläche konvergiert, vgl. z. B. [War08]. In der Ebene kann zumindest für *beliebige* Triangulierungen keine punktweise Konvergenz erwartet werden.

Die sich ergebende Matrix für das lineare Gleichungssystemen ist invertierbar. Dies ist eine Konsequenz daraus, dass sie bis auf das Vorzeichen mit der Steifigkeitsmatrix für lineare Finite Elemente (siehe Abschnitt 3.2) identisch ist; dort ist die Lösbarkeit eine direkte Folgerung aus dem Satz von Lax-Milgram.

Bewertung Die Äquivalenz der Finite-Differenzen-Methode auf Triangulierungen mit den linearen Finiten Elementen führt dazu, dass die in diesem Unterabschnitt vorgestellte Vorgehensweise im Allgemeinen nicht mehr als „Finite-Differenzen-Methode“ verstanden wird. In dieser Hinsicht erbt sie auch (wenn zwischen den Gitterpunkten linear interpoliert wird) die Vor- und Nachteile der linearen Finiten Elemente:

- Im Gegensatz zur FDM auf uniformen Gittern führt eine Änderung des Gitters nicht zu einer komplizierteren Berechnung der Gewichte $m_{x,y}$. Dies ermöglicht komplizierte Ränder und lokale Verfeinerungen des Gitters.
- Es muss zunächst eine Triangulierung in Ω erzeugt werden, die sinnvollerweise die Delaunay-Eigenschaft besitzt. Dafür existieren zwar bekannte Algorithmen mit Laufzeit in $O(n \cdot \log n)$, aber die Implementierung ist dennoch komplizierter als bei der Generierung eines rein uniformen Gitters.
- Durch lineare Interpolation zwischen den Gitterpunkten erhält man eine eindeutige, stückweise lineare Funktion auf Ω aus den punktweise gegebenen Daten. Allerdings existiert kein Weg, die Regularität der gefundenen Lösung zu erhöhen, z. B. C^1-Übergänge an Kanten zu erzwingen.

3.2 Finite-Elemente-Methode

In der *Finite-Elemente-Methode* (FEM) wird nicht der Laplace-Operator diskretisiert, um eine an bestimmten Gitterpunkten definierte Funktion zu finden, wie dies in der FDM der Fall ist. Stattdessen wird eine Funktion gesucht, die auf ganz Ω definiert ist und in einem gewissen endlich-dimensionalen Unterraum von $H_0^1(\Omega)$ das Minimum der Dirichlet-Energie annimmt. Einen Überblick über das weite Feld der Finite-Elemente-Methoden gibt [Bra07].

3.2.1 Theoretische Grundlagen

Der größte Teil der theoretischen Grundlagen wurde bereits in Abschnitt 2.3 gelegt: Im Hilbertraum $H_0^1(\Omega)$ sichert der Satz von Lax-Milgram Existenz und Eindeutigkeit des Minimums der Dirichlet-Energie durch eine Aussage über die eindeutige Lösbarkeit der entsprechenden Variationsformulierung.

Essentiell für die Anwendung der Finite-Elemente-Methode ist folgende Verschärfung des Satzes:

Satz 3.4 (Satz von Lax-Milgram, Fassung für konvexe Mengen [Bra07, Satz 2.5]) Sei H ein Hilbertraum mit Skalarprodukt $\langle\cdot,\cdot\rangle_H$, der davon induzierten Norm $\|\cdot\|_H$ und dem Dualraum H^*. Sei V eine abgeschlossene, konvexe Teilmenge von H und $a\colon H\times H\to\mathbb{R}$ eine beschränkte, elliptische Bilinearform (vgl. Satz 2.13). Dann gibt es für jedes lineare Funktional $l\in H^*$ ein eindeutig bestimmtes $u\in V$ mit

$$\forall\, v\in V : a(u,v) = l(v) \tag{3.7}$$

Daraus folgt insbesondere, dass in jedem endlich-dimensionalen Unterraum von $H_0^1(\Omega)$ ein eindeutiges Minimum der Dirichlet-Energie, d. h. eine schwache Lösung des Dirichlet-Problems, existiert.

3.2.2 Diskretisierung

Ω: Polytop

S^h: endlich-dimensionaler Unterraum von $H^1(\Omega)$
φ: Randfunktion für das Dirichlet-Problem

Sei $\Omega\subset\mathbb{R}^d$ wieder ein Polytop mit Ecken $\{v_1,\dots,v_n\}$. Man wählt nun einen Unterraum $S^h\subset H^1(\Omega)$ und definiert für eine stetige Funktion $\varphi\colon\partial\Omega\to\mathbb{R}$

$$S_0^h := \left\{ v\in S^h \,\middle|\, \operatorname{tr}(v)=0 \right\} \qquad \text{und} \qquad S_\varphi^h := \left\{ v\in S^h \,\middle|\, \operatorname{tr}(v)=\varphi \right\}$$

Damit lässt sich dann folgende diskrete Variante von Problem 2.2 formulieren:

Problem 3.1 (Schwache Formulierung des Dirichlet-Problems, FEM-Version) Sei $U_\varphi\in S_\varphi^h$, so dass U_φ die vorgegebenen Randwerte annimmt.

Finde $U = U_\varphi + U_0$ mit $U_0 \in S_0^h$, so dass

$$\forall\, V \in S_0^h : \int_\Omega \langle \nabla U_0, \nabla V \rangle \,\mathrm{d}x = -\int_\Omega \langle \nabla U_\varphi, \nabla V \rangle \,\mathrm{d}V \tag{3.8}$$

Mit $V := S_0^h$ erfüllt Problem 3.1 genau die Voraussetzungen von Satz 3.4, ist also eindeutig lösbar.

Wenn $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ eine Basis von S_0^h ist, dann ist U_0 eine Linearkombination dieser Basis: $U_0 = \sum_{i=1}^N U^i \cdot \lambda_i$. Weiterhin reicht es, (3.8) nur für alle λ_i zu prüfen, damit die Bedingung für alle $V \in S_0^h$ gilt. Damit ist nach Wahl einer Basis das zu lösende Problem von folgender Gestalt:

N: Dimension von S_0^h
$\lambda_1, \dots, \lambda_N$: S_0^h-Basis
$U^1, \dots, U^N$: Basiskoeffizienten von U_0

Problem 3.2: Sei $U_\varphi \in S_\varphi^h$, so dass U_φ die vorgegebenen Randwerte annimmt.

Finde Koeffizienten $\left(U^1, \dots, U^N\right)$, so dass

$$\forall\, i \in \{1, \dots, N\} : \sum_{j=1}^N U^j \cdot \int_\Omega \langle \nabla \lambda_j, \nabla \lambda_i \rangle \,\mathrm{d}x = -\int_\Omega \langle \nabla U_\varphi, \nabla \lambda_i \rangle \,\mathrm{d}x \tag{3.9}$$

3.2.3 Algorithmus

1. Zuerst muss man sich auf einen Unterraum S^h festlegen, in dem Problem 3.1 gelöst werden soll. Bis hierhin trat in der FEM noch kein Gitter auf, sondern es war nur von abstrakten Funktionenräumen die Rede. An dieser Stelle muss jedoch mit der Wahl des konkreten Raumes S^h in der Regel ein elementorientiertes Gitter festgelegt werden, das gewisse Charakteristika von S^h bestimmt. Die Existenz eines Gitters ist jedoch in der Finite-Elemente-Methode nicht zwingend notwendig. Man könnte beispielsweise auch die Polynome vom Grad $\leq g$ auf ganz $\mathbb{R}^d$ als Funktionenraum wählen, dann ist kein Gitter notwendig.

   Beispiel 3.5 Sei $\mathcal{T}$ eine Triangulierung von Ω mit N inneren Knoten $x_1, \dots, x_N$, M Randknoten $x_{N+1}, \dots, x_{N+M}$ und simplizialen Elementen $\{\tau_i\}$.
   Eine einfache Wahl für S^h ist dann der Raum der stetigen, auf jedem $\tau \in \mathcal{T}$ linearen Funktionen auf Ω. Die Wahl von N als Anzahl der inneren Gitterknoten ist dabei kein Missbrauch der Notation, denn die Dimension von S^h *ist* gerade die Anzahl der inneren Gitterknoten.

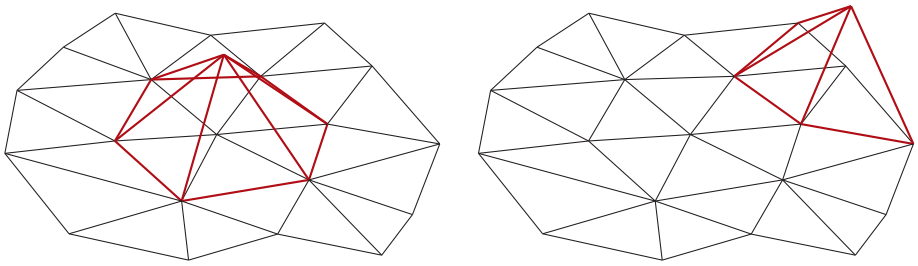
   $\mathcal{T}$: Triangulierung von Ω
   x_i: Gitterknoten von $\mathcal{T}$
   τ: Element von $\mathcal{T}$

2. Nun muss eine Basis $B_0^h := \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ von S_0^h gewählt werden, deren Koeffizienten bestimmt werden sollen. Da in der Assemblierung der Matrix für das lineare Gleichungssystem der Term $\int_\Omega \langle \nabla \lambda_j, \nabla \lambda_i \rangle \,\mathrm{d}x$ berechnet werden muss, ist es empfehlenswert, Basisfunktionen mit kleinem Träger zu wählen, so dass dieses Integral oft verschwindet. Ein Grund, sich *gegen* diese Regel zu entscheiden, ist beispielsweise ein Multilevel-Vorgehen mit Verwendung einer hierarchischen Basis.

Beispiel 3.6 Für den oben eingeführten Raum der stückweise linearen Funktionen ist eine triviale Basis die *Knotenbasis* aus Hütchenfunktionen, d. h. denjenigen Funktionen $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ mit $\lambda_i(x_j) = \delta_{ij}$, siehe Abbildung 13a.

3. Anschließend muss, wie oben beschrieben, eine beliebige Funktion $U_\varphi \in S^h$ bestimmt werden, die überhaupt die Randbedingungen φ annimmt. Dazu wähle man nach dem Basisergänzungssatz zu der S_0^h-Basis B_0^h noch weitere Funktionen $B_*^h := \{\lambda_{N+1}, \dots, \lambda_{N+M}\}$, so dass $\{\lambda_1, \dots, \lambda_{N+M}\}$ ganz S^h aufspannt. Dann müssen Koeffizienten $U^{N+1}, \dots, U^{N+M}$ bestimmt werden, so dass $U_\varphi := \sum_{i=N+1}^{N+M} U^i \cdot \lambda_i$ den Randwert φ (zumindest approximativ) annimmt. Die restlichen Koeffizienten $U^1, \dots, U^N$ können für U_φ beliebig gewählt werden (z. B. identisch 0), da dies keinen Einfluss auf die Randwerte hat.

Beispiel 3.7 Für die stückweise linearen Funktionen mit Knotenbasis sind die restlichen Basisfunktionen $\{\lambda_{N+1}, \dots, \lambda_{N+M}\}$ durch Hütchenfunktionen auf Randgitterpunkten $\{x_{N+1}, \dots, x_{N+M}\}$ gegeben, siehe Abbildung 13b. Die entsprechenden Koeffizienten erhält man in diesem Fall einfach durch Auswertung von φ an den Randgitterpunkten.



(a): Eine Basisfunktion aus B_0^h.

(b): Eine Basisfunktion von B_*^h.

Abbildung 13: Elemente der Knotenbasis für stückweise lineare Funktionen, Beispiele in $d = 2$.

4. Um die Lösung $U = U_0 + U_\varphi$ zu bestimmen, müssen nun noch die Koeffizienten für die Basisfunktionen aus B_0^h bestimmt werden. Dazu muss ein lineares Gleichungssystem $A \cdot \vec{U} = \vec{b}$ aufgestellt werden, das Problem 3.2 entspricht, d. h.

$$a_{i,j} = \int_\Omega \nabla\lambda_i \cdot \nabla\lambda_j \, \mathrm{d}x \qquad\qquad b_i = -\int_\Omega \nabla U_\varphi \cdot \nabla\lambda_i \, \mathrm{d}x \tag{3.10}$$

Sinnvollerweise wird das Integral über Ω in eine Summe aus Integralen über den einzelnen Gitterelementen aufgeteilt und dort entweder durch Quadraturformeln oder ggf. mit Hilfe einer geschlossenen Darstellung berechnet.

Beispiel 3.8 Im Falle der stückweise linearen Funktionen mit Knotenbasis

- ist $a_{i,j}$ nur dann verschieden von 0, wenn die zu den Basisfunktionen λ_i und λ_j gehörenden Gitterpunkte x_i bzw. x_j benachbart sind,

- reduziert sich das Integrationsgebiet auf die beiden an die Kante (x_i, x_j) benachbarten Elemente (vgl. Abbildung 14),
- sind die Gradienten auf den einzelnen Dreiecken konstant und das Integral kann in einer geschlossenen Form dargestellt werden.

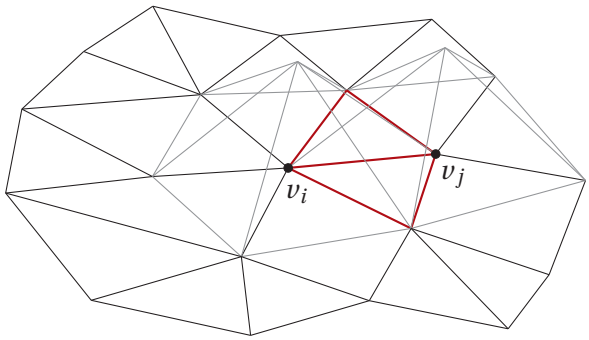


Abbildung 14: Integrationsgebiet zweier benachbarter Hütchenfunktionen.

In der Tat gilt für die gewählte Basis und $d = 2$ [PP93]:

$$a_{i,j} = \begin{cases} \sum_{x_k \in \Gamma(x_i)} \frac{1}{2} \cdot (\cot \alpha_{ik} + \cot \alpha_{ki}) & \text{falls } i = j \\ -\frac{1}{2} \cdot (\cot \alpha_{ij} + \cot \alpha_{ji}) & \text{falls } x_i \text{ und } x_j \text{ benachbart} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für die rechte Seite gilt dies entsprechend: Wenn U_φ als Linearkombination von B_*^h-Funktionen geschrieben wird, dann ist

$$b_i = -\sum_{k=N+1}^{N+M} U^k \cdot \int_\Omega (\nabla \lambda_k \cdot \nabla \lambda_i) \, \mathrm{d}x = \sum_{k=N+1}^{N+M} U^k \cdot w_{ki}$$

$$\text{mit } w_{ki} = \begin{cases} \frac{1}{2} \cdot (\cot \alpha_{ik} + \cot \alpha_{ki}) & \text{falls } x_k \text{ und } x_i \text{ benachbart} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Dies entspricht genau dem Negativen der Matrix bzw. rechten Seite in (3.6), die in der Finite-Differenzen-Methode für Triangulierungen angegeben wurden.

Die Invertierbarkeit von A ist eine Folgerung aus dem Satz von Lax-Milgram. Unter Beachtung gewisser Voraussetzungen an die Triangulierung und die glatte Lösung folgt Konvergenz gegen die glatte Lösung in der $H^1(\Omega)$-Norm.

4 Gitterfreie Methoden zur Lösung des Dirichlet-Problems

Definition Gitterfreie Methoden haben ihren Namen daher, dass sie darauf verzichten, in Ω ein Gitter zu konstruieren, auf dem Lösungswerte berechnet werden. Eine Form von Diskretisierung oder der Verwendung eines Gitters *auf dem Rand* von Ω ist unter Umständen trotzdem notwendig (beispielsweise für die Berechnung von Randintegralen), aber auch solche Verfahren sollen hier als „gitterfrei“ bezeichnet werden.

Vorteile gitterbasierter Verfahren Die im vorherigen Abschnitt vorgestellten Methoden werden in der Praxis häufig aufgrund ihrer Flexibilität bei der Behandlung verschiedener Probleme eingesetzt. Partielle Differentialgleichungen, die aus physikalischen Fragestellungen heraus entstehen, beinhalten häufig

- komplexere Differentialoperatoren als nur den Laplace-Operator,
- kombinierte Randbedingungen, z. B. aus am Rand vorgegebenen Funktionswerten und -ableitungen,
- unterschiedliche rechte Seiten der Differentialgleichung auf verschiedenen Gebieten von Ω.

Insbesondere die Finite-Elemente-Methode profitiert hier von einer hohen Flexibilität bei der Anpassung an solche Anforderungen.

Nachteile gitterbasierter Verfahren Die Notwendigkeit eines Gitters in Ω sowohl bei der Finite-Differenzen-, als auch der Finite-Elemente-Methode hat jedoch gewisse Nachteile:

- Es muss ein Gitter in Ω konstruiert werden. Das ist zunächst eine triviale Feststellung, der Prozess der Gittergenerierung ist aber durchaus kein trivialer, wenn man von uniformen Gittern absieht. Häufig ist für die Konvergenz von numerischen Methoden oder bestimmten Eigenschaften der Lösung eine gewisse Form der Gitterelemente, beispielsweise die Erfüllung eines Inkreis-/Umkreisradius-Kriteriums, notwendig. Während in $d = 2$ die Delaunay-Triangulierung (siehe auch Abschnitt 3.1.3) die meisten dieser Kriterien erfüllt, ist für $d \geq 3$ die Generierung „guter“ Gitter häufig nicht einfach und ein Gegenstand aktueller Forschung. Die Generierung solcher Triangulierungen für ein gegebenes Gebiet muss in der Praxis auf die Laufzeit aufgeschlagen werden.
- Bei gitterbasierten Verfahren wird eine Funktion berechnet, die auf dem *gesamten* Rechengebiet Ω definiert ist. Will man die Lösung U des Dirichlet-Problems nur an wenigen Punkten in Ω auswerten, muss die Funktion U trotzdem auf *ganz* Ω bekannt sein; es ist nicht möglich, sie nur für diejenigen Stellen zu berechnen, an denen sie ausgewertet werden soll.

- Ist die Lösung U des Dirichlet-Problems in einem gitterbasierten Verfahren berechnet worden, so muss zur Auswertung von U an einem Punkt $p \in \Omega$ zunächst das Gitterelement bestimmt werden, in dem sich p befindet. Für uniforme Gitter ist dies eine sehr einfache Aufgabe, für allgemeine Gitter benötigt man jedoch räumliche Datenstrukturen (z. B. Octree), die das schnelle Auffinden des richtigen Elementes ermöglichen, wenn man eine Iteration über das gesamte Gitter vermeiden will. Dies erhöht die Komplexität der Implementierung und bindet Rechnerressourcen, die nichts mit der eigentlichen Lösung des Problems zu tun haben.

- Die mit linearen finiten Elementen berechnete Lösung ist an den Kanten zwischen zwei Elementen nicht differenzierbar. Die entsprechenden Sprünge der 1. Ableitung sind, z. B. bei Interpolationsanwendungen, auch visuell wahrnehmbar, vgl. das Gouraud-Shading in 1b. Während sich der Polynomgrad auf jedem Element relativ einfach erhöhen lässt, ist es deutlich schwieriger, globale Differenzierbarkeit zu erreichen. Die *Argyris-Elemente* (nach JOHN HADJI ARGYRIS, 1913–2004), die eine C^1-Lösung ermöglichen, haben beispielsweise 21 Freiheitsgrade pro Dreieckselement [Bra07, Tabelle 2].

Funktionsweise gitterfreier Methoden Die in diesem Abschnitt vorgestellten Verfahren arbeiten ohne ein Gitter in Ω. Sie geben, verglichen mit der Finite-Elemente-Methode, viel Flexibilität auf und basieren stärker auf der konkreten Problemstellung (2.1). Aus den Eigenschaften harmonischer Funktionen resultierende Zusammenhänge zwischen der harmonischen Funktion U im Innern und einer korrespondierenden Funktion u auf dem Rand von Ω werden verwendet, um in einem vorgeschobenen Schritt eine solche, nur vom Gebiet und den vorgegebenen Randdaten abhängige, Randfunktion zu berechnen. Anschließend kann über eine zweite Rechenvorschrift zu einem beliebigen $p \in \Omega$ die Funktion U an p ausgewertet werden. Die hier vorgestellten Verfahren induzieren dabei alle tatsächlich harmonische C^∞-Funktionen auf Ω; eine logische Konsequenz daraus ist, dass sich sämtliche Approximationsfehler auf die Annahme der vorgegebenen Randdaten konzentrieren.

Vorgehensweise Im Folgenden werden vier gitterfreie Methoden beschrieben, die zur Berechnung harmonischer Koordinaten verwendet werden können. Dabei wird, soweit erforderlich, die theoretische Grundlage für das Verfahren gelegt und die numerische Umsetzung so erläutert, dass eine prototypische Implementierung ermöglicht wird.

Die durch die Motivation der Berechnung harmonischer Koordinaten diktierten Nebenbedingungen sollen besonders beachtet werden:

- Ω ist ein k-Polytop und $\partial\Omega$ besteht nur aus $(k-1)$-Simplizes.

- Um einen kompletten Satz harmonischer Koordinatenfunktionen $\psi_1, \ldots, \psi_n$ zu berechnen, muss für *jede* Ecke von $\partial\Omega$ ein Dirichlet-Problem (zur entsprechenden Hütchenfunktion auf dem Rand) gelöst werden.

Die Verfahren werden anschließend hinsichtlich folgender Aspekte verglichen:

- Welcher zeitliche Aufwand ist mit dieser Methode verbunden? Inwieweit verringert sich der Rechenaufwand, wenn man das Dirichlet-Problem für mehrere Randfunktionen lösen möchte?
- Welcher Speicherbedarf ist mit dieser Methode verbunden?
- Wie hoch ist der Aufwand beim Implementieren bzw. die Komplexität des entstehenden Programmcodes?

Zum Abschluss werden nach Beleuchtung weiterer spezieller Eigenschaften konkrete Empfehlungen für Verfahren vor dem Hintergrund bestimmter Einsatzgebiete gegeben.

Eine Konvergenzanalyse der einzelnen Verfahren wird nicht vorgenommen, da dies den Umfang der Arbeit deutlich überschreiten würde; hier zeigt sich eine Möglichkeit zur weiteren Vertiefung in das Gebiet.

Bemerkung 4.1 (Notation) In den folgenden Abschnitten resultieren Funktionen auf Ω häufig aus Transformationen von korrespondierenden Funktionen auf $\partial\Omega$. Um diese zu unterscheiden und gleichzeitig die Verbindung zwischen ihnen zu verdeutlichen, werden Funktionen auf $\partial\Omega$ im Folgenden mit Kleinbuchstaben geschrieben, die daraus resultierenden Funktionen auf dem Inneren mit den entsprechenden Großbuchstaben.

4.1 Methode der Fundamentallösungen

Die Methode der Fundamentallösungen basiert darauf, eine Lösung des Dirichlet-Problems als Linearkombination von Singularitätenfunktionen darzustellen.[16] Dadurch garantiert man exakte Harmonizität der Lösung, allerdings werden die vorgegebenen Randwerte nur approximativ angenommen. [FK98] gibt einen breiten Überblick über das Verfahren, in [MKB+08] wird es verwendet, um harmonische Koordinaten als Basis eines Funktionenraums für die Finite-Elemente-Methode zu berechnen.

4.1.1 Theoretische Grundlagen & Diskretisierung

Schreibweise als Linearkombination Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ wie in der Einleitung definiert und φ eine stetige Funktion auf $\partial\Omega$. Seien weiter $\{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}^d \setminus \overline{\Omega}$ Punkte außerhalb von $\overline{\Omega}$. Bei der klassischen Methode der Fundamentallösungen wird eine Funktion U in der Darstellung

x_i: Zentrum der Singularitätenfunktionen
N: Anzahl der Singularitätenfunktionen
U^i: gesuchter Koeffizient von s_{x_i}

$$U(x) = \sum_{i=1}^{N} U^i \cdot s_{x_i}(x)$$

mit reellwertigen Koeffizienzen $\{U^1, \dots, U^N\}$ geschrieben. Daraus folgt, dass U auf Ω eine harmonische Funktion ist, denn

1. es liegen alle Singularitäten von U außerhalb von Ω,
2. s_{x_i} ist auf $\mathbb{R}^d \setminus \{x_i\}$ harmonisch und
3. der Laplace-Operator ist linear, d. h. jede Linearkombination harmonischer Funktionen ist selbst wieder harmonisch.

In diesem Kontext werden die Singularitätenfunktionen häufig auch als *radiale Basisfunktionen* (RBF) bezeichnet.

In der Methode der Fundamentallösungen werden die Koeffizienten $\{U^1, \dots, U^N\}$ so bestimmt, dass U minimalen L^2-Abstand zur vorgegebenen Randfunktion φ hat:

$$\|U - \varphi\|^2_{L^2(\partial\Omega)} = \int_{\partial\Omega} \left|U(x) - \varphi(x)\right|^2 \mathrm{d}\sigma_x \tag{4.1}$$

Addition eines linearen Teils Der von $\{s_{x_1}, \dots, s_{x_N}\}$ aufgespannte Raum enthält nicht die konstanten und linearen Funktionen auf Ω. Dies ist aus zwei Gründen problematisch:

- Für eine Verwendung als harmonische Koordinaten ist erforderlich, dass die berechneten Funktionen ψ_i eine Teilung der Eins ergeben. Dies bedeutet, dass die konstante Eins-Funktion auch im Lösungsraum liegen muss.

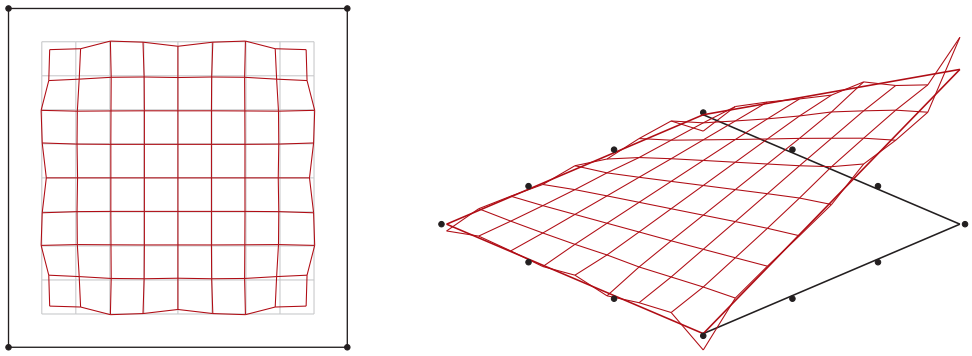
[16] Der Name „Methode der Fundamentallösungen“ rührt daher, dass die Singularitätenfunktion häufig auch Fundamentallösung heißt, vgl. Fußnote 9 auf Seite 15. Prinzipiell ist es auch möglich, andere partielle Differentialgleichungen mit dieser Methode zu behandeln, wenn eine Fundamentallösung bekannt ist.

- Für eine Verwendung der ψ_i als Basis eines Finite-Elemente-Raums auf Ω sollten lineare Funktionen in dieser Basis darstellbar sein, sonst kommt es schon bei sehr einfachen Lösungen zu Approximationsfehlern.

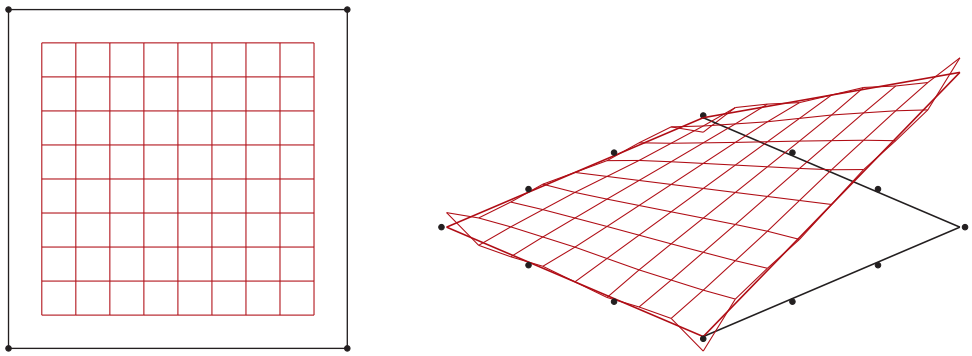
w^i: Koeffizienten des linearen Anteils

Um dieses Defizit zu beheben, werden in [MKB+08] ein linearer und ein konstanter Term addiert (vgl. Abbildung 15), d. h. es kommen noch $d+1$ weitere reellwertige Koeffizienten $(w^1, \ldots, w^d) =: w$ und w^0 dazu, so dass sich folgende Darstellung ergibt:

$$U(x) = \sum_{i=1}^{N} U^i \cdot s_{x_i}(x) + \langle w, x \rangle + w^0 \tag{4.2}$$



(a): Links: Ohne den linearen Term können lineare und konstante Funktionen nicht reproduziert werden, insbesondere kann die Identität $p = \sum_{i=1}^{n} \psi_i(p) v_i$ nicht exakt eingehalten werden. Rechts: Eine ohne den linearen Term berechnete Koordinatenfunktion und der am Rand auftretende Fehler. Die Punkte zeigen die Zentren der RBF an.



(b): Links: Mit dem linearen Term können lineare und konstante Funktionen reproduziert werden, insbesondere gilt die Identität $p = \sum_{i=1}^{n} \psi_i(p) v_i$ für eine beliebig kleine Anzahl von RBF. Rechts: Die mit dem linearen Term berechnete Koordinatenfunktion hat ebenfalls am Rand auftretende Fehler. Die Punkte zeigen die Zentren der RBF an.

Abbildung 15: Auswirkungen des linearen Terms auf Geometriedeformation und die Form der Koordinatenfunktionen.

Diskretisierung des L^2-Integrals Um das L^2-Randintegral in (4.1) zu approximieren, werden in [MKB+08] eine Menge von *Observationspunkten*[17] $\{c_1, \ldots, c_M\} \subset \partial\Omega$ gewählt (siehe Abbildung 16) und das Integral durch eine Summe von quadratischen Abständen ersetzt:

$$\begin{aligned}\|U-\varphi\|^2_{L^2(\partial\Omega)} &\approx \frac{1}{M}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left|U(c_i)-\varphi(c_i)\right|^2 \\ &= \frac{1}{M}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left|\sum_{j=1}^{N} U^j\cdot s_{x_j}(c_i)+\langle w, c_i\rangle + w^0 - \varphi(c_i)\right|^2 \qquad (4.3)\end{aligned}$$

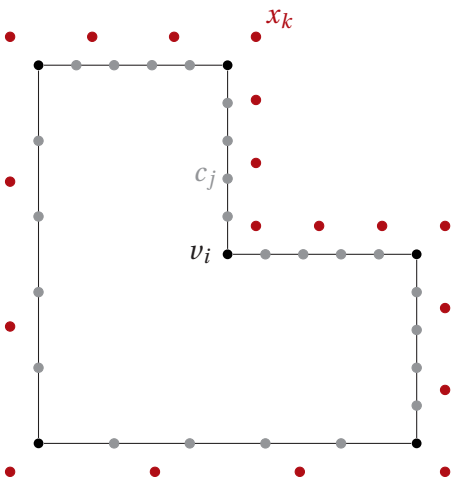


Abbildung 16: Punkte für die Methode der Fundamentallösungen. Beispiel in $d = 2$ bei äquidistanter Verteilung von RBF-Zentren $\{x_1, \ldots, x_N\}$ und Observationspunkten $\{c_1, \ldots, c_M\}$ auf jeder Kante.

4.1.2 Algorithmus

1. Zunächst müssen die RBF-Zentren $x_1, \ldots, x_N$ bestimmt werden.[18] Um eine gute Approximation zu ermöglichen, sollten sie nahe an $\partial\Omega$ liegen; allerdings nicht zu nahe, um numerische Probleme bei der Auswertung der Singularitätenfunktionen zu vermeiden. Es ist eine naheliegende Idee, $\partial\Omega$ zu subdividieren und die entstehenden Punkte um

[17] In dem Artikel selbst werden diese Punkte "collocation points" genannt. In der Literatur werden darunter jedoch in der Regel Punkte verstanden, an denen die berechnete Funktion *exakt* die vorgegebenen Werte annimmt. Bei einer Bestapproximationsaufgabe ist dies im Allgemeinen gerade *nicht* der Fall, so dass hier auf diese Bezeichnung verzichtet werden soll. Man kann die Anzahl der Observationspunkte zwar genau so wählen, dass sie der Anzahl der Freiheitsgrade entspricht (dann wären die c_i tatsächlich Kollokationspunkte). Nach Beobachtungen in [MKB+08] führt dies allerdings dazu, dass die Lösung dann sehr stark vom Abstand der x_i zu Ω abhängt und es zwischen den Observationspunkten zu Oszillationen kommt. Die eindeutige Lösbarkeit scheint ebenfalls nicht gesichert.

[18] Es ist möglich, statt einer Vorgabe der x_i auch diese in das Minimierungsproblem mit einzubeziehen; dies führt dann allerdings zu einem nicht-linearen System.

einen Betrag ε in Richtung der äußeren Normalen von $\partial\Omega$ zu verschieben. Vorsicht ist bei nicht-konvexen Gebieten geboten, wenn die äußere Normale potentiell wieder *in* das Gebiet zeigt.

2. Anschließend müssen die Observationspunkte $c_1, \dots, c_M$ auf $\partial\Omega$ bestimmt werden. Auch hier kann wieder ein einfaches Subdivisionsschema auf $\partial\Omega$ angewendet werden.

   Wenn Ω ein Polygon ist und die Ecken $\{v_1, \dots, v_n\}$ von $\partial\Omega$ in einer Matrix V der Form

$$\begin{pmatrix} v_1^x & v_1^y \\ v_2^x & v_2^y \\ \vdots & \vdots \\ v_n^x & v_n^y \end{pmatrix}$$

   gespeichert sind, kann man dafür eine dünn besetzte $M \times n$-*Sampling-Matrix* S der Form

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \\ \alpha_1 & 1-\alpha_1 & \\ \alpha_2 & 1-\alpha_2 & \\ \vdots & \vdots & \\ & 1 & 0 \\ & \alpha_1 & 1-\alpha_1 \\ & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

   verwenden und die Matrix C mit den Koordinaten der Observationspunkte über $C = S \cdot V$ berechnen. Dann hat jeder Punkt c_i die Form $\alpha \cdot v_j + (1-\alpha) \cdot v_{j+1}$, ist also mittels klassischer baryzentrischer Koordinaten $(\alpha, 1-\alpha)$ auf die Polygonkante $\left(v_j, v_{j+1}\right)$ festgelegt.

   Ist Ω ein k-Polytop von Dimension $k \geq 3$, funktioniert dieses Verfahren ebenfalls; hier ist jedoch beim Assemblieren von S darauf zu achten, dass die Konnektivität der Simplizes in $\partial\Omega$ beachtet wird. Es ist dann jede Zeile von der Gestalt

$$\begin{pmatrix} \cdots & \alpha_1 & \cdots & \alpha_2 & \cdots & \alpha_k & \cdots \end{pmatrix},$$

   so dass jeder Punkt c_i in einem $(k-1)$-Simplex von $\partial\Omega$ die baryzentrischen Koordinaten $(\alpha_1, \dots, \alpha_k)$ hat.

3. Anschließend wird das Kleinste-Quadrate-Problem 4.3 in folgendem überbestimmten Gleichungssystem $A \cdot \vec{U} = \vec{b}$ aufgeschrieben:

$$\begin{pmatrix} s_{x_1}(c_1) & \cdots & s_{x_N}(c_1) & c_1^T & 1 \\ s_{x_1}(c_2) & \cdots & s_{x_N}(c_2) & c_2^T & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ s_{x_1}(c_M) & \cdots & s_{x_N}(c_M) & c_M^T & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} U^1 \\ \vdots \\ U^N \\ w \\ w^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi(c_1) \\ \varphi(c_2) \\ \vdots \\ \varphi(c_M) \end{pmatrix} \tag{4.5}$$

Ein Vorteil bei der Verwendung einer Sampling-Matrix im vorherigen Schritt ergibt sich dadurch, dass die rechte Seite $\big(\varphi(c_1),\dots,\varphi(c_M)\big)$ für stückweise lineare φ (wie sie bei den harmonischen Koordinaten auftreten) durch $S\cdot\vec{\varphi}$ mit $\vec{\varphi}=\big(\varphi(v_1),\dots,\varphi(v_n)\big)^T$ gegeben ist.

Mittels einer QR-Zerlegung oder der Pseudoinversen A^+ von A kann dieses System numerisch stabil gelöst werden. Verwendet man die Pseudoinverse, so ergibt sich:

$$\vec{U}=A^+\cdot\vec{b}=A^+\cdot S\cdot\vec{\varphi}$$

Nun kann man die $(N+d+1)\times n$-Matrix $A':=A^+\cdot S$ in einem vorgeschalteten Schritt berechnen und dann für verschiedene rechte Seiten φ die Lösung über $\vec{U}=A'\cdot\vec{\varphi}$ in $O(N\cdot n)$ bestimmen. Im Falle der harmonischen Koordinaten (d. h. $\vec{\varphi}$ hat genau einen Eintrag mit 1, alle anderen verschwinden) reduziert sich dies sogar auf $O(N)$.

4. Nun kann U an einer beliebigen Stelle $x\in\overline{\Omega}$ über die Darstellung (4.2) ausgewertet werden.

4.2 Komplexe Randelement-Methode

Die komplexe Randelement-Methode (*Complex Variable Boundary Element Method*, CVBEM) nach [HL87] macht sich die Cauchy-Integralformel (nach AUGUSTIN LOUIS CAUCHY, 1789–1857) zunutze, um die Suche nach einer harmonischen Funktion in eine Integralgleichung auf dem Rand umzuwandeln. Jede harmonische Funktion auf $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ist Realteil einer holomorphen Funktion auf Ω.

Das Ziel der CVBEM ist es, eine komplexwertige Funktion u auf $\partial\Omega$ zu finden, so dass der Realteil der über die Cauchy-Transformation induzierten Funktion U möglichst gut die gewünschten Randwerte φ annimmt.

4.2.1 Theoretische Grundlagen

Funktionentheorie Zunächst werden einige Grundlagen der Funktionentheorie aus [AF03] zitiert. Sei dafür stets Ω eine einfach zusammenhängende Teilmenge von $\mathbb{C}$.

Ω: einfach zusammenhängende Teilmenge von $\mathbb{C}$

F, G: Funktionen $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$; Real- und Imaginärteil

Definition 4.2 (Holomorphe Funktion) Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ und $V\colon \Omega \to \mathbb{C}$ eine komplexwertige Funktion. Seien $F := \mathrm{Re}(V)$ und $G := \mathrm{Im}(V)$ Real- bzw. Imaginärteil von V, allerdings aufgefasst als Funktionen zweier reeller Variablen, d. h.

$$V(z) = V(x + \mathrm{i} \cdot y) = F(x, y) + \mathrm{i} \cdot G(x, y)$$

V heißt *holomorph* (oder *analytisch*) auf Ω, falls F und G stetig differenzierbar sind und

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial G}{\partial y}, \qquad \frac{\partial F}{\partial y} = -\frac{\partial G}{\partial x} \tag{4.6}$$

gilt. Der Raum aller holomorphen Funktionen auf Ω wird mit $\mathrm{Hol}(\Omega)$, der Raum $\mathrm{Hol}(\Omega) \cap C(\overline{\Omega}, \mathbb{C})$ mit $\mathrm{Hol}(\overline{\Omega})$ bezeichnet.

$C(X, \mathbb{C})$: stetige Funktionen $X \to \mathbb{C}$
$\mathrm{Hol}(\Omega)$: holomorphe Funktionen auf $\Omega \subset \mathbb{C}$
$\mathrm{Hol}(\overline{\Omega})$: holomorphe Funktionen auf $\Omega \subset \mathbb{C}$, die auf $\overline{\Omega}$ stetig sind

Die beiden Gleichungen in 4.6 heißen *Cauchy-Riemann-Differentialgleichungen*. Eine direkte Folgerung dieser Differentialgleichungen ist, dass F und G auf Ω harmonische Funktionen sind, deren Gradienten senkrecht aufeinander stehen.

Satz 4.3 (Harmonisch konjugierte Funktion [FB06, Theorem C1]) Sei Ω einfach zusammenhängend und $F\colon \Omega \to \mathbb{R}$ eine harmonische Funktion. Dann gibt es eine auf Ω holomorphe Funktion V mit $\mathrm{Re}(V) = F$. Anders gesprochen gibt es eine zu F *harmonisch konjugierte Funktion* $G\colon \Omega \to \mathbb{R}$ so, dass F und G die Cauchy-Riemann-Differentialgleichungen erfüllen. G ist bis auf einen konstanten Summanden eindeutig bestimmt.

Im Folgenden werden komplexwertige Funktionen häufig entlang von Kurven integriert; insbesondere solchen Kurven, die den Rand von Ω parametrisieren. Die Notation dazu wurde in Bemerkung 2.2 auf Seite 12 festgelegt.

Satz 4.4 (Cauchy-Integralformel [AF03, Theorem 2.6.1]) Sei Ω einfach zusammenhängend, $V \in \mathrm{Hol}(\overline{\Omega})$ mit $v = V_{|\partial\Omega}$ und $a \in \Omega$, dann gilt:

$$V(a) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(z)}{z-a} \, \mathrm{d}z$$

Cauchy-Transformation Die Cauchy-Integralformel als eines der wichtigsten Resultate der Funktionentheorie ist insofern vergleichbar mit dem Green'schen Darstellungssatz (Satz 2.8), als dass auch hier eine Funktion nur durch ihre Randdaten eindeutig bestimmt ist. Ähnlich wie im Green'schen Darstellungssatz kann jedoch nicht erwartet werden, dass das Einsetzen beliebiger Randwerte in die Cauchy-Integralformel zu einer holomorphen Funktion auf Ω mit diesen Randwerten führt.[19] Man kann jedoch durchaus eine Funktion $v\colon \partial\Omega \to \mathbb{C}$ in die Integralformel einsetzen und Existenz und Eigenschaften der resultierenden Funktion untersuchen. Dies motiviert die Definition eines entsprechenden Operators:

Definition 4.5 (Cauchy-Transformation) Sei $v \in C(\partial\Omega, \mathbb{C})$, dann heißt der Operator $\mathscr{C}$, definiert durch

$$\mathscr{C}v\colon \Omega \to \mathbb{C}, \quad a \mapsto \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(z)}{z-a} \, \mathrm{d}z \tag{4.7}$$

die *Cauchy-Transformation* von v.

v: komplexwertige, stetige Funktion auf $\partial\Omega$
$\mathscr{C}$: Cauchy-Transformation

Die Cauchy-Integralformel lässt sich nun unter Verwendung der Cauchy-Transformation wie folgt umformulieren:

Satz 4.6 (Cauchy-Integralformel, alternative Version) Sei Ω einfach zusammenhängend, $V \in \mathrm{Hol}(\overline{\Omega})$, $v := V_{|\partial\Omega}$ und $a \in \Omega$. Dann gilt: $V(a) = \mathscr{C}v(a)$.

Für eine Randfunktion v, die als Randwert einer holomorphen Funktion auftritt, rekonstruiert $\mathscr{C}$ also diese Funktion im Innern. Für eine Randfunktion, die nicht der Randwert einer holomorphen Funktion ist, ist dies offensichtlich nicht der Fall. Es gilt allerdings das folgende bemerkenswerte Resultat:

Satz 4.7 (Bild der Cauchy-Transformation [HL87, Theorem, S. 177]) Sei $v\colon \partial\Omega \to \mathbb{C}$ eine stetige Funktion. Dann ist $\mathscr{C}v$ holomorph auf Ω.

Man kann $\mathscr{C}$ also auf eine beliebige (!) stetige Funktion v anwenden und erhält eine auf Ω holomorphe Funktion; insbesondere ist der Realteil dieser Funktion harmonisch.

[19] Im Allgemeinen existiert für eine beliebige stetige Randfunktion v – im Gegensatz zum klassischen Dirichlet-Problem – auch keine holomorphe Funktion V mit diesen Randwerten. Dies liegt darin begründet, dass eine holomorphe Funktion V aus *zwei* harmonischen Funktionen F und G besteht, die einerseits durch die Randwerte, andererseits aber auch durch die jeweils andere Funktion schon eindeutig bestimmt sind. Somit kann man nur erwarten, ein V zu erhalten, dass entweder einen auf dem Rand vorgegebenen Real- oder Imaginärteil annimmt, aber nicht beides.

Lösung des Dirichlet-Problems Nun kann der zentrale Satz formuliert werden, der die Grundlage der CVBEM darstellt.

Satz 4.8 (Lösung des Dirichlet-Problems mittels CVBEM) Sei $\varphi \in C(\partial\Omega, \mathbb{R})$ eine reellwertige Funktion auf $\partial\Omega$. Dann gibt es eine Funktion $u\colon \partial\Omega \to \mathbb{C}$, so dass $\mathrm{Re}(\mathscr{C} u)\colon \Omega \to \mathbb{R}$ das Dirichlet-Problem zum Randwert φ löst.

Beweis: Konstruktion von u.

P.1 Sei $F\colon \Omega \to \mathbb{R}$ die Lösung des Dirichlet-Problems zum Randwert φ. In einem Polygon gibt es genau eine solche Funktion (Satz 2.5 & Korollar 2.4).

P.2 Nach Satz 4.3 gibt es eine holomorphe Funktion $U\colon \Omega \to \mathbb{C}$ mit $\mathrm{Re}(U) = F$. Der Randwert $u := U_{|\partial\Omega}$ ist die im Satz angegebene Funktion, denn $\mathrm{Re}(\mathscr{C} u) = \mathrm{Re}(U) = F$ ist harmonisch und löst das Dirichlet-Problem zum Randwert φ. □

Die aus Satz 4.8 entwickelbare „glatte“ Formulierung der CVBEM lautet:

Problem 4.1: Gegeben $\varphi\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$, finde ein $u\colon \partial\Omega \to \mathbb{C}$, so dass

$$\mathrm{Re}(\mathscr{C} u)_{|\partial\Omega} = \varphi$$

Aus dem Beweis von Satz 4.8 folgt die eindeutige Lösbarkeit von Problem 4.1

4.2.2 Diskretisierung

Die diskrete Formulierung von Problem 4.1 lautet:

Problem 4.2: Gegeben $\varphi\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$, finde in einem endlich-dimensionalen Funktionenraum $S^h \subset L^2(\partial\Omega, \mathbb{C})$ ein $u\colon \partial\Omega \to \mathbb{C}$, so dass

$$\left\| \mathrm{Re}(\mathscr{C} u)_{|\partial\Omega} - \varphi \right\|_{L^2(\partial\Omega, \mathbb{C})} \tag{4.8}$$

minimal wird.

In diesem Abschnitt soll hergeleitet werden, wie man ein solches u findet.

Integralfreie Darstellung der Cauchy-Transformation Sei Ω polygonal berandet mit Ecken $v_1, \dots, v_n$, formell $v_{n+1} := v_1$ und sei jede Kante (v_i, v_{i+1}) durch die Funktion $\gamma_i \colon [0,1] \to \mathbb{C}$, $\gamma_i(t) = v_i + t \cdot (v_{i+1} - v_i)$ parametrisiert. Dann kann man die Cauchy-Transformation einer Funktion v wie folgt umschreiben:

γ_i: Parametrisierung der Kante (v_i, v_{i+1}) über $[0,1]$

$$\begin{aligned}
\mathscr{C} v(a) &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(z)}{z-a} \,\mathrm{d}z \\
&= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \sum_{i=1}^{n} \int_0^1 \frac{v(\gamma_i(t)) \cdot (v_{i+1} - v_i)}{\gamma_i(t) - a} \,\mathrm{d}t \\
&= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \sum_{i=1}^{n} \int_0^1 \frac{v(\gamma_i(t))}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Sei S^h ein endlich-dimensionaler Unterraum von $L^2(\partial\Omega, \mathbb{C})$ und $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ eine Basis von S^h. (Die Cauchy-Transformierten der λ_i spannen dann einen N-dimensionalen Unterraum von $\mathrm{Hol}(\Omega)$ auf.) Schränkt man den Raum S^h auf die Kante (v_i, v_{i+1}) ein und zieht die dort nicht-verschwindenden Basisfunktionen mittels ${\gamma_i}^{-1}$ auf das Referenzintervall $[0,1]$ zurück, erhält man dort eine lokale Basis $\{\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_{N_i}\}$.

N: Dimension von S^h
$\{\lambda_1, \dots, \lambda\}$ N: Basis von S^h

N_i: Dimension des auf die i-ten Kante eingeschränkten Raumes
$\{\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_{N_i}\}$: Basis von Funktionen auf i-ter Kante

Dann lässt sich v auf der i-ten Kante des Polygons approximativ als

$$v(\gamma_i(t)) \approx \sum_{j=1}^{N} v_j^i \cdot \hat{\lambda}_j(t)$$

schreiben. Setzt man diese Darstellung in (4.9) ein, erhält man nach Umformung:

v_j^i: Basiskoeffizient von $\hat{\lambda}_j$ auf i-ter Kante

$$\mathscr{C} v(a) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{N_i} v_j^i \cdot \int_0^1 \frac{\hat{\lambda}_j(t)}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t \tag{4.10}$$

Wählt man für die $\hat{\lambda}_j$ eine polynomielle Basis, kann man jedes $\hat{\lambda}_j$ als Summe von Monomen schreiben. Für die sich ergebenden Integrale in (4.10) sind in [HG84] entsprechende Stammfunktionen angegeben:

$$\begin{aligned}
\int \frac{1}{t+X} \,\mathrm{d}t &= \ln(t+X) \\
\int \frac{t}{t+X} \,\mathrm{d}t &= t - X \cdot \ln(t+X) \\
\int \frac{t^2}{t+X} \,\mathrm{d}t &= \frac{1}{2} \cdot t^2 - t \cdot X + X^2 \cdot \ln(t+X) \\
&\vdots \\
\int \frac{t^k}{t+X} \,\mathrm{d}t &= \sum_{i=0}^{k-1} \frac{(-X)^i \cdot t^{k-i}}{k-i} + (-X)^k \cdot \ln(t+X)
\end{aligned}$$

Dies kann man nun nutzen, um für einen Raum von auf jeder Kante polynomiellen Funktionen die Cauchy-Transformation zu berechnen, ohne dabei auf Quadraturformeln zurückgreifen zu müssen.

Beispiel 4.9 (Cauchy-Koordinaten) Sei S^h der Raum der stetigen, auf jeder Kante von $\partial\Omega$ linear verlaufenden Funktionen mit der Basis $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ der Hütchenfunktionen, also $\hat{\lambda}_i(v_j) = \delta_{ij}$. Dann ist auf jeder Kante $N_i = 2$ mit $\hat{\lambda}_1(t) = 1 - t$ und $\hat{\lambda}_2(t) = t$, aber wegen der Stetigkeit über Ecken hinweg gilt $v_1^i = v_2^{i-1} =: v^i$. Damit kann man (4.10) wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned}
\mathscr{C}v(a) &= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{2} (v_j^i \cdot \int_0^1 \frac{\hat{\lambda}_j(t)}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t) \\
&= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} v_1^i \cdot \int_0^1 \frac{1-t}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t + v_2^i \cdot \int_0^1 \frac{t}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t \right) \\
&= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} v^i \cdot \int_0^1 \frac{1-t}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t + v^i \cdot \int_0^1 \frac{t}{t + \frac{v_{i-1} - a}{v_{i-1+1} - v_{i-1}}} \,\mathrm{d}t \right) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \frac{v^i}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \int_0^1 \frac{1-t}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} + \frac{t}{t + \frac{v_{i-1} - a}{v_{i-1+1} - v_{i-1}}} \,\mathrm{d}t
\end{aligned}$$

Mit den oben angegebenen Formeln für die Integration lassen sich die Integrale geschlossen darstellen und man erhält eine Darstellung der Form

$$\mathscr{C}v(a) = \sum_{i=1}^{n} C_i(a) \cdot v^i,$$

wobei die Werte $C_i(a)$ nur von v_{i-1}, v_i, v_{i+1} und a abhängen. Die Funktionen $C_i : \Omega \to \mathbb{C}$ werden in [WBCG09] als *Cauchy-Koordinaten* bezeichnet. Sie werden dort für die konforme Deformation planarer Formen verwendet. Die auf Seite 8 gezeigte konforme Deformation wurde mit einer vom Autor in JAVAVIEW implementierten Version dieser Koordinaten produziert.

Beispiel 4.10 (Verallgemeinerte Cauchy-Koordinaten) Sei S^h der Raum der Funktionen auf $\partial\Omega$, die auf jeder Kante quadratische Polynome sind, ohne dabei notwendigerweise an den Ecken von $\partial\Omega$ stetig sein zu müssen. Dann ist $N_1 = \dots = N_n = 3$, $N = 3 \cdot n$ und eine Basis auf jeder Kante durch die Lagrange-Polynome zu den Stützstellen 0, $\frac{1}{2}$ und 1 gegeben:

$$\begin{aligned}
\hat{\lambda}_1(t) &= \frac{t - \frac{1}{2}}{0 - \frac{1}{2}} \cdot \frac{t-1}{0-1} = 2 \cdot t^2 - 3 \cdot t + 1 \\
\hat{\lambda}_2(t) &= \frac{t - 0}{\frac{1}{2} - 0} \cdot \frac{t-1}{\frac{1}{2} - 1} = -4 \cdot t^2 + 4 \cdot t \\
\hat{\lambda}_3(t) &= \frac{t - 0}{1 - 0} \cdot \frac{t - \frac{1}{2}}{1 - \frac{1}{2}} = 2 \cdot t^2 - t
\end{aligned}$$

In dieser Basis erhält man dann, ähnlich wie im Beispiel 4.9, eine geschlossene

Darstellung der Cauchy-Transformation:

$$\begin{aligned}
\mathscr{C}v(a) &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{3} (v_j^i \cdot \int_0^1 \frac{\hat{\lambda}_j(t)}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t) \\
&= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} v_1^i \cdot \int_0^1 \frac{\hat{\lambda}_1(t)}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t + v_2^i \cdot \int_0^1 \frac{\hat{\lambda}_2(t)}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t + v_3^i \cdot \int_0^1 \frac{\hat{\lambda}_3(t)}{t + \frac{v_i - a}{v_{i+1} - v_i}} \,\mathrm{d}t \right) \\
&= \sum_{i=1}^{n} CV_i^+(a) \cdot v_1^i + CE_i(a) \cdot v_2^i + CV_{i+1}^-(a) \cdot v_3^i
\end{aligned}$$

Diese *verallgemeinerten Cauchy-Koordinaten* werden in [WG10] ebenfalls für die Berechnung konformer Deformationen verwendet. Die an den Ecken von $\partial\Omega$ erlaubten Unstetigkeitsstellen führen dabei zu einer größeren Klasse von Deformationen, insbesondere was das Randverhalten angeht.

Kleinste-Quadrate-Formulierung Als Diskretisierung des L^2-Abstands in Problem 4.2 kann eine Summe quadratischer Abstände verwendet werden. Da die Werte von $\mathscr{C}v$ in der Darstellung (4.10) auf Ω linear von den N Basiskoeffizienten v_j^i abhängen, führt dies zu einem linearen Kleinste-Quadrate-Problem.

M: Anzahl der Observationspunkte
$c_1, \ldots, c_M$: Observationspunkte

Angenommen, es seien an Observationspunkten $c_1, \ldots, c_M$ in Ω Funktionswerte $f(c_1), \ldots, f(c_M)$ gegeben, die von $\mathscr{C}v$ angenommen werden sollen, dann müssen die Basiskoeffizienten v_j^i so bestimmt werden, dass

$$\left\| \begin{pmatrix} \mathscr{C}v(c_1) \\ \vdots \\ \mathscr{C}v(c_M) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} f(c_1) \\ \vdots \\ f(c_M) \end{pmatrix} \right\| = \min \tag{4.11}$$

Um das Dirichlet-Problem wie beschrieben mit dieser Methode zu behandeln, müssen jedoch zwei Besonderheiten beachtet werden:

1. Die c_i befinden sich nicht in Ω, sondern auf $\partial\Omega$; $\mathscr{C}v$ ist jedoch nur auf Ω definiert.
2. Es wird nicht verlangt, dass $\mathscr{C}v$ die Randwerte annimmt (dafür gibt es ja im glatten Fall auch keine Lösung), sondern nur der Realteil von $\mathscr{C}v$.

Zunächst zum ersten Punkt: Satz 4.7 besagt zwar, dass $\mathscr{C}v$ für stetige v eine holomorphe Funktion in $a \in \Omega$ ist, macht aber keine Aussagen über eine Fortsetzbarkeit auf $\partial\Omega$. Der in der Cauchy-Transformation aus (4.7) bzw. (4.10) auftretende Integrand hat, wenn man ein $a \in \partial\Omega$ einsetzt, dort eine Singularität, ist also keine Riemann-integrierbare Funktion. Abhilfe schafft folgender Satz:

Satz 4.11 (Fortsetzbarkeit der Cauchy-Transformation [HL87, Kapitel 3, Theorem 11]) Für eine stetige Randfunktion v, die auf jeder Kante von $\partial\Omega$ ein Polynom k-ten Grades ist, gilt: $\mathscr{C}v$ kann stetig auf $\partial\Omega$ fortgesetzt werden, d. h. $\mathscr{C}v \in \mathrm{Hol}(\overline{\Omega})$.

Der Satz gibt keine Auskunft darüber, wie diese stetige Fortsetzung an einem Punkt $a \in \partial\Omega$ berechenbar ist. Für die in Beispiel 4.9 und Beispiel 4.10 vorgestellten Funktionen $C_i(z)$ bzw. $CE_i(z)$, $CV_i^-(z)$ und $CV_i^+(z)$ sind die Grenzwerte für $z \to a$ jedoch in den entsprechenden Artikeln [WBCG09] bzw. [WG10] im Anhang aufgeführt und werden in [HL87, S. 174ff.] für den allgemeinen Fall hergeleitet. Die *Plemelj-Formel* (4.21) in Abschnitt 4.4 ist eine Darstellung der Fortsetzung von $\mathscr{C}v$ auf $\partial\Omega$ in Integralform.

Nun zum zweiten Punkt: Seien $\left(v^1, \ldots, v^N\right)$ die Basiskoeffizienten von v bzgl. der S^h-Basis $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$. Zieht man die λ_i nicht wie in (4.10) auf die einzelnen Kanten zurück, kann man eine Darstellung von $\mathscr{C}v$ in der Form $\mathscr{C}v(a) = \sum_{i=1}^N D_i(a) \cdot v^i$ erhalten. Auf Ω sind die D_i dann durch $D_i(a) := \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{\lambda_i(z)}{z-a} \, \mathrm{d}z$ gegeben; auf $\partial\Omega$ sollen sie als die stetige Fortsetzung verstanden werden, d. h. $D_i(a) := \lim_{z \to a} D_i(z)$ für $a \in \partial\Omega$.

Dann lässt sich der Realteil der Cauchy-Transformation wie folgt ausdrücken:

$$\mathrm{Re}(\mathscr{C}v(a)) = \mathrm{Re}(\sum_{i=1}^N D_i(a) \cdot v^i) = \sum_{i=1}^N \mathrm{Re}(D_i(a)) \cdot \mathrm{Re}(v^i) - \mathrm{Im}(D_i(a)) \cdot \mathrm{Im}(v^i)$$

Damit lässt sich (4.11) in ein überbestimmtes Gleichungssystem mit $2 \cdot N$ reellwertigen Variablen $\left(\mathrm{Re}(v^1), \ldots, \mathrm{Re}(v^N), \mathrm{Im}(v^1), \ldots, \mathrm{Im}(v^N)\right)$ umformen.

4.2.3 Algorithmus

1. Zunächst muss ein N-dimensionaler Unterraum $S^h \subset L^2(\partial\Omega, \mathbb{C})$ festgelegt werden. Nach [WG10] ist es empfehlenswert, hier einen Raum von Funktionen zu verwenden, die an den Ecken von $\partial\Omega$ unstetig sind (vgl. Beispiel 4.10). Andernfalls können durch die Cauchy-Transformation keine holomorphen Funktionen induziert werden, die ein fast-singuläres Verhalten zeigen.

2. Sei $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$ eine Basis von S^h. Wenn S^h auch an den Ecken von $\partial\Omega$ unstetige Funktionen enthält, ist es naheliegend, sie so zu wählen, dass jede Basisfunktion nur auf einer einzigen Kante verschieden von 0 ist. In diesem Fall ist die Summe der einzelnen Freiheitsgrade N_i gerade N.

3. Es müssen, wie in der Methode der Fundamentallösungen, M Observationspunkte auf $\partial\Omega$ gewählt werden. Dies kann wieder durch Multiplikation des Eckenvektors $(v_1, \ldots, v_n)$ mit einer Sampling-Matrix wie in (4.4) erfolgen. Man beachte, dass es $2 \cdot N$ reelle Freiheitsgrade gibt, d. h. M muss mindestens genauso groß sein.

4. Nun kann das Minimierungsproblem (4.8) wie folgt als überbestimmtes Gleichungssys-

tem aufgeschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} \mathrm{Re}(D_1(c_1)) & -\mathrm{Im}(D_1(c_1)) & \cdots & \mathrm{Re}(D_N(c_1)) & -\mathrm{Im}(D_N(c_1)) \\ \mathrm{Re}(D_1(c_2)) & -\mathrm{Im}(D_1(c_2)) & \cdots & \mathrm{Re}(D_N(c_2)) & -\mathrm{Im}(D_N(c_2)) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \mathrm{Re}(D_1(c_M)) & -\mathrm{Im}(D_1(c_M)) & \cdots & \mathrm{Re}(D_N(c_M)) & -\mathrm{Im}(D_N(c_M)) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathrm{Re}(u^1) \\ \mathrm{Im}(u^1) \\ \vdots \\ \mathrm{Re}(u^N) \\ \mathrm{Im}(u^N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi(c_1) \\ \varphi(c_2) \\ \vdots \\ \varphi(c_M) \end{pmatrix}$$

Mittels einer QR-Zerlegung kann dieses (reellwertige) System numerisch stabil gelöst werden.

Analog zum für die MFS beschriebenen Vorgehen kann auch hier die Pseudoinverse berechnet und mit der Sampling-Matrix multipliziert werden, um für verschiedene rechte Seiten schneller eine Lösung zu finden.

5. Nun kann die Lösung $\mathrm{Re}(U)$ des Dirichlet-Problems zum Randwert φ an einer Stelle $a \in \overline{\Omega}$ über die Vorschrift

$$\mathrm{Re}(U(a)) = \sum_{i=1}^{N} \mathrm{Re}(D_i(a)) \cdot \mathrm{Re}(u^i) - \mathrm{Im}(D_i(a)) \cdot \mathrm{Im}(u^i)$$

ausgewertet werden.

4.3 Randelement-Methode

Die Randelement-Methode kann als Verallgemeinerung der CVBEM auf 1. höherdimensionale Gebiete und 2. eine größere Klasse von Differentialgleichungen verstanden werden. Über verschiedene Wege ist es möglich, eine partielle Differentialgleichung in Ω in eine Integralgleichung auf $\partial\Omega$ umzuschreiben, die dann dort numerisch gelöst wird. Dadurch wird insbesondere das zu diskretisierende Gebiet um eine Dimension kleiner. In [SS04] wird die Randelement-Methode ausführlich hergeleitet und analysiert; in [Rus08] wird beschrieben, wie man sie einsetzen kann, um harmonische Koordinaten für $d = 3$ zu berechnen.

4.3.1 Theoretische Grundlagen

Potentiale Zur Überführung der partiellen Differentialgleichung $\Delta U = 0$ auf Ω in eine Integralgleichung auf $\partial\Omega$ gibt es zwei verschiedene Herangehensweisen. Bei der *direkten Methode* werden die bekannten Dirichlet-Randdaten $u := U_{|\partial\Omega}$ in den Green'schen Darstellungssatz

$$U(a) = \int_{\partial\Omega} \gamma_a \cdot \frac{\partial u}{\partial \nu} - u \cdot \frac{\partial \gamma_a}{\partial \nu} \, \mathrm{d}\sigma_x$$

eingesetzt und nach der unbekannten Funktion $\frac{\partial u}{\partial \nu}$ gelöst. Die *indirekte Methode* basiert darauf, dass gewisse Integraloperatoren (fast) beliebige Randfunktionen auf harmonische Funktionen auf Ω abbilden. Es wird dann eine Funktion u gesucht, so dass die entstehende harmonische Funktion U die gegebenen Dirichlet-Randwerte φ annimmt. In diesem Abschnitt sollen die theoretischen Grundlagen für beide Methoden gelegt werden.

Definition 4.12 (Einfach-/Doppelschichtpotential) Sei s_a die Singularitätenfunktion um $a \in \Omega$ (Definition 2.6) und $v\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$. Die Funktion $\mathscr{E}v\colon \Omega \to \mathbb{R}$ mit

$$\mathscr{E}v(a) = \int_{\partial\Omega} s_a \cdot v \, \mathrm{d}\sigma_x \tag{4.12}$$

$\mathscr{E}v$: Einfachschichtpotential von v

heißt *Einfachschichtpotential* (ESP), die Funktion $\mathscr{D}v\colon \Omega \to \mathbb{R}$ mit

$$\mathscr{D}v(a) = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot v \, \mathrm{d}\sigma_x \tag{4.13}$$

$\mathscr{D}v$: Doppelschichtpotential von v

Doppelschichtpotential (DSP) von v.[20]

Diese Definition wurde nicht auf einen bestimmten Funktionenraum für v eingeschränkt. Eine zweckmäßige Beschränkung und eine entsprechende Regularitätsaussage liefert aber der folgende Satz:

Satz 4.13 (Abbildungseigenschaften der Potentiale [SS04, Proposition 3.4.1]) Sei $v \in H^{-1/2}(\partial\Omega)$ und $w \in H^{1/2}(\partial\Omega)$. Dann sind $\mathscr{E}v$ und $\mathscr{D}w$ in $H^1(\Omega)$.

[20] Die hier definierten Potentiale sind das Negative von den gleichnamigen Objekten in [SS04], da dort die Singularitätenfunktion s_a mit einem anderen Vorzeichen definiert wird.

Zusammenhang mit der Cauchy-Transformation Einfach- und Doppelschichtpotential haben nicht nur von Ihrer Erscheinung her eine gewisse Ähnlichkeit mit der Cauchy-Transformation, auch gewisse Eigenschaften sind ähnlich. Die Cauchy-Transformation transformiert eine beliebige stetige Randfunktion in eine auf Ω holomorphe Funktion (Satz 4.7). Für ESP und DSP gilt folgendes Analogon:

Satz 4.14 (Harmonizität ESP/DSP [SS04, Satz 3.1.1]) Sei $v \in L^1(\partial\Omega)$. Dann sind $\mathscr{E}v$ und $\mathscr{D}v$ in $\mathbb{R}^d \backslash \partial\Omega$ unendlich oft differenzierbar (insbesondere stetig) und auf ganz Ω gilt: $\Delta\mathscr{E}v = \Delta\mathscr{D}v = 0$.

Für $d = 2$ tritt die Verwandtschaft noch deutlicher zu Tage, wie folgender Satz zeigt:

Satz 4.15 (Verwandtschaft Cauchy-Transformation/Doppelschichtpotential) Für eine reellwertige Randfunktion v gilt $\operatorname{Re}(\mathscr{C}v) = -\mathscr{D}v$.

Beweis:

P.1 Für $d = 2$ hat die Singularitätenfunktion die Form $s_a(x) = -\frac{1}{2\pi} \cdot \ln(\|a - x\|)$ und damit den Gradienten

$$\nabla s_a(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{a - x}{\|a - x\|^2}$$

Für die Normalenableitung von s_a gilt per Definition $\frac{\partial s_a}{\partial \nu} = \langle \nabla s_a, \nu \rangle$. Sei $\partial\Omega$ durch eine geschlossene Kurve $\gamma\colon [0,1] \to \mathbb{R}^2$ im mathematisch positiven Sinn parametrisiert, so dass die Einheitsaußennormale ν durch $R \cdot \frac{\gamma'}{\|\gamma'\|}$ mit $R = \left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{smallmatrix}\right)$ gegeben ist, vgl. Abbildung 17. Sei weiter $\alpha = \sphericalangle\big(\gamma(t) - a, \gamma'(t)\big)$ mit $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}[$, dann ist $\alpha + \frac{\pi}{2} = \sphericalangle\big(\gamma(t) - a, R \cdot \gamma'(t)\big)$ und es gilt:

$$\begin{aligned}\langle a - \gamma(t), R \cdot \gamma'(t) \rangle &= -\langle \gamma(t) - a, R \cdot \gamma'(t) \rangle \\ &= -\big\|\gamma(t) - a\big\| \cdot \big\|(R \cdot \gamma'(t))\big\| \cdot \cos(\alpha + \frac{\pi}{2}) = -\big\|\gamma(t) - a\big\| \cdot \big\|\gamma'(t)\big\| \cdot \cos(\alpha + \frac{\pi}{2})\end{aligned}$$

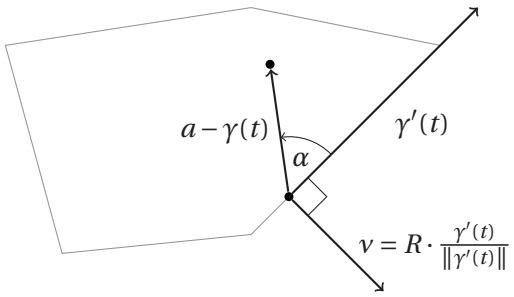


Abbildung 17: Bezeichnungen zum Beweis von Satz 4.15

Setzt man dies alles in die Formel für das Doppelschichtpotential ein, erhält man:

$$\begin{aligned}
\mathscr{D}v(a) &= \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot v \,\mathrm{d}\sigma_x \\
&= \int_0^1 \langle \nabla s_a(\gamma(t)), (R \cdot \frac{\gamma'(t)}{\|\gamma'(t)\|}) \rangle \cdot v(\gamma(t)) \cdot \|\gamma'(t)\| \,\mathrm{d}t \\
&= \int_0^1 \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{\|a-\gamma(t)\|^2} \cdot \langle a-\gamma(t), (R \cdot \gamma'(t)) \rangle \cdot v(\gamma(t)) \,\mathrm{d}t \\
&= -\int_0^1 \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{\|a-\gamma(t)\|^2} \cdot \|\gamma(t)-a\| \cdot \|\gamma'(t)\| \cdot \cos(\alpha + \frac{\pi}{2}) \cdot v(\gamma(t)) \,\mathrm{d}t \\
&= \frac{1}{2\pi} \cdot \int_0^1 \frac{\|\gamma'(t)\|}{\|a-\gamma(t)\|} \cdot \sin\alpha \cdot v(\gamma(t)) \,\mathrm{d}t
\end{aligned}$$

P.2 Die Cauchy-Transformation kann man nun ähnlich umschreiben. Es sei also γ wie oben, nur mit Bild in $\mathbb{C}$. α sei wie oben, d. h. insbesondere, dass

$$\frac{\gamma'(t)}{\gamma(t)-a} = \frac{|\gamma'(t)|}{|\gamma(t)-a|} \cdot (\cos\alpha - i \cdot \sin\alpha),$$

denn durch die Orientierung von γ ist $\arg \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t)-a} = -\alpha$.
Setzt man dies nun in die Formal für die Cauchy-Transformation ein, erhält man:

$$\begin{aligned}
\mathscr{C}v(a) &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(z)}{z-a} \,\mathrm{d}z \\
&= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \int_0^1 \frac{v(\gamma(t))}{\gamma(t)-a} \cdot \gamma'(t) \,\mathrm{d}t \\
&= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \int_0^1 (\frac{|\gamma'(t)|}{|\gamma(t)-a|} \cdot (\cos\alpha - i \cdot \sin\alpha) \cdot v(\gamma(t))) \,\mathrm{d}t
\end{aligned}$$

Dies bedeutet gerade, dass für v reellwertig gilt:

$$\mathrm{Re}(\mathscr{C}v(a)) = -\frac{1}{2\pi} \cdot \int_0^1 \frac{|\gamma'(t)|}{|\gamma(t)-a|} \cdot \sin\alpha \cdot v(\gamma(t)) \,\mathrm{d}t$$

Dies ist identisch mit dem Negativen der für das Doppelschichtpotential ermittelten Darstellung. □

Eine Folgerung aus diesem Satz ist, dass wenn es eine reellwertige Funktion v gibt, so dass $\mathscr{D}v$ das Dirichlet-Problem zur Randfunktion φ löst, dann löst auch $-\mathrm{Re}(\mathscr{C}v)$ dieses Problem. Die Existenz eines solchen v vorausgesetzt, liefert dies einen alternativen Beweis für Satz 4.8.

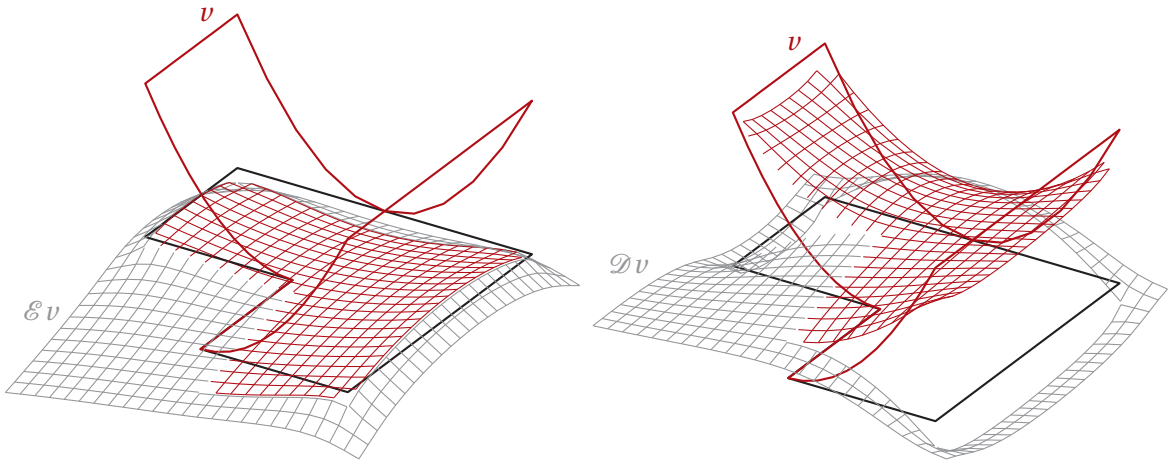
Randverhalten der Potentiale Ähnlich wie in der CVBEM sind die Funktionen $\mathscr{E}v$ und $\mathscr{D}v$ nur auf Ω definiert und nicht auf dem Rand, weil s_a und ∇s_a für $a \in \Omega$ singulär auf $\partial\Omega$ sind. Um eine Funktion v zu bestimmen, so dass $\mathscr{E}v$ bzw. $\mathscr{D}v$ am Rand bestimmte Eigenschaften haben, muss erst das Randverhalten dieser Potentiale geklärt werden.

Aus Abschnitt 2.3 sind die Spuroperatoren $\mathrm{tr}_{\nearrow}$ und $\mathrm{tr}_{\swarrow}$ auf $H^1(\Omega)$ bekannt. Analog können auf $H^1(\Omega)$ *Normalenspuroperatoren* $\mathrm{ntr}_{\nearrow}$ und $\mathrm{ntr}_{\swarrow}$ eingeführt werden, die für alle differenzierbaren Funktionen in $H^1(\Omega)$ mit der Ableitung in äußerer bzw. innerer Normalenrichtung übereinstimmen. In [SS04, Satz 3.3.1] werden für das Randverhalten (also Spur und Normalenspur) der Potentiale folgende Aussagen getroffen:

$\mathrm{ntr}_{\nearrow}$: innerer Normalenspuroperator
$\mathrm{ntr}_{\swarrow}$: äußerer Normalenspuroperator

- $\mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{E}v) = \mathrm{tr}_{\swarrow}(\mathscr{E}v) =: \mathrm{tr}(\mathscr{E}v)$
- $\mathrm{ntr}_{\nearrow}(\mathscr{E}v) - \mathrm{ntr}_{\swarrow}(\mathscr{E}v) = v$ – d. h. die Normalenableitung von $\mathscr{E}v$ springt auf $\partial\Omega$
- $\mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}v) - \mathrm{tr}_{\swarrow}(\mathscr{D}v) = v$ – d. h. $\mathscr{D}v$ springt auf $\partial\Omega$
- $\mathrm{ntr}_{\nearrow}(\mathscr{D}v) = \mathrm{ntr}_{\swarrow}(\mathscr{D}v) =: \mathrm{ntr}(\mathscr{D}v)$

Die Grafiken in Abbildung 18 visualisieren dieses Randverhalten.



(a): Einfachschichtpotential: $\mathscr{E}v$ ist stetig auf $\partial\Omega$, aber die Normalenableitung springt

(b): Doppelschichtpotential: $\mathscr{D}v$ springt, aber die Normalenableitung ist stetig

Abbildung 18: Randverhalten der Potentiale

Aus den Grenzwerten dieser Potentiale am Rand lassen sich nun Operatoren auf $H^{-1/2}(\partial\Omega)$ bzw. $H^{1/2}(\partial\Omega)$ definieren:

V: Operator $v \mapsto \mathrm{tr}(\mathscr{E}v)$
$K_{\nearrow}$: Operator $v \mapsto \mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}v)$
$K_{\swarrow}$: Operator $v \mapsto \mathrm{tr}_{\swarrow}(\mathscr{D}v)$

$$
\begin{aligned}
V &: H^{-1/2}(\partial\Omega) \to H^{1/2}(\partial\Omega), && v \mapsto \mathrm{tr}(\mathscr{E}v)\\
K'_{\nearrow} &: H^{-1/2}(\partial\Omega) \to H^{-1/2}(\partial\Omega), && v \mapsto \mathrm{ntr}_{\nearrow}(\mathscr{E}v)\\
K'_{\swarrow} &: H^{-1/2}(\partial\Omega) \to H^{-1/2}(\partial\Omega), && v \mapsto \mathrm{ntr}_{\swarrow}(\mathscr{E}v)\\
K_{\nearrow} &: H^{1/2}(\partial\Omega) \to H^{1/2}(\partial\Omega), && v \mapsto \mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}v)\\
K_{\swarrow} &: H^{1/2}(\partial\Omega) \to H^{1/2}(\partial\Omega), && v \mapsto \mathrm{tr}_{\swarrow}(\mathscr{D}v)\\
W &: H^{1/2}(\partial\Omega) \to H^{-1/2}(\partial\Omega), && v \mapsto -\mathrm{ntr}(\mathscr{D}v)
\end{aligned}
$$

Die angegebenen Bildräume werden im Beweis zu [SS04, Satz 3.1.16] gezeigt. Eine konkrete Methode, diese Operatoren zu berechnen, wurde noch nicht genannt.

Beim Einfachschichtpotential ist der Fall einfach: Man kann $\mathscr{E}v$ zu einer stetigen Funktion auf ganz $\mathbb{R}^d$ fortsetzen. Der Grenzwert auf $\partial\Omega$ ist der Wert des uneigentlichen Integrals $\int_{\partial\Omega} s_a \cdot v \,\mathrm{d}\sigma_x$, das für alle $a \in \mathbb{R}^d$ existiert. [SS04, Satz 3.3.5].

Beim Doppelschichtpotential ist im Fall der Berechnung harmonischer Koordinaten nur der innere Grenzwert $K_{\nearrow}v = \mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}v)$ interessant.[21] Hier gestaltet sich der Fall wie folgt: Für einen stückweise C^2-glatten Rand und $v \in L^\infty(\partial\Omega)$ existiert auch $\int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot v \,\mathrm{d}\sigma_x$ als uneigentliches Integral für $a \in \partial\Omega$, daher lässt sich in sinnvoller Weise ein weiterer Operator

K: Operator $v \mapsto \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot v \,\mathrm{d}\sigma_x$

$$K\colon v \mapsto \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot v \,\mathrm{d}\sigma_x$$

definieren, der $L^\infty(\partial\Omega)$ stetig auf $L^\infty(\partial\Omega)$ abbildet [SS04, Lemma 3.3.8]. Allerdings gilt nicht wie beim Einfachschichtpotential $K(v) = K_{\nearrow}(v)$, sondern [SS04, Korollar 3.3.14]:

$$\mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}v) = K_{\nearrow}(v) = K(v) - \frac{1}{2} \cdot v \qquad \mathrm{tr}_{\swarrow}(\mathscr{D}v) = K_{\swarrow}(v) = K(v) + \frac{1}{2} \cdot v \tag{4.14}$$

Vorausgesetzt, dass man die singulären Integrale $V(v)$ und $K(v)$ berechnen kann, können also auch die Spuren von $\mathscr{E}v$ und $\mathscr{D}v$ berechnet werden. Da dies eine eigene Herausforderung darstellt, ist der Berechnung dieser Integrale ein Kapitel im Anhang C gewidmet.

u: gesuchte Dichtefunktion

Indirekte Methode Ganz analog zur CVBEM ist das Ziel bei der indirekten Methode, eine *Dichtefunktion* u zu finden, so dass entweder $\mathscr{E}u$ (Einfachschichtformulierung) oder $\mathscr{D}u$ (Doppelschichtformulierung) die vorgegebenen Dirichlet-Randwerte φ annimmt, d. h. es soll u mit

$$\mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{E}u)(a) = \int_{\partial\Omega} s_a \cdot u \,\mathrm{d}\sigma_x = \varphi(a) \quad \text{bzw.} \quad \mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}u)(a) = -\frac{1}{2} \cdot u(a) + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot u \,\mathrm{d}\sigma_x = \varphi(a)$$

für alle $a \in \partial\Omega$ gefunden werden.[22] Im diskretisierten Fall kann man nur erwarten, in einem endlichdimensionalen Unterraum eine Funktion u zu finden, die den Abstand $\|\mathrm{tr}(\mathscr{E}u) - \varphi\|$ bzw. $\|\mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}u) - \varphi\|$ in einer gewissen Norm minimiert.

Direkte Methode Der Green'sche Darstellungssatz besagt, dass für eine harmonische Funktion $U\colon \overline{\Omega} \to \mathbb{R}$ die Gleichung

$$U = \mathscr{E}(\mathrm{ntr}_{\nearrow}(U)) - \mathscr{D}(\mathrm{tr}_{\nearrow}(U)) \tag{4.15}$$

[21] In der Tat ermöglicht die Randelementmethode die Lösung des Dirichlet-Problems auch auf dem Außenraum $\mathbb{R}^d \setminus \overline{\Omega}$. In [Rus08] wird dies für die Geometriedeformation genutzt, damit nur der relevante Teil der Geometrie von einem Deformationskäfig umgeben sein muss.

[22] Dabei handelt es sich um *Fredholm'sche Integralgleichungen* 1. bzw. 2. Art (nach ERIK IVAR FREDHOLM, 1866–1927).

in Ω gilt (Satz 2.8). Wendet man den Spuroperator $\mathrm{tr}_{\nearrow}$ auf diese Gleichung an, so erhält man

$$\mathrm{tr}_{\nearrow}(U) = V(\mathrm{ntr}_{\nearrow}(U)) - (K - \frac{1}{2} \cdot \mathrm{Id})(\mathrm{tr}_{\nearrow}(U))$$

Die Werte $\mathrm{tr}_{\nearrow}(U)$ der gesuchten Lösung U sind bekannt: Hierbei handelt es sich gerade um die vorgegebenen Dirichlet-Randwerte φ. Die Neumann-Randwerte $u := \mathrm{ntr}_{\nearrow}(U)$ sind demnach die Unbekannten. [23]

4.3.2 Diskretisierung

Variationsformulierung In [SS04] liegt der Fokus auf Galerkin-Methoden, d. h. sowohl direkte als auch indirekte Methode werden über eine Variationsformulierung beschrieben. Zunächst für die indirekte Methode:

Problem 4.3 (Indirekte Variationsformulierung (ESP))
Sei $\varphi \in H^{1/2}(\partial\Omega)$ gegeben. Finde $u \in H^{-1/2}(\partial\Omega)$ mit

$$\forall\, v \in H^{-1/2}(\partial\Omega) : \langle V(u), v\rangle_{L^2(\partial\Omega)} = \langle \varphi, v\rangle_{L^2(\partial\Omega)} \tag{4.16}$$

Nach [SS04, Satz 3.5.3] ist $b_V(u,v) := \langle V(u), v\rangle_{L^2(\partial\Omega)}$ elliptisch, die eindeutige Lösbarkeit von Problem 4.3 also eine Konsequenz des Satzes von Lax-Milgram (Satz 2.13).

$b_V(u,v)$: $\langle V(u), v\rangle$

Problem 4.4 (Indirekte Variationsformulierung (DSP))
Sei $\varphi \in H^{1/2}(\partial\Omega)$ gegeben. Finde $u \in H^{1/2}(\partial\Omega)$ mit

$$\forall\, v \in H^{-1/2}(\partial\Omega) : \langle K(u), v\rangle_{L^2(\partial\Omega)} - \frac{1}{2} \cdot \langle u, \eta\rangle_{L^2(\partial\Omega)} = \langle \varphi, v\rangle_{L^2(\partial\Omega)} \tag{4.17}$$

Nach [SS04, Satz 3.8.7] ist auch $b_K(u,v) := \langle K(u), v\rangle_{L^2(\partial\Omega)} - \frac{1}{2} \cdot \langle u, v\rangle_{L^2(\partial\Omega)}$ elliptisch, also auch Problem 4.4 eindeutig lösbar.

$b_K(u,v)$: $\langle K(u), v\rangle - \frac{1}{2} \cdot \langle u, v\rangle$

In der direkten Methode hat die Variationsformulierung folgende Form:

Problem 4.5 (Direkte Variationsformulierung)
Sei $\varphi \in H^{1/2}(\partial\Omega)$ gegeben. Finde $u \in H^{-1/2}(\partial\Omega)$ mit

$$\forall\, v \in H^{-1/2}(\partial\Omega) : \langle V(u), v\rangle_{L^2(\partial\Omega)} = \frac{1}{2} \cdot \langle \varphi, v\rangle_{L^2(\partial\Omega)} + \langle K(\varphi), v\rangle_{L^2(\partial\Omega)} \tag{4.18}$$

Die linke Seite ist dabei identisch mit der linken Seite von Problem 4.3, also ist auch Problem 4.5 eindeutig lösbar.

[23] Alternativ könnte man auch den Operator $\mathrm{ntr}_{\nearrow}$ auf (4.15) anwenden und erhielte dann eine Formulierung unter Verwendung der Operatoren $K'_{\nearrow}$ und W.

Kollokationsmethode In der indirekten Methode wäre eine Alternative zum Galerkin-Verfahren, wie in der CVBEM eine Menge von Observationspunkten $\{c_i\}$ auf $\partial\Omega$ zu wählen und die Methode der kleinsten Quadrate anzuwenden, so dass

$$\sum_{i=1}^{N} \left\| V(u)(c_i) - \varphi(c_i) \right\| \quad \text{bzw.} \quad \sum_{i=1}^{N} \left\| K(u)(c_i) - \tfrac{1}{2} \cdot u(c_i) - \varphi(c_i) \right\|$$

$c_1, \ldots, c_N$: Kollokationspunkte

minimiert wird.

Wählt man wie in [Rus08] die Anzahl solcher Punkte gleich der Anzahl der Freiheitsgrade N, so erhält man eine Kollokationsmethode, bei der für alle c_i die Gleichheit $\operatorname{tr}_{\nearrow}(\mathscr{E}u)(c_i) = u(c_i)$ bzw. $\operatorname{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}u)(c_i) = u(c_i)$ gilt.

Problem 4.6 (Indirekte Kollokationsformulierung (ESP))
Sei $\varphi\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$ gegeben. Seien $\{c_1, \ldots, c_N\}$ eine Menge von Kollokationspunkten auf $\partial\Omega$ und S^h ein endlich-dimensionaler Unterraum von $H^{-1/2}(\partial\Omega)$. Finde $u \in S^h$ mit

$$\forall\, i = 1, \ldots, N : V(u)(c_i) = \varphi(c_i)$$

Problem 4.7 (Indirekte Kollokationsformulierung (DSP))
Sei $\varphi\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$ gegeben. Seien $\{c_1, \ldots, c_N\}$ eine Menge von Kollokationspunkten auf $\partial\Omega$ und S^h ein endlich-dimensionaler Unterraum von $H^{1/2}(\partial\Omega)$. Finde $u \in S^h$ mit

$$\forall\, i = 1, \ldots, N : K(u)(c_i) - \tfrac{1}{2} \cdot u(c_i) = \varphi(c_i) \tag{4.19}$$

Dieses Verfahren kann man auch für die direkte Methode anwenden und erhält dann:

Problem 4.8 (Direkte Kollokationsformulierung)
Sei $\varphi\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$ gegeben. Seien $\{c_1, \ldots, c_N\}$ eine Menge von Kollokationspunkten auf $\partial\Omega$ und S^h ein endlich-dimensionaler Unterraum von $H^{-1/2}(\partial\Omega)$. Finde $u \in S^h$ mit

$$\forall\, i = 1, \ldots, N : V(u)(c_i) = \tfrac{1}{2} \cdot \varphi(c_i) + K(\varphi)(c_i)$$

Die berechnete Lösung u ist gerade die Normalenableitung der eigentlich gesuchten Lösung U des Dirichlet-Problems. Um U an einer Stelle $a \in \Omega$ auszuwerten, müssen die vorgegebenen Dirichlet-Randwerte φ und die berechneten Neumann-Randwerte u in die Green'sche Darstellungsformel eingesetzt werden.

Vergleich der Methoden Vor einer konkreten numerischen Umsetzung muss entschieden werden, ob man den direkten oder den indirekten Ansatz wählt, und ob man die Kollokationsmethode oder das Galerkin-Verfahren verwendet. In [SS04, Abschnitt 3.4.3] werden zunächst direkte und indirekte Methode miteinander verglichen:

- In der direkten Methode muss auch zur Berechnung der rechten Seite der Integraloperator K berechnet werden; in der indirekten Methode erscheint dort nur die Randbedingung φ selbst (bzw. im Skalarprodukt).
- In der direkten Methode werden die konkreten Cauchy-Daten (d. h. Dirichlet- und Neumann-Randwerte) der gesuchten Lösung des Dirichlet-Problems berechnet, in der indirekten Methode nur eine abstrakte Dichtefunktion. In beiden Fällen hat die gesuchte Randfunktion Singularitäten an Ecken und Kanten.
- Zur Berechnung der Lösung U des Dirichlet-Problems aus der gesuchten Randfunktion u müssen im Fall der indirekten Methode entweder $\mathscr{E}u$ oder $\mathscr{D}u$ ausgerechnet werden; in der Green'schen Darstellungsformel, die zur Berechnung von U aus einer Lösung der direkten Methode angewendet wird, kommen beide Terme vor.

Für Probleme, bei denen man eher an der Normalenableitung der gesuchten Funktion als an ihrer eigentlichen Gestalt im Inneren interessiert ist, ist die direkte Methode vorteilhaft. Möchte man hingegen an vielen Punkten in Ω die gesuchte Funktion auswerten, ist eher die indirekte Methode vorzuziehen.

Bei der Frage nach Galerkin- oder Kollokationsverfahren kommen weitere Aspekte zum Tragen:

- Nach [SS04, Bemerkung 4.1.25] gibt es bei der Kollokationsmethode weniger umfangreiche Resultate zur Konvergenz und Stabilität und die Lösbarkeit hängt stark von der Wahl der Kollokationspunkte ab.[24]
- In beiden Fällen muss ein lineares Gleichungssystem der Form $A \cdot u = b$ aufgestellt und gelöst werden. Ein praktisches Problem bei der Behandlung mittels Galerkin-Verfahren ist die Berechnung der Matrixkoeffizienten, d. h. der Werte $b_V(\lambda_i, \lambda_j)$ bzw. $b_K(\lambda_i, \lambda_j)$. Hierbei müssen singuläre Funktionen nicht nur über einem Element von $\partial\Omega$ integriert werden, sondern sogar über ein Paar von Elementen, d. h. es treten Doppelintegrale der Form
$$\int_{\partial\Omega} \lambda_i(a) \cdot \int_{\partial\Omega} s_a(x) \cdot \lambda_j(x) \, \mathrm{d}\sigma_x \, \mathrm{d}\sigma_a \quad \text{bzw.} \quad \int_{\partial\Omega} \lambda_i(a) \cdot \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu}(x) \cdot \lambda_j(x) \, \mathrm{d}\sigma_x \, \mathrm{d}\sigma_a$$
auf, was die Implementierung (gerade im Fall $d \geq 3$) verkompliziert. In der Kollokationsmethode müssen die Integrale nur auf einem einzelnen Element berechnet werden, weswegen laut [SS04] die Kollokationsmethode gerade in der Ingenieurpraxis weit verbreitet ist.
- In beiden Fällen ist die Matrix dicht besetzt (ein wichtiger Unterschied zur Finite-Elemente-Methode); im Gegensatz zum Galerkin-Verfahren ist die Matrix bei der Kollokationsmethode jedoch nicht symmetrisch. Dies kann die Auswahl des Lösers für das lineare Gleichungssystem beeinflussen.

[24] Für ein einfaches Beispiel (in einem anderen Kontext), in dem die Wahl der Kollokationspunkte starken Einfluss auf die Existenz einer Lösung hat, siehe Anhang B.

4.3.3 Algorithmus

Es soll nun am Beispiel der indirekten Kollokationsformulierung für das Doppelschichtpotential (Problem 4.7) die konkrete numerische Vorgehensweise für ein Polygon gezeigt werden.

S^h: endlich-dimensionaler Lösungsraum

1. Zunächst muss ein N-dimensionaler Unterraum $S^h \subset H^{1/2}(\partial\Omega)$ festgelegt werden, in dem Problem 4.7 gelöst werden soll. Aufgrund der an den Ecken von $\partial\Omega$ zu erwartenden Singularitäten scheint es ratsam, S^h so zu wählen, dass auch unstetige Funktionen enthalten sind.

$\{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$: S^h-Basis

$\mathcal{T}$: Triangulierung von $\partial\Omega$
τ: Element von $\mathcal{T}$

2. Sei $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$ eine Basis von S^h. Wenn S^h auch an den Ecken von $\partial\Omega$ unstetige Funktionen enthält, ist es naheliegend, eine Basis zu wählen, in der jedes Element auf einer Triangulierung $\mathcal{T}$ von $\partial\Omega$ nur auf einem einzigen Element τ von 0 verschieden ist.

3. Es müssen N Kollokationspunkte $\{c_1, \ldots, c_N\}$ auf $\partial\Omega$ gewählt werden, an denen Gleichheit der gesuchten Lösung $u \in S^h$ gelten soll.

   Beispiel 4.16 In [Rus08] wird auf einer Triangulierung von $\partial\Omega$ der Raum der stückweise linearen Funktionen mit Hütchenbasis verwendet. Die Kollokationspunkte liegen dort an den Ecken von $\partial\Omega$.
   Bei unstetigen Basisfunktion hat man aus Implementierungssicht den Vorteil, keine Integration über mehrere Elemente von $\partial\Omega$ durchführen zu müssen, muss aber Vorsicht bei der Wahl von Kollokationspunkten an Unstetigkeitsstellen der λ_i walten lassen.

4. Nun müssen die Matrix A und die rechte Seite $\vec{b}$ für das lineare Gleichungssystem $A \cdot \vec{u} = \vec{b}$ assembliert werden. Die Einträge von $\vec{u}$ sind die gesuchten Koeffizienten $u^1, \ldots, u^N$ der Basisfunktionen. Der Eintrag b_j ist die rechte Seite von (4.19):

$$b_j = \varphi(x_j)$$

   Der Matrixeintrag $A_{i,j}$ ist dementsprechend die linke Seite von (4.19):

$$\begin{aligned} A_{i,j} = K(\lambda_j)(c_i) - \frac{1}{2} \cdot \lambda_j(c_i) &= \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_{c_i}}{\partial \nu}(x) \cdot \lambda_j(x) \, \mathrm{d}\sigma_x - \frac{1}{2} \cdot \lambda_j(c_i) \\ &= -\frac{1}{2} \cdot \lambda_j(c_i) + \sum_{\tau \in \mathcal{T}} \int_\tau \frac{\partial s_{c_i}}{\partial \nu}(x) \cdot \lambda_j(x) \, \mathrm{d}\sigma_x \end{aligned}$$

   Die Kombination aus Kollokationsmethode einerseits und der numerischen Auswertung der auftretenden Integrale durch Quadraturformeln andererseits ist als *Nyström-Verfahren* bekannt und wurde von EVERT J. NYSTRÖM (1895–1960) in [Nys30] erstmalig vorgestellt, um Fredholm'sche Integralgleichungen 2. Art zu lösen. Dort wendet er die Methode auch an, um das Laplace-Problem auf einem glatt berandeten, konvexen Gebiet zu lösen.

   Für den Fall, dass der Träger von λ_j nur aus einem einzigen Element τ_0 von $\partial\Omega$ besteht, lässt sich folgende Fallunterscheidung machen:

- Falls $c_i \in \overline{\tau_0}$, so ist $\frac{\partial s_{c_i}}{\partial \nu}$ auf τ_0 identisch 0, wie im Anhang C gezeigt wird. Insbesondere gilt damit $A_{i,j} = -\frac{1}{2} \cdot \lambda_j(c_i)$.
- Falls $c_i \notin \overline{\tau_0}$, so ist $\lambda_j(c_i) = 0$ und es bleibt: $A_{i,j} = \int_{\tau_0} \frac{\partial s_{c_i}}{\partial \nu}(x) \cdot \lambda_j(x)\, \mathrm{d}\sigma_x$.

Die Assemblierung von A kommt in diesem Fall ohne die Berechnung eines singulären Integrals aus.

Schließlich muss das lineare Gleichungssystem $A \cdot \vec{u} = \vec{b}$ gelöst werden, z. B. durch eine LR- oder QR-Zerlegung von A.

5. Um aus der berechneten Funktion $u = \sum_{i=1}^{N} u^i \cdot \lambda_i$ die Lösung des Dirichlet-Problems an einer Stelle $a \in \Omega$ zu bestimmen, muss das (reguläre) Integral

$$\mathscr{D}u(a) = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot u\, \mathrm{d}\sigma_x = \sum_{i=1}^{N} u^i \cdot \int_{\partial\Omega} (\frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot \lambda_i)\, \mathrm{d}\sigma_x$$

berechnet werden.

4.4 Szegő-Integralgleichungsmethode

In diesem Abschnitt soll es um ein von STEVEN R. BELL in [Bel90] und [Bel92] vorgestelltes Verfahren gehen, die Szegő-Integralgleichungsmethode (Szegő Integral Equation Method, SIEM).[25] Dieses Verfahren basiert ebenfalls auf funktionentheoretischen Grundlagen und ist daher wie die CVBEM auf die komplexe Ebene bzw. $\mathbb{R}^2$ beschränkt. Bisher war die SIEM aufgrund des unbekannten Randverhaltens auftretender Funktionen auf glatt berandete Gebiete beschränkt; in dieser Arbeit wird sie erstmalig auf auch polygonal berandeten Gebiete angewendet.

Grundlage des Verfahrens ist, dass jede harmonische Funktion $F\colon \Omega \to \mathbb{R}$ Realteil einer holomorphen Funktion ist (Satz 4.3) und es daher zwei holomorphe Funktionen U und W gibt, so dass $F = U + \overline{W}$. In der SIEM werden die Randwerte dieser Funktionen mit Hilfe des *Szegő-Kerns* bestimmt und dann über die Cauchy-Transformation nach innen fortgesetzt.

4.4.1 Theoretische Grundlagen

Funktionenräume Die funktionentheoretischen Grundlagen sind bereits in Abschnitt 4.2 gelegt worden. Insbesondere sei an die Cauchy-Transformation $\mathscr{C}$ erinnert, die $C(\partial\Omega, \mathbb{C})$ nach $\mathrm{Hol}(\Omega)$ abbildet (Satz 4.7).

T: Einheitstangente an $\partial\Omega$

$A^\infty(\Omega)$: holomorphe Funktionen mit C^∞-Fortsetzung auf $\partial\Omega$

$A^\infty(\partial\Omega)$: Randwerte von $A^\infty(\Omega)$-Funktionen

$\hat{\mathscr{C}}$: Cauchy-Transformation auf Randfunktionen

Sei zunächst Ω C^∞-glatt berandet mit der Einheitstangente $T\colon \partial\Omega \to \mathbb{C}$. Sei weiter $A^\infty(\Omega) := \mathrm{Hol}(\Omega) \cap C^\infty(\overline{\Omega}, \mathbb{C})$ und $A^\infty(\partial\Omega) \subset C^\infty(\partial\Omega, \mathbb{C})$ die möglichen Randwerte solcher Funktionen. Dann bildet die Cauchy-Transformation $C^\infty(\partial\Omega, \mathbb{C})$ auf $A^\infty(\Omega)$ ab [Bel92, Theorem 3.1] und wegen der glatten Fortsetzbarkeit lässt sich in sinnvoller Weise auch ein Operator

$$\hat{\mathscr{C}}\colon C^\infty(\partial\Omega, \mathbb{C}) \to A^\infty(\partial\Omega), \quad \hat{\mathscr{C}} v := \mathrm{tr}(\mathscr{C} v)$$

definieren, der ebenfalls als Cauchy-Transformation bezeichnet werden soll,[26] vgl. das kommutative Diagramm in Abbildung 19a.

Mit diesem Raum lassen sich die in der Einleitung formulierten Funktionen U und W schon besser eingrenzen und Ihre Funktion für die Lösung des Dirichlet-Problems im Falle von C^∞-Randfunktionen beschreiben:

Lemma 4.17 *Seien $U, W \in A^\infty(\Omega)$ mit Randwerten $u = U_{|\partial\Omega}$ und $w = W_{|\partial\Omega}$. Es gelte $u + \overline{w} = \varphi$ für eine rellwertige Funktion $\varphi \in C^\infty(\partial\Omega, \mathbb{R})$. Dann löst $U + \overline{W}$ auf Ω das Dirichlet-Problem zum Randwert φ.*

Beweis: Zu zeigen: $U + \overline{W}$ ist harmonisch und nimmt φ als Randwert an.

P.1 $\mathrm{Re}(U)$, $\mathrm{Im}(U)$, $\mathrm{Re}(W)$ und $\mathrm{Im}(W)$ aber auch $\mathrm{Im}(\overline{W}) = -\mathrm{Im}(W)$ sind harmonische Funktionen auf Ω, die sich stetig auf $\partial\Omega$ fortsetzen. Dies gilt also auch für $\mathrm{Re}(U) + \mathrm{Re}(W)$ und $\mathrm{Im}(U) - \mathrm{Im}(W)$.

[25] Dieser Name wurde vom Autor dieser Arbeit vergeben.

[26] Dies ist das komplexe Analogon zu $K_{\nearrow}$ aus der Randelementmethode.

P.2 Wenn nun $u + \overline{w} = \varphi$ auf $\partial\Omega$, heißt dies insbesondere, dass $\operatorname{Re}(U + \overline{W}) = \operatorname{Re}(U) + \operatorname{Re}(W)$ die harmonische Fortsetzung von φ auf Ω ist. $\operatorname{Im}(U + \overline{W})$ ist dementsprechend die harmonische Fortsetzung von $\operatorname{Im}(\varphi) = 0$ auf Ω, d. h. konstant 0. □

Der *Hardyraum* $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ ist die Vervollständigung von $A^\infty(\partial\Omega)$ bezüglich des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})}$. Er spielt eine besondere Rolle bei der Untersuchung des Randverhaltens holomorpher Funktionen: Einerseits gilt $\mathscr{C} v \in \operatorname{Hol}(\Omega)$ für alle $v \in \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$, umgekehrt gilt aber auch, dass alle Funktionen $V \in \operatorname{Hol}(\Omega)$ Randwerte in $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ haben [Bel92, Theorem 6.1 & 6.2]. $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ kann also mit dem Raum der Randfunktionen aller holomorphen Funktionen auf Ω identifiziert werden. Weiterhin lässt sich $\hat{\mathscr{C}}$ zu einem Operator $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) \to \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ erweitern [Bel92, Theorem 4.1]; dies ist in dem kommutativen Diagramm in Abbildung 19b dargestellt.[27]

$L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$: quadratintegrierbare Funktionen $\partial\Omega \to \mathbb{C}$
$\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$: $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$-Vervollständigung von $A^\infty(\partial\Omega)$

$$\begin{tikzcd}
C^\infty(\partial\Omega,\mathbb{C}) \arrow[dr, "\mathscr{C}"] \arrow[dd, dashed, "\hat{\mathscr{C}} := \operatorname{tr}\circ\mathscr{C}"'] & \\
& A^\infty(\Omega) \arrow[dl, "\operatorname{tr}"] \\
A^\infty(\partial\Omega) &
\end{tikzcd}$$

(a): Die Cauchy-Transformation auf $C^\infty(\partial\Omega,\mathbb{C})$.

$$\begin{tikzcd}
L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) \arrow[dr, "\mathscr{C}"] \arrow[dd, dashed, "\hat{\mathscr{C}} := \operatorname{tr}\circ\mathscr{C}"'] & \\
& \operatorname{Hol}(\Omega) \arrow[dl, "\operatorname{tr}"] \\
\mathscr{H}^2(\partial\Omega) &
\end{tikzcd}$$

(b): Die Cauchy-Transformation auf $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$.

Abbildung 19: Die klassische Cauchy-Transformation $\mathscr{C}$ induziert über den Spuroperator einen Operator $\hat{\mathscr{C}}$ auf den Randfunktionen.

Lemma 4.17 lässt sich von $A^\infty(\Omega)$ auf $\operatorname{Hol}(\Omega)$ verallgemeinern:

Satz 4.18 Seien $u, w \in \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$. Es gelte $u + \overline{w} = \varphi$ für eine rellwertige Funktion $\varphi \in L^2(\partial\Omega,\mathbb{R})$ im L^2-Sinn. Dann löst $\mathscr{C} u + \overline{\mathscr{C} w}$ auf Ω das Dirichlet-Problem zum Randwert φ.

Beweis: $U := \mathscr{C} u$ und $W := \mathscr{C} w$ sind holomorphe Funktionen, die ihre Randwerte (im L^2-Sinn) annehmen. Der Rest erfolgt analog zum Beweis von Lemma 4.17.

□

[27] In Fußnote 26 wurde bereits angemerkt, dass $\hat{\mathscr{C}}$ dem Operator $K_{\nearrow}$ aus der Randelementmethode entspricht. Während dort für $K_{\nearrow}$ nur die Abbildungseigenschaft $H^{1/2}(\partial\Omega) \to H^{1/2}(\partial\Omega)$ gezeigt wurde, kann $\hat{\mathscr{C}}$ auch auf $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) \to \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ definiert werden. Dies gibt Anlass zu der Vermutung, dass sich auch $K_{\nearrow}$ noch entsprechend erweitern lässt.

Cauchy-Transformation auf $\partial\Omega$ Es wurde noch keine geschlossene Darstellung für $\hat{\mathscr{C}}$ angegeben. Das klassische Integral

$$\frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(z)}{z-a}\,\mathrm{d}z, \tag{4.20}$$

dass die Cauchy-Transformation $\mathscr{C}v$ bestimmt, ist für $a \in \partial\Omega$ undefiniert, da der Integrand dort singulär wird. In Analogie zum uneigentlichen Integral betrachtet man den *Cauchy'schen Hauptwert* dieses Integrals auf $\partial\Omega$:

C. H. : Cauchy'scher Hauptwert

$$\mathrm{C.\,H.}\ \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(z)}{z-a}\,\mathrm{d}z := \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \oint_{(\partial\Omega\setminus B_\varepsilon(a))} \frac{v(z)}{z-a}\,\mathrm{d}z$$

JOSIP PLEMELJ (1873–1967) zeigte in [Ple08], dass dieser Hauptwert für alle $a \in \partial\Omega$ existiert. Er zeigte weiterhin, dass dieser *nicht* identisch mit dem Grenzwert $\lim_{z\to a} \mathscr{C}v(z)$ ist, sondern dass gilt:

$$\hat{\mathscr{C}}v(a) = \lim_{z\to a} \mathscr{C}v(z) = \mathrm{C.\,H.}\ \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(z)}{z-a}\,\mathrm{d}z + \frac{1}{2}\cdot v(a) \tag{4.21}$$

Bemerkung 4.19 (Plemelj-Formel & Doppelschichtpotential) Nach Satz 4.15 ist für reellwertige Randfunktionen v das Doppelschichtpotential $\mathscr{D}v$ auf Ω identisch mit $-\mathrm{Re}(\mathscr{C}v)$. Insofern kann man in $d = 2$ die im Abschnitt 4.3 genannte Formel (4.14) über das Grenzverhalten des Doppelschichtpotentials,

$$\mathrm{tr}_{\nearrow}(\mathscr{D}v)(a) = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_a}{\partial \nu} \cdot v\,\mathrm{d}\sigma_x - \frac{1}{2}\cdot v(a),$$

als direkte Folgerung der Plemelj-Formel betrachten.

Szegő-Projektion Auf $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ ist $\hat{\mathscr{C}} = \mathrm{Id}$, denn dort reproduziert $\mathscr{C}$ aus einem gegebenen Randwert die dazugehörige holomorphe Funktion auf Ω. Folglich gilt $\hat{\mathscr{C}}^2 = \hat{\mathscr{C}}$, d. h. $\hat{\mathscr{C}}$ ist eine Projektion von $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$ auf $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$. Man betrachte nun die *Orthogonalprojektion*

$\hat{\mathscr{S}}$: Szegő-Projektion $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) \to \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$

$$\hat{\mathscr{S}}\colon L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) \to \mathscr{H}^2(\partial\Omega),$$

d. h. diejenige Projektion $\hat{\mathscr{S}}$, die für ein $v \in L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$ den Abstand $\|\hat{\mathscr{S}}v - v\|_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})}$ minimiert. Diese Projektion heißt *Szegő-Projektion* (nach GÁBOR SZEGŐ, 1895–1985). Da $\hat{\mathscr{S}}v \in \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$, kann man $\hat{\mathscr{S}}v$ mittels der Cauchy-Transformation über die Vorschrift $\mathscr{S}v := \mathscr{C}\hat{\mathscr{S}}v$ holomorph nach Ω fortsetzen:

$\mathscr{S}$: Szegő-Transformation $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) \to \mathrm{Hol}(\Omega)$

Beispiel 4.20 (Szegő-Koordinaten) Im Beispiel 4.9 wurden auf dem Polygon Ω mit Ecken $v_1,\dots,v_n$ die Cauchy-Koordinaten $C_i\colon \Omega \to \mathbb{C}$ eingeführt, für die

$$a = \sum_{i=1}^{n} C_i(a)\cdot v_i$$

für alle $a \in \Omega$ gilt. Deformiert man $\partial\Omega$ durch das Verschieben von Ecken mittels einer auf den Kanten des Polygons linear verlaufenden Funktion $f\colon v_i \mapsto v_i'$, erhält man ein anderes Polygon Ω'. Über die Abbildung $F\colon a \mapsto \sum_{i=1}^{n} C_i(a)\cdot v_i'$ wird

$$\begin{tikzcd}
L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) \arrow[dd, "\hat{\mathscr{S}}"'] \arrow[dr, dashed, "\mathscr{S} := \mathscr{C} \circ \hat{\mathscr{S}}"] & \\
& \mathrm{Hol}(\Omega) \\
\mathscr{H}^2(\partial\Omega) \arrow[ur, "\mathscr{C}"'] &
\end{tikzcd}$$

Abbildung 20: Im Gegensatz zur Cauchy-Transformation $\mathscr{C}$, die auch einen Randoperator $\hat{\mathscr{C}}$ induziert, ist das Vorgehen bei der Szegő-Projektion umgekehrt: Der Randoperator $\hat{\mathscr{S}}$ induziert auch eine Transformation $\mathscr{S}$ ins Innere von Ω.

damit auch eine Deformation des Inneren von Ω induziert – dies ist gerade eine diskrete Version der Cauchy-Transformation. Im Allgemeinen wird jedoch $F(\Omega)$ nicht deckungsgleich mit Ω' sein, insbesondere wird sich $F(\partial\Omega)$ häufig stark von $\partial\Omega'$ unterscheiden, vgl. Abbildung 7.

In [WBCG09] wird daher vorgeschlagen, zur Deformation nicht die direkt von den Cauchy-Koordinaten induzierte Abbildung zu verwenden, sondern in dem von den C_i aufgespannten, n-dimensionalen Unterraum $V \subset \mathrm{Hol}(\Omega)$ diejenige Funktion $G\colon \Omega \to \mathbb{C}$ zu suchen, die den Abstand $\|G(\partial\Omega) - \partial\Omega'\|_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})}$ minimiert, d. h. die Szegő-Projektion $G = \mathscr{S} f$ auf V. Dies induziert dann eine Deformation von Ω, die stärker mit der Form von Ω' übereinstimmt.

Satz 4.21 (Orthogonale Zerlegung von $L^2(\partial\Omega)$ [Bel92, Theorem 4.3]) Jede Funktion $v \in L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$ hat genau eine orthogonale Zerlegung

$$v = u + \overline{w}$$

mit $u \in \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ und $\overline{w} \in \mathscr{H}^2(\partial\Omega)^\perp$. Weiterhin gilt $u = \hat{\mathscr{S}} v$ und $w = T \cdot \hat{\mathscr{S}}(\overline{v} \cdot \overline{T})$, vgl. Abbildung 21.

Man betrachte nun die Orthogonalzerlegung $u + \overline{w}$ von $\varphi \in L^2(\partial\Omega)$. Angenommen, u und w wären beide in $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$, dann wären die Voraussetzungen von Satz 4.18 erfüllt und $\mathscr{C} u + \overline{\mathscr{C} w}$ wäre die Lösung des Dirichlet-Problems zum Randwert φ. Im Allgemeinen lässt sich jedoch T nicht holomorph auf Ω fortsetzen, so dass zumindest die Orthogonalzerlegung von φ nicht direkt zur Lösung verwendet werden kann.

Cauchy- und andere Kerne Betrachtet man die Auswertung der Cauchy-Transformation einer Funktion an einer festen Stelle $a \in \Omega$ als stetiges, lineares Funktional auf dem Hilbertraum $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$, so gibt es nach dem Riesz'schen Darstellungssatz (Satz 2.12) genau ein Element $C_a \in L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$, so dass:

$$\forall\, v \in L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) : \mathscr{C} v(a) = \langle v, C_a \rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})}$$

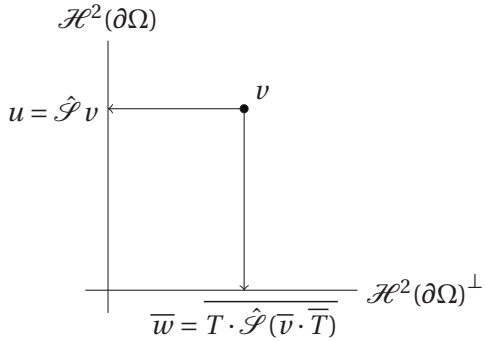


Abbildung 21: Orthogonale Zerlegung von $v \in L^2(\partial\Omega, \mathbb{C})$

Aus der bekannten Formel für die Cauchy-Transformation (4.20) kann man die geschlossene Form von C_a bestimmen:

$$C_a(z) = \overline{\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{T(z)}{z-a}}$$

C_a: Cauchy-Kern $\partial\Omega \to \mathbb{C}$

Die Funktion $C_a \colon \partial\Omega \to \mathbb{C}$ heißt *Cauchy-Kern*.

Bemerkung 4.22 (Cauchy-Kern) Sei $\gamma \colon [0,1] \to \mathbb{C}$ eine Parametrisierung von $\partial\Omega$, dann ist:

$$\begin{aligned}\oint_{\partial\Omega} v(z)\,\mathrm{d}z &= \int_0^1 v(\gamma(t)) \cdot \gamma'(t)\,\mathrm{d}t \\ &= \int_0^1 v(\gamma(t)) \cdot T(\gamma(t)) \cdot \left|\gamma'(t)\right| \mathrm{d}t = \int_{\partial\Omega} v(z) \cdot T(z)\,\mathrm{d}\sigma_z \\ &= \langle v, \overline{T} \rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})}\end{aligned}$$

Mit der obigen Definition des Cauchy-Kerns über das L^2-Skalarprodukt gilt daher:

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(z)}{z-a}\,\mathrm{d}z = \int_{\partial\Omega} v(z) \cdot \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{T(z)}{z-a}\,\mathrm{d}\sigma_z = \langle v, C_a \rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})}$$

An anderen Stellen in der Literatur wird der Cauchy-Kern zuweilen auch direkt über das komplexe Kurvenintegral hergeleitet; dann entfallen die Tangente und die komplexe Konjugation.

Betrachte nun die orthogonale Zerlegung

$$C_a = \hat{\mathscr{S}} C_a + \overline{T \cdot \hat{\mathscr{S}}(\overline{C_a} \cdot \overline{T})} \tag{4.22}$$

gemäß Satz 4.21. Die Funktion $S_a := \hat{\mathscr{S}} C_a$ heißt *Szegő-Kern*. Der Name rührt daher, dass dies gerade die Kernfunktion ist, die die Szegő-Transformation induziert:

$$\mathscr{S} v(a) = \mathscr{C} \hat{\mathscr{S}} v(a) = \langle \hat{\mathscr{S}} v, C_a \rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})} \overset{*}{=} \langle v, \hat{\mathscr{S}} C_a \rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})} = \langle v, S_a \rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})}$$

Die Gleichheit bei $*$ gilt, weil $\hat{\mathscr{S}}$ als Orthogonalprojektion selbstadjungiert ist.

S_a: Szegő-Kern $\overline{\Omega} \to \mathbb{C}$

Im Gegensatz zum Cauchy-Kern, der kein Randwert einer holomorphen Funktion ist, ist $S_a \in \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$, d. h. lässt sich durch die Cauchy-Transformation holomorph auf ganz Ω fortsetzen. Daher soll im Folgenden S_a als Funktion $\overline{\Omega} \to \mathbb{C}$ verstanden werden.

Der Szegő-Kern ist in der Funktionentheorie eine bekannte Funktion mit teilweise erstaunlichen Eigenschaften. So kann eine konforme Abbildung von Ω auf die Einheitskreisscheibe kompakt mittels des Szegő-Kerns ausgedrückt werden. Eine ausführlichere Beschreibung dieses Resultates findet sich im Anhang D.

Aus (4.22) lässt sich über folgenden Zusammenhang eine weitere Kernfunktion auf $\overline{\Omega}\backslash\{a\}$ definieren:

$$\frac{1}{\mathrm{i}} \cdot L_a(z) := \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{1}{z-a} - \mathscr{S}(\overline{C_a} \cdot \overline{T})$$

L_a heißt *Garabedian-Kern* (nach PAUL ROESEL GARABEDIAN, 1927–2010) und ist eine meromorphe Funktion auf $\overline{\Omega}$ mit einer einfachen Polstelle bei $a \in \Omega$. Auf $\partial\Omega$ gilt

L_a: Garabedian-Kern $\overline{\Omega}\backslash\{a\} \to \mathbb{C}$

$$L_a(z) = \frac{1}{(2\cdot\pi)} \cdot \frac{1}{z-a} - \hat{\mathscr{S}}(\overline{C_a} \cdot \overline{T})$$

und durch Einsetzen von L_a und C_a in (4.22) erhält man auf $\partial\Omega$:

$$L_a = \mathrm{i} \cdot \overline{S_a} \cdot \overline{T} \tag{4.23}$$

Dieser Zusammenhang soll nun benutzt werden, um das auf Seite 61 besprochene Defizit der Tangentenfunktion, sich nicht holomorph nach Ω fortsetzen zu lassen, zu umgehen.

Lösung des Dirichlet-Problems Die Cauchy-Transformation $\hat{\mathscr{C}}$ hat als linearer Operator auf $L^2(\partial\Omega, \mathbb{C})$ einen adjungierten Operator $\hat{\mathscr{C}}^*$. Gilt für die Cauchy-Transformation auf $v \in C^\infty(\partial\Omega, \mathbb{C})$ die Darstellung (4.21):

$\hat{\mathscr{C}}^*$: adjungierter Operator von $\hat{\mathscr{C}}$

$$\hat{\mathscr{C}}\, v(a) = \frac{1}{2} \cdot v(a) + \mathrm{C.\,H.} \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{T(z)}{z-a} \cdot v(z)\, \mathrm{d}\sigma_z,$$

so gilt für ihren adjungierten Operator nach [KS78]:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathscr{C}}^*\, v(a) &= \frac{1}{2} \cdot v(a) + \mathrm{C.\,H.} \int_{\partial\Omega} \overline{\frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{T(a)}{a-z}} \cdot v(z)\, \mathrm{d}\sigma_z && (4.24)\\
&= \frac{1}{2} \cdot v(a) - \overline{T(a)} \cdot \mathrm{C.\,H.} \overline{\int_{\partial\Omega} \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{(T(z) \cdot \overline{T(z)})}{z-a} \cdot \overline{v(z)}\, \mathrm{d}\sigma_z}\\
&= \frac{1}{2} \cdot v(a) - \overline{T(a)} \cdot \overline{(\hat{\mathscr{C}}(\overline{T} \cdot \overline{v})(a) - \frac{1}{2} \cdot v(a) \cdot T(a))}\\
&= v(a) - \overline{T(a)} \cdot \overline{\hat{\mathscr{C}}(\overline{T} \cdot \overline{v})(a)} && (4.25)
\end{aligned}$$

Also gilt $\hat{\mathscr{C}}^*\, v = v - \overline{T} \cdot \overline{\hat{\mathscr{C}}(\overline{v} \cdot \overline{T})}$ und $\hat{\mathscr{C}}^*$ lässt sich auf $L^2(\partial\Omega, \mathbb{C})$ fortsetzen. Während $\hat{\mathscr{C}}$ als eine Art Grenzwert von $\mathscr{C}$ „aus dem Inneren von Ω kommt“ und sich via $\mathscr{C}$ auch wieder dahin

fortsetzen lässt, ist $\hat{\mathscr{C}}^*$ nur auf $\partial\Omega$ definiert und es gibt auch keine kanonische Entsprechung auf einem Ω-Funktionenraum.

$\mathscr{A}$: Kerzman-Stein-Operator $\hat{\mathscr{C}} - \hat{\mathscr{C}}^*$

Der *Kerzman-Stein-Operator* $\mathscr{A}$ (nach NORBERTO L. KERZMAN und ELIAS M. STEIN) ist definiert als $\mathscr{A} = \hat{\mathscr{C}} - \hat{\mathscr{C}}^*$. Insbesondere ist damit

$$(\mathrm{Id} + \mathscr{A})(v) = v + \mathscr{A}(v) = v + \hat{\mathscr{C}} v - v + \overline{T} \cdot \overline{\hat{\mathscr{C}}(\overline{v} \cdot \overline{T})} = \hat{\mathscr{C}} v + \overline{T} \cdot \overline{\hat{\mathscr{C}}(\overline{v} \cdot \overline{T})}$$

Nun lässt sich das zentrale theoretische Resultat dieses Abschnitts formulieren:

Satz 4.23 (Lösung des Dirichlet-Problems [Bel90, Theorem 2.1]) Sei $\varphi \in C^\infty(\partial\Omega, \mathbb{R})$ und $a \in \Omega$. Sei $r : \partial\Omega \to \mathbb{C}$ die Lösung der Gleichung

$$(\mathrm{Id} + \mathscr{A})(r) = S_a \cdot \varphi \tag{4.26}$$

Seien weiter folgende Funktionen auf Ω definiert:

$$U := \frac{\mathscr{C} r}{S_a} \qquad\qquad W := \mathrm{i} \cdot \frac{\mathscr{C}(\overline{r} \cdot \overline{T})}{L_a}$$

Dann ist $U + \overline{W}$ die Lösung des Dirichlet-Problems zum Randwert φ.

Beweis: Zu zeigen: U und W sind holomorph und $\mathrm{tr}(U + \overline{W}) = \varphi$, der Rest folgt aus Satz 4.18.

P.1 (**Annahme der Randwerte**) L_a ist eine meromorphe Funktion auf Ω, die sich auf dem Rand durch $L_a := \mathrm{i} \cdot \overline{S_a} \cdot \overline{T}$ stetig fortsetzen lässt.
Sei r wie gefordert, dann gilt auf $\partial\Omega$:

$$S_a \cdot \varphi = r + \mathscr{A}(r) = \hat{\mathscr{C}} r + \overline{T} \cdot \overline{\hat{\mathscr{C}}(\overline{r} \cdot \overline{T})}$$

Teilt man durch S_a (S_a verschwindet auf $\overline{\Omega}$ nach [Bel92, Theorem 9.7] nicht) und substituiert $\overline{T} = \frac{-\mathrm{i} \cdot S_a}{\overline{L_a}}$, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \varphi &= \frac{\hat{\mathscr{C}} r}{S_a} + \frac{\overline{T} \cdot \overline{\hat{\mathscr{C}}(\overline{r} \cdot \overline{T})}}{S_a} \\ &= \frac{\hat{\mathscr{C}} r}{S_a} + \frac{-\mathrm{i} \cdot \overline{\hat{\mathscr{C}}(\overline{r} \cdot \overline{T})}}{\overline{L_a}} \\ &= \mathrm{tr}(U) + \mathrm{tr}(\overline{W}) \end{aligned}$$

Also nimmt $F := U + \overline{W}$ die Randwerte φ an. Insbesondere hängt die Lösung F nicht von der Wahl von a ab.

P.2 (**Harmonische Fortsetzung**) Es bleibt zu zeigen, dass U und W holomorph sind. In beiden Funktionen ist der Zähler im Bild der Cauchy-Transformation, also in $\mathrm{Hol}(\Omega)$.

Bei U ist der Nenner ebenfalls holomorph und wird nach [Bel92, Theorem 9.7] nicht 0, d. h. U ist holomorph.
Bei W ist der Nenner meromorph mit einer einfachen Polstelle bei $a \in \Omega$ und wird nach [Bel92, Theorem 9.5] auf $\overline{\Omega}\setminus\{a\}$ ebenfalls nicht 0, d. h. auch W ist holomorph. □

Satz 4.23 behält seine Gültigkeit auch für $C(\partial\Omega, \mathbb{R})$-Funktionen, da diese als Grenzwert von $C^\infty(\partial\Omega, \mathbb{R})$-Funktionen auftreten. Um den Satz praktisch verwenden zu können, müssen noch folgende Fragen geklärt werden:

- Wie kann S_a für ein $a \in \Omega$ berechnet werden?
- Wie kann die Gleichung $(\mathrm{Id} + \mathscr{A})(r) = S_a \cdot \varphi$ gelöst werden?

Berechnung des Szegő-Kerns In [KS78] wird gezeigt, dass Szegő- und Cauchy-Kern über den Kerzman-Stein-Operator $\mathscr{A}$ in Verbindung stehen:

$$(\mathrm{Id} - \mathscr{A})(S_a) = C_a \tag{4.27}$$

Mit der Formel (4.24) für $\hat{\mathscr{C}}^*$ erhält man für $\mathscr{A}(v)$ folgende Integraldarstellung:

$$\begin{aligned}
\mathscr{A}(v)(a) &= \hat{\mathscr{C}}\, v(a) - \hat{\mathscr{C}}^*\, v(a) \\
&= \frac{1}{2} \cdot v(a) + \mathrm{C.\,H.} \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{T(z)}{z-a} \cdot v(z)\,\mathrm{d}\sigma_z \\
&\quad - \frac{1}{2} \cdot v(a) - \mathrm{C.\,H.} \int_{\partial\Omega} \overline{\frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{T(a)}{a-z}} \cdot v(z)\,\mathrm{d}\sigma_z \\
&= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \mathrm{C.\,H.} \int_{\partial\Omega} \left(\frac{T(z)}{z-a} - \overline{\frac{T(a)}{\overline{z-a}}}\right) \cdot v(z)\,\mathrm{d}\sigma_z \\
&=: \mathrm{C.\,H.} \int_{\partial\Omega} A(a,z) \cdot v(z)\,\mathrm{d}\sigma_z
\end{aligned}$$

Die Funktion $A(a,z) = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \left(\frac{T(z)}{z-a} - \overline{\frac{T(a)}{\overline{z-a}}}\right)$ heißt *Kerzman-Stein-Kern*. In [KS78, Theorem 5.1] wird gezeigt, dass – entgegen der intuitiven Vermutung – $A \in C^\infty(\partial\Omega \times \partial\Omega, \mathbb{C})$ gilt. Diese Darstellung von $\mathscr{A}$ ermöglicht eine Formulierung von (4.27) als Fredholm'sche Integralgleichung 2. Art und ist eindeutig nach S_a lösbar.

Die Berechnung der gesuchten Randfunktion r in (4.26) verläuft dann analog.

4.4.2 Diskretisierung

Die SIEM wird in [Bel90] nur für glatt berandete Gebiete definiert. Auf solchen Gebieten ist die Einheitstangente T C^∞-glatt und damit ist für $a \in \Omega$ auch $C_a \in C^\infty(\partial\Omega, \mathbb{C})$. Weiterhin ist der Kerzman-Stein-Kern A für solche Gebiete eine C^∞-Funktion auf $\partial\Omega \times \partial\Omega$.[28] Daraus folgt, dass der Szegő-Kern als Lösung von $(\mathrm{Id} - \mathscr{A})(S_a) = C_a$ ebenfalls eine glatte Funktion ist.

[28] Hier ist essentiell, dass Ω C^∞-berandet ist, andernfalls stimmt diese Aussage nicht. In der Tat ist für ein Gebiet mit C^k-glatten Rand $A \in C^{k-2}(\partial\Omega \times \partial\Omega, \mathbb{C})$ für $k \geq 2$ [KT86, Theorem 2].

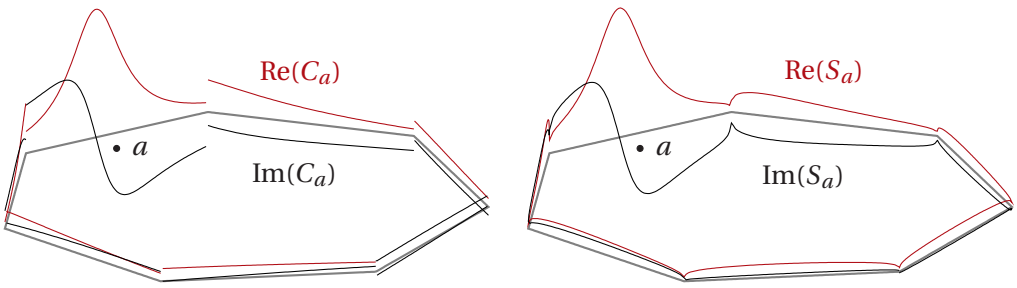
Für polygonal berandete Gebiete gestaltet sich die Situation schwieriger.[29] Dort ist schon T an den Ecken des Polygons unstetig, das gleiche folgt für den Cauchy-Kern. Als Orthogonalprojektion $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C}) \to \mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ ist die Szegő-Projektion jedoch auch auf polygonalen Gebieten wohldefiniert und ein beschränkter linearer Operator auf $L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$. Daher gibt es auch dort, analog zum glatten Fall, nach dem Riesz'schen Darstellungssatz für alle $a \in \Omega$ ein $S_a \in L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})$ mit $\mathscr{S}v(a) = \langle v, S_a\rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})}$. Insbesondere ist also auch die Integralgleichung $(\mathrm{Id} - \mathscr{A})(S_a) = C_a$ eindeutig lösbar.

Der in dieser Gleichung auftretende Kerzman-Stein-Kern $A(w,z)$ ist

- unstetig an den Ecken des Gebietsrandes,
- identisch 0, falls w und z auf der gleichen Kante liegen,
- und kann beliebig groß werden, falls w und z auf benachbarten Kanten liegen,

hat damit also viele Eigenschaften mit dem Kern für das Doppelschichtpotential gemeinsam.

In vielerlei Hinsicht ist die Berechnung des Szegő-Kerns S_a aus $(\mathrm{Id} - \mathscr{A})(S_a) = C_a$ also vergleichbar mit der Berechnung der Dichtefunktion u aus $(-\frac{1}{2}\cdot\mathrm{Id} + K)(u) = \varphi$ in der indirekten Formulierung der Randelementmethode. Ein wesentlicher Unterschied ist jedoch, dass dort die gesuchte Dichtefunktion u unstetig, die rechte Seite φ aber stetig ist – bei der Berechnung des Szegő-Kerns ist es genau umgekehrt: Die rechte Seite C_a ist unstetig, die gesuchte Funktion S_a jedoch stetig, denn S_a ist per Definition in $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ und damit Randwert einer holomorphen Funktion auf Ω. In Abbildung 22b ist beispielhaft der Szegő-Kern auf einem polygonalen Gebiet abgebildet.



(a): Cauchy-Kern C_a (b): Szegő-Kern $S_a = \hat{\mathscr{S}}C_a$

Abbildung 22: Der Cauchy-Kern und seine Orthogonalprojektion nach $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$, der Szegő-Kern, auf einem Polygon. Beide Kernfunktionen $\Omega \times \partial\Omega \to \mathbb{C}$ sind im ersten Argument bei $a \in \Omega$ festgehalten und nur auf dem Rand visualisiert.

[29] Sogar für Artikel, die explizit einen Schwerpunkt auf die numerische Berechnung des Szegő-Kerns legen, wie [KT86, Bel90, Tru86], werden nur Gebiete mit mindestens C^2-glattem Rand betrachtet.

4.4.3 Algorithmus

Die Integralgleichung $(\mathrm{Id} - \mathscr{A})(s) = C_a$ soll mit dem Nyström-Verfahren gelöst werden.

1. Zunächst muss ein N-dimensionaler Unterraum S^h auf $\partial\Omega$ festgelegt werden, in dem (4.27) gelöst werden soll. Einen Raum zu wählen, in dem unstetige Funktionen enthalten sind, ist zwar eine Möglichkeit, aber nicht (wie bei der BEM beschrieben) durch die Natur des Problems vorgegeben. Ein Beispiel wären die stückweise linearen Funktionen auf $\partial\Omega$. Es ist allerdings darauf zu achten, dass die an den Ecken des Polygons zu erwartenden charakteristischen Verhaltensweisen der Lösung (z. B. Spitzen) durch S^h-Funktionen abgebildet werden können.

   N: Dimension des Lösungsraumes

2. Sei $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$ eine Basis von S^h, wobei jede Funktion λ_j den Träger $\tau_j \subset \partial\Omega$ habe. Im Fall der stückweise linearen Funktionen ist hier die Basis der Hütchenfunktionen eine naheliegende Wahl, wobei dann auch zu jeder Ecke des Polygons eine entsprechende Hütchenfunktion existieren sollte.

   τ_j: Träger von λ_j

3. Es müssen N Kollokationspunkte $\{c_1, \ldots, c_N\}$ auf $\partial\Omega$ gewählt werden, an denen die Gleichheit
$$s(c_i) - \mathscr{A}s(c_i) = C_a(c_i) \tag{4.28}$$
   gelten soll. Offensichtlich können an den Unstetigkeitsstellen von C_a (d. h. an den Ecken des Polygons) *keine* Kollokationspunkte platziert werden. Der Anhang B beschäftigt sich mit der Frage, wie die Kollokationspunkte zu platzieren sind, um Existenz und Eindeutigkeit sowie eine gute Approximation der Lösung zu erhalten.

4. Nun müssen die Matrix A und die rechte Seite $\vec{b}$ für das lineare Gleichungssystem $A \cdot \vec{s} = \vec{b}$ assembliert werden. Die Einträge von $\vec{s}$ sind die gesuchten Koeffizienten $s^1, \ldots, s^N$ der Basisfunktionen. Der Eintrag b_i ist die rechte Seite von (4.28):[30]
$$b_i = C_a(c_i)$$
   Der Matrixeintrag $A_{i,j}$ resultiert dementsprechend aus der linken Seite von (4.28), wenn s in der Basis $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$ ausgedrückt wird:
$$\begin{aligned} A_{i,j} = \lambda_j(c_i) - \mathscr{A}\lambda_j(c_i) &= \lambda_j(c_i) - \int_{\partial\Omega} A(c_i, x) \cdot \lambda_j(x)\,\mathrm{d}\sigma_x \\ &= \lambda_j(c_i) - \int_{\tau_j} A(c_i, x) \cdot \lambda_j(x)\,\mathrm{d}\sigma_x \end{aligned} \tag{4.29}$$
   Bei der Berechnung des Integrals $\int_{\tau_j} A(c_i, x) \cdot \lambda_j(x)\,\mathrm{d}\sigma_x$ ist unbedingt zu beachten, dass für festes c_i auch $A(c_i, x)$ an den Ecken des Polygons $\partial\Omega$ unstetig ist. Dies bedeutet, dass

[30] Die SIEM ist das einzige der vorgestellten Verfahren, bei davon abzuraten ist, die rechte Seite mit Hilfe einer Sampling-Matrix zu assemblieren, da hier keine auf den Polygonkanten linearen Funktionen auftreten.

man auf einem τ_j, das eine Ecke des Polygons enthält, keine Quadraturformeln verwenden kann, die diese Ecke in die Berechnung mit einbeziehen. Insbesondere sind (abgeschlossene) Newton-Cotes-Formeln zu vermeiden; stattdessen können z. B. Gauss-Legendre-Formeln verwendet werden.

Schließlich muss das lineare Gleichungssystem $A \cdot \vec{s} = \vec{b}$ gelöst werden. Die erhaltene Funktion ist eine Approximation des Szegő-Kerns S_a.

5. Die berechnete Funktion s ist nur vom Gebiet Ω und $a \in \Omega$ abhängig. Um das Dirichlet-Problem zur Randfunktion φ zu lösen, ist nun die Lösung von (4.26) bzw. der diskreten Variante

$$(\mathrm{Id} + \mathscr{A})(r) = s \cdot \varphi \tag{4.30}$$

notwendig. Dafür ist erneut das Lösen einer Integralgleichung erforderlich, bei der im Wesentlichen die gleichen Schritte wie oben durchzuführen sind. Obwohl hier die rechte Seite stetig ist, gilt das nicht für den Kerzman-Stein-Kern, so dass die Kollokationspunkte beibehalten werden sollten.

6. Zu einem Punkt $z \in \Omega$ und einer Randfunktion $v\colon \partial\Omega \to \mathbb{C}$ kann man die Cauchy-Transformation $\mathscr{C}v(z)$ über die numerische Berechnung von

$$\langle v, C_z \rangle_{L^2(\partial\Omega,\mathbb{C})} = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{v(x)}{x-z}\,\mathrm{d}x$$

auswerten.

Der Szegő-Kern S_a ist in $\mathscr{H}^2(\partial\Omega)$ und lässt sich durch $\mathscr{C}S_a$ holomorph auf Ω fortsetzen. Für seine Approximation s gilt dies entsprechend.

Der Garabedian-Kern L_a ist eine meromorphe Funktion auf $\overline{\Omega}$. Bei a hat er eine Singularität mit Residuum $\frac{1}{2\cdot\pi}$ und nimmt die Randwerte $\mathrm{i} \cdot \overline{S_a} \cdot \overline{T}$ an. Um diese Randwerte meromorph auf Ω fortzusetzen, muss man zunächst $\mathrm{res}_a(x) := \frac{1}{(2\cdot\pi)} \cdot \frac{1}{x-a}$ abziehen, dann die Cauchy-Transformation anwenden und schließlich wieder $\mathrm{res}_a(x)$ addieren, d. h.

$$L_a = \mathscr{C}(\mathrm{i} \cdot \overline{S_a} \cdot \overline{T} - \mathrm{res}_a) + \mathrm{res}_a$$

bzw. $L_a = \mathscr{C}(\mathrm{i} \cdot \overline{s} \cdot \overline{T} - \mathrm{res}_a) + \mathrm{res}_a$ mit der S_a approximierenden Funktion s.

Nun hat man alle Mittel beisammen, um Satz 4.23 im polygonalen Fall anzuwenden. Sei $z \in \Omega$, dann berechnet sich die harmonische Fortsetzung von φ an z mit:

$$\frac{\mathscr{C}r(z)}{\mathscr{C}s(z)} + \mathrm{i} \cdot \overline{\frac{\mathscr{C}(\overline{r} \cdot \overline{T})(z)}{L_a(z)}} \tag{4.31}$$

4.5 Analyse

Die vier vorgestellten Verfahren sind prinzipiell alle in der Lage, das Dirichlet-Problem zu lösen, um darüber harmonische Koordinaten zu berechnen. Das Grundprinzip ist immer, eine exakt harmonische Funktion U zu berechnen, die die vorgegebenen Randwerte φ möglichst gut approximiert, so dass

$$\left\| \operatorname{tr}(U) - \varphi \right\| = \min$$

Es soll in diesem Abschnitt das Szenario der Berechnung harmonischer Koordinaten $\psi_1, \ldots, \psi_n$ auf einem Polygon mit Ecken $v_1, \ldots, v_n$ betrachtet werden. Die ψ_i sind die Lösungen des Dirichlet-Problems zu den Hütchenfunktionen $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$ auf dem Rand und sollen für eine Menge von Punkten $p_1, \ldots, p_m$ ausgewertet werden. Dabei soll es die Option geben, die berechneten Lösungen $\psi_1, \ldots, \psi_n$ später auch noch für weitere Punkte auszuwerten.

$\psi_1, \ldots, \psi_n$: Koordinatenfunktionen
$v_1, \ldots, v_n$: Ecken des Polygons
$\varphi_1, \ldots, \varphi_n$: Hütchenfunktionen auf $\partial\Omega$
$p_1, \ldots, p_m$: Punkte in Ω

4.5.1 Vergleich der Vorgehensweisen

Jedes der vorgestellten Verfahren läuft in drei Schritten ab:

1. Präprozess-Schritt, in dem eine nur von Ω und potentiell von einem $a \in \Omega$ abhängige Matrix assembliert und ggf. eine Hilfsfunktion berechnet wird
2. für jede Randfunktion $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$: Berechnung eines Koeffizientenvektors zu der von φ_i abhängigen rechten Seite
3. für jeden Punkt $p_1, \ldots, p_m$ und jede Koordinatenfunktion $\psi_1, \ldots, \psi_n$: Berechnung des Koordinatenvektors $\psi_i(p_j)$

Im Folgenden sollen für die vier vorgestellten Verfahren

- Methode der Fundamentallösungen (MFS)
- Komplexwertige Randelementmethode (CVBEM)
- Randelementmethode (BEM)
- Szegő-Integralgleichungsmethode (SIEM)

die in den einzelnen Phasen notwendigen Schritte zusammengefasst werden. Dabei wird jedoch nur die Variante des Verfahrens behandelt, die in dem jeweiligen Abschnitt vorgestellt wurde. Dabei sei angenommen, dass es N Freiheitsgrade gibt und die $c_1, \ldots, c_M$ Observations- ($M > N$) bzw. Kollokationspunkte ($M = N$) über eine Sampling-Matrix S berechnet werden.

N: Anzahl Freiheitsgrade

Die Tabelle 1 auf Seite 70 zeigt die einzelnen Schritte, die in jedem Verfahren durchlaufen werden.

$c_1, \ldots, c_M$: Observations- bzw. Kollokationspunkte

Tabelle 1: Vorgehensweise der vorgestellten Verfahren

	1. Präprozess-Phase
MFS	• RBF-Zentren $x_1, \dots, x_N$ bestimmen • Observationspunkte $c_1, \dots, c_M$ bestimmen • A mit $a_{i,j} = s_{x_j}(c_i)$ assemblieren • Pseudoinverse A^+ und $A' := A^+ \cdot S$ berechnen
CVBEM	• Observationspunkte $c_1, \dots, c_M$ bestimmen • A mit $a_{i,j} = \mathrm{Re}(D_j(c_i))$ bzw. $-\mathrm{Im}(D_i(c_j))$ assemblieren • Pseudoinverse A^+ und $A' := A^+ \cdot S$ berechnen
BEM	• Kollokationspunkte $c_1, \dots, c_M$ $(M = N)$ bestimmen • A mit $a_{i,j} = (K - \frac{1}{2})(\lambda_j)(c_i)$ assemblieren • (Pseudo-)Inverse A^+ und $A' := A^+ \cdot S$ berechnen
SIEM	• Kollokationspunkte $c_1, \dots, c_M$ $(M = N)$ bestimmen • $a \in \Omega$ wählen • A mit $a_{i,j} = (\mathrm{Id} - \mathscr{A})(\lambda_j)(c_i)$ assemblieren • rechte Seite $\vec{b} = (C_a(c_i))_{i=1,\dots,M}$ assemblieren • $A \cdot \vec{s} = \vec{b}$ lösen • A mit $a_{i,j} = (\mathrm{Id} + \mathscr{A})(\lambda_j)(c_i)$ assemblieren • (Pseudo-)Inverse A^+ und $A' := A^+ \cdot \mathrm{diag}(\vec{s}) \cdot S$ berechnen

	2. Für jede Randfunktion φ_i	**3. Für jeden Punkt p_k und jedes ψ_i**
MFS	• $\vec{u_i} = A' \cdot \vec{\varphi_i}$ berechnen	• RBFs linear kombinieren: $\psi_i(p_k) = \sum_j u_i^j \cdot s_{x_j}(p_k) + \langle w, p_k \rangle + w^0$
CVBEM	• $\vec{u_i} = A' \cdot \vec{\varphi_i}$ berechnen	• Cauchy-Transformation von u_i: $\psi_i(p_k) = \sum_j \mathrm{Re}(D_j(p_k)) \cdot \mathrm{Re}(u_i^j) - \mathrm{Im}(D_j(p_k)) \cdot \mathrm{Im}(u_i^j)$
BEM	• $\vec{u_i} = A' \cdot \vec{\varphi_i}$ berechnen	• Doppelschichtpotential von u_i: $\psi_i(p_k) = \sum_j u_i^j \cdot \int_{\partial\Omega} (\frac{\partial s_{p_k}}{\partial \nu} \cdot \lambda_j) \, \mathrm{d}\sigma_x$
SIEM	• $\vec{u_i} = A' \cdot \vec{\varphi_i}$ berechnen	• u_i in Lösungsdarstellung einsetzen: $\psi_i(p_k) = \frac{\mathscr{C} u_i(p_k)}{\mathscr{C} s(p_k)} + \mathrm{i} \cdot \overline{\frac{\mathscr{C}(\overline{u_i} \cdot \overline{T})(p_k)}{L_a(p_k)}}$

4.5.2 Speicher

Von der Vorgehensweise unabhängig und in dem genannten Szenario inhärent vorhanden sind die $O(m \cdot d)$ Gleitkommazahlen (*doubles*) für die kartesischen Koordinaten der p_i sowie $O(m \cdot n)$ für die zu berechnenden baryzentrischen Koordinaten.

Darüber hinaus wird für die konkrete Berechnung eine gewisse Menge Speicher benötigt, dieser ist jedoch bei allen vorgestellten Verfahren ähnlich:

- $O(M)$ für die dünn besetzte Sampling-Matrix S, wobei M in der Regel ein kleines ganzzahliges Vielfaches von N ist. Für die MFS berichten die Autoren von [MKB+08] von guten Erfahrungen mit $M = 3 \cdot N$; bei einer Kollokationsmethode ist $M = N$.
- $O(d \cdot M)$ für die Speicherung der c_i
- $O(M \cdot N)$ für die Speicherung der Matrix A
- nur in der SIEM: $O(N)$ für die Speicherung der Koeffizienten $\vec{s}$
- $O(N \cdot N)$ für die Pseudoinverse bzw. die LR-Zerlegung von A
- $O(N \cdot n)$ für die jeweils N Basiskoeffizienten der u_i

Die SIEM verwendet als einziges Verfahren überall komplexe Zahlen, d. h. jeder Matrix-/Vektoreintrag benötigt mindestens doppelt so viel Speicher.

Der Punkt, der hier am meisten ins Gewicht fällt, ist die $M \times N$-Matrix A sowie die letztendlich berechneten n baryzentrischen Koordinaten für jedes p_i. Hier hängt es von der Anwendung ab, für wie viele Punkte p_i die Koordinaten berechnet werden sollen, und ob die Größe der Matrix A ein relevanter Faktor ist. [31]

4.5.3 Laufzeit

Aus Tabelle 1 lässt sich entnehmen, dass die Laufzeit im Wesentlichen durch vier Punkte dominiert wird:

1. Assemblierung der Matrix A
2. Zerlegen/Invertieren der Matrix A
3. n-mal: Berechnung der Koeffizienten $\vec{u_i}$ aus der zerlegten Matrix
4. $(m \cdot n)$-mal: Auswertung einer Funktion ψ_i an einer Stelle p_k

Diese Punkte sollen nun einzeln untersucht werden.

[31] Zum Vergleich: Bei der Methode der linearen Finiten Elemente ist die Matrix dünn besetzt, hat aber Zeilen und Spalten proportional zur Anzahl der inneren Gitterpunkte. Bei vergleichbarer Gitterweite ist diese Anzahl auch in der Größenordnung $O(N^2)$, d. h. die Anzahl der von Null verschiedenen Elemente ist auch in $O(N^2)$.

1. In jedem der vorgestellten Verfahren wird die Matrix A mit unterschiedlichen Werten assembliert. Bei der Berechnung dieser Werte hebt sich die MFS jedoch deutlich von allen anderen Verfahren ab, denn es müssen dafür keine Integrale berechnet werden. In der MFS ist

$$a_{i,j} = s_{x_j}(c_i),$$

wobei die Singularitätenfunktion die Gestalt (2.2) hat und in allen Dimensionen sehr schnell und einfach zu berechnen ist.

In allen anderen Verfahren muss hier jedoch der Grenzwert eines Integraloperators berechnet werden:

$$a_{i,j} - \mathrm{i} \cdot a_{i,j+1} = \frac{1}{2} \cdot \lambda_j(c_i) + \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \mathrm{C.\,H.} \oint_{\partial\Omega} \frac{\lambda_j(z)}{z - c_i} \,\mathrm{d}z \tag{CVBEM}$$

$$a_{i,j} = -\frac{1}{2} \cdot \lambda_j(c_i) + \mathrm{C.\,H.} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial s_{c_i}}{\partial \nu}(y) \cdot \lambda_j(y) \,\mathrm{d}\sigma_y \tag{BEM}$$

$$a_{i,j} = \lambda_j(c_i) - \mathrm{C.\,H.} \int_{\partial\Omega} A(c_i, z) \cdot \lambda_j(z) \,\mathrm{d}\sigma_z \tag{SIEM}$$

Das Integrationsgebiet der auftretenden Integrale reduziert sich auf den Träger von λ_j; bei geschickter Wahl der c_i, einer unstetigen Basis und der hier verwendeten Variante der BEM sind die Integrale außerdem nicht-singulär[32] und können mit Gauss-Legendre-Verfahren ausgewertet werden.

Der Aufwand, diese Integrale akkurat zu berechnen, hängt bei lokalem Träger zwar nicht von N oder M ab, erfordert aber doch einen deutlich höheren Aufwand als die Berechnung des Matrixeintrags in der MFS; bei CVBEM und SIEM findet die Integration außerdem mit komplexen Zahlen statt.

In allen Fällen ist es prinzipiell möglich, eine geschlossene Darstellung des Integrals zu finden. Es ist jedoch fraglich, ob die Auswertung eines entsprechenden geschlossenen Ausdrucks tatsächlich immer schneller vonstatten geht als eine entsprechende Quadraturformel.

2. Alle Verfahren müssen die $M \times N$-Matrix A so präparieren, dass im Anschluss eine schnelle Berechnung der $\vec{u_i}$ aus $\vec{\varphi_i}$ möglich ist, in Tabelle 1 wurde dafür beispielhaft die Pseudoinverse A^+ genannt. Es gibt verschiedene Verfahren (z. B. über eine QR-, Singulärwert- oder LR-Zerlegung), eine solche Präparierung vorzunehmen, die alle in der einen oder anderen Weise bei den Verfahren zum Einsatz kommen könnten. Hier muss man anhand der konkreten Gestalt von A und dem Verhältnis von M und N eine Auswahl treffen, die Laufzeit liegt jedoch immer in der Größenordnung $O(M \cdot N^2)$.

3. Bei MFS, CVBEM und BEM steht auf der rechten Seite des (ggf. überbestimmten) Gleichungssystems $A \cdot \vec{u_i} = \vec{b_i}$ der Vektor der an den Kollokations-/Observationspunkten $c_1, \ldots, c_M$ ausgewerteten Funktion φ_i. Wegen der Linearität der Hütchenfunktion φ_i

[32] Wählt man den Ansatz des Einfachschichtpotentials, stimmt dies nicht mehr, vgl. Anhang C.

auf jeder Polygonkante, kann man $\vec{b_i}$ durch Multiplikation der $M \times n$-Sampling-Matrix S mit dem Vektor $\vec{\varphi_i} := \big(\varphi_i(v_1), \ldots, \varphi_i(v_n)\big)$ erhalten.

Wie in der Tabelle 1 notiert, kann man eine $N \times n$-Matrix $A' := A^+ \cdot S$ aufstellen und erhält dann die gesuchten Koeffizienten $\vec{u_i}$ durch Multiplikation von A' mit $\vec{\varphi_i}$. In der SIEM muss die Vorgehensweise leicht variiert werden, denn die rechte Seite des Gleichungssystems ist zwischen den Ecken des Polygons nicht stückweise linear. Man kann jedoch die rechte Seite $\vec{b}$ auch hier in ein Produkt aus Matrizen zerlegen,

$$\vec{b} = \big(s(c_i) \cdot \varphi(c_i)\big)_{i=1,\ldots,M} = \begin{pmatrix} s(c_1) & & \\ & \ddots & \\ & & s(c_M) \end{pmatrix} \cdot S \cdot \vec{\varphi} = \operatorname{diag}(\vec{s}) \cdot S \cdot \vec{\varphi},$$

und kann dann mit $A' := A^+ \cdot \operatorname{diag}(\vec{s}) \cdot S$ genau wie bei den anderen Verfahren vorgehen.

Da in $\vec{\varphi_i}$ bei den Hütchenfunktionen der i-te Eintrag den Wert 1, alle anderen Einträge den Wert 0 haben, erhält man den Vektor der Basiskoeffizienten $\vec{u_i}$ einfach als i-te Spalte von A', d. h. der Aufwand zur Lösung des Gleichungssystems beschränkt sich auf das Auslesen der Werte von A'.

4. Bei der Auswertung der Koordinatenfunktion ψ_i an der Stelle p_k stellt sich die Situation ähnlich wie bei der Assemblierung der Matrix A dar. In der MFS sind lediglich alle Singularitätenfunktionen an p_k auszuwerten und mit den jeweiligen Koeffizienten zu multiplizieren.

   Bei CVBEM und BEM sind die auf $\partial\Omega$ bestimmten Funktionen u_i mittels Cauchy-Transformation bzw. Doppelschichtpotential nach innen fortzusetzen und an p_k auszuwerten. Dabei muss wieder für jede Basisfunktion λ_j auf $\partial\Omega$ ein (im Falle der CVBEM komplexes) Randintegral ausgewertet werden.

   Bei der SIEM müssen für jede Auswertung eines ψ_i an einer Stelle sogar vier Randfunktionen per Cauchy-Transformation nach innen fortgesetzt werden.

   Bei der einmaligen Assemblierung der Matrix A, die mit $O(M \cdot N)$ in ihrer asymptotischen Laufzeit hinter der Zerlegung/Invertierung von A mit $O(M \cdot N^2)$ bleibt, fällt die durch die Auswertung der Randintegrale benötigte zusätzliche Zeit u. U. kaum ins Gewicht. Bei den $n \cdot k$ Auswertungen der harmonischen Koordinatenfunktionen macht sich dieser Zusatzaufwand jedoch deutlich stärker bemerkbar.

4.5.4 Bemerkungen

Laufzeit Aus asymptotischer Sicht ist die Laufzeit aller vorgestellten Verfahren gleich. Näher betrachtet unterscheidet sich jedoch die MFS deutlich von den anderen drei Verfahren:

- Auf $\partial\Omega$ muss in dem Sinne kein Gitter konstruiert werden, als dass bei der MFS nur eine Punktwolke für die RBF-Zentren notwendig ist. Im Gegensatz zu den anderen Verfahren werden keine Gitterelemente und noch nicht einmal Nachbarschaftsinformationen

benötigt. Daher gibt es einen Laufzeitvorteil gegenüber den anderen Methoden, die zur Auswertung von Integralen ein elementbasiertes Gitter benötigen.

- Die Assemblierung der Matrix A sowie die Auswertung der berechneten Lösung geht bei der MFS deutlich schneller vonstatten als bei den anderen Verfahren, da bei diesen Randintegrale berechnet werden müssen.

- Die MFS hat einen geschlossen ausdrückbaren Gradienten. Bei Darstellungen der Lösung U als Cauchy-Transformation einer Randfunktion u ist dies über die verallgemeinerte Cauchy-Integralformel

$$U'(a) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \oint_{\partial\Omega} \frac{u(z)}{(z-a)^2} \, \mathrm{d}z$$

  zwar ebenfalls möglich, die Auswertung dauert aber deutlich länger.[33]

Numerische Approximation Bei der Approximation der exakten Lösung im Grenzfall unterscheidet sich die MFS ebenfalls von den anderen Verfahren:

- Die MFS ist die einzige der vorgestellten Methoden, die keine umfassende Theorie als Grundlage hat, die die Existenz einer exakten Lösung sichert.

- Da der Wert der $s_a(x)$ nur vom euklidischen Abstand $\|a-x\|$ abhängt (auch wenn die Verbindungsstrecke von a und x nicht vollständig in Ω liegt), kann es bei nicht-konvexen Gebieten passieren, dass eine Singularitätenfunktion für zwei Observationspunkte auf verschiedenen Kanten fast identische Werte annimmt. Dies kann zu einer fast-singulären Matrix A und damit einer schlechten Approximation führen, vgl. Abbildung 23.

- In allen Verfahren treten numerische Schwierigkeiten auf, sobald die berechnete Lösung des Dirichlet-Problems an einem Punkt x nahe am Rand ausgewertet werden soll, da überall der Term $\ln(\|a-x\|)$ bzw. $\|a-x\|^{-k}$ auftritt. In der MFS ist der Abstand $\|a-x\|$ nach unten durch den Abstand der RBF-Zentren von $\partial\Omega$ beschränkt, so dass sich die Probleme hier in Grenzen halten. In den anderen Verfahren gibt es dafür jedoch keine untere Schranke, so dass für $x \to a$ spezielle Quadraturformeln für fast-singuläre Integranden verwendet werden sollten.

Implementierung Beim Aufwand für die Implementierung lässt sich keine so deutliche Aufteilung in zwei Gruppen vornehmen, hier stellt sich das Bild differenzierter dar.

[33] Der Gradient ist wichtig, wenn man nicht für einen Punkt x die harmonischen Koordinaten $\psi(x) := \big(\psi_1(x), \ldots, \psi_n(x)\big)$ erhalten, sondern für ein gegebenes Koordinatentupel $\alpha := (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ den Punkt $x = \psi^{-1}(\alpha)$ berechnen möchte, wie beispielsweise bei der Gittergenerierung (vgl. Seite 6) notwendig. Hier muss ein nichtlineares Gleichungssystem gelöst werden; dies kann z. B. mit dem mehrdimensionalen Newton-Verfahren geschehen, für das an jedem Punkt in Omega die Jacobi-Matrix von ψ schnell berechenbar sein muss.

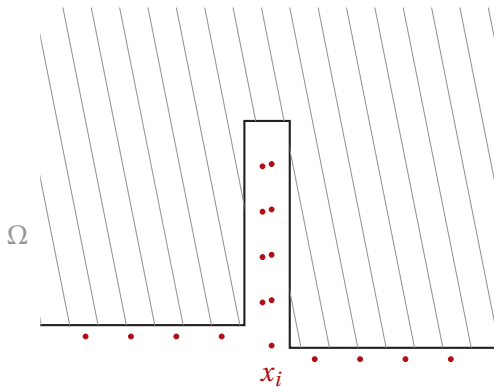


Abbildung 23: Eine Situation, bei der die MFS anfällig für numerische Probleme ist.

- Die MFS hat unbestritten den geringsten Aufwand in der Implementierung. Die Generierung eines Gitters auf $\partial\Omega$ entfällt, die Matrix A kann mittels simpler Berechnungen assembliert werden und die Auswertung der Lösung gestaltet sich ebenso einfach. Die dem Verfahren zugrundeliegende Idee ist einfach zu verstehen und ermöglicht ein einfaches Debugging.

  Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde im JAVAVIEW-Framework ein Workshop zur Deformation von 2D-Geometrien mittels harmonischer Koordinaten entwickelt, der in einer Variante die MFS verwendet. Dieser Workshop wurde für die Deformation in Abbildung 5 verwendet.

- CVBEM und BEM basieren auf der gleichen Idee, wie die Ähnlichkeit der Namen schon andeutet. In der Tat gibt es, wie in dieser Arbeit gezeigt, eine Variante der BEM, die äquivalent zur CVBEM ist.

  Die Autoren der CVBEM geben eine einfachere theoretische Grundlage als Alleinstellungsmerkmal ihrer Methode im Vergleich zur BEM an. Darüber mag man geteilter Meinung sein, in jedem Fall ist jedoch komplexwertige Arithmetik für die Implentierung notwendig, was die Verwendbarkeit externer Bibliotheken einschränkt.

  In beiden Verfahren müssen ähnliche singuläre bzw. fast-singuläre Integrale ausgewertet werden, was eine intensive Beschäftigung mit Quadraturformeln erfordert.

- Für die SIEM können als untere Schranke für die Komplexität der Implementierung BEM bzw. CVBEM vorausgesetzt werden, da die dort notwendigen Schritte in ähnlicher Form auch alle in der SIEM auftreten. Dort kommen jedoch noch weitere Schritte hinzu, die ebenfalls eine gewisse Komplexität mitbringen; in dieser Arbeit wurden einige Schritte aus dem Verfahren erstmalig auf polygonalen Gebieten angewendet.

  Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde für den oben genannten JAVAVIEW-Workshop zur Geometrie-Deformation auch die SIEM als möglicher Algorithmus implementiert. Die Plots von Cauchy- und Szegő-Kern in Abbildung 22 sind als Nebenprodukt dieser Implementierung entstanden.

5 Zusammenfassung & Ausblick

In den vorherigen Abschnitten wurden vier Verfahren vorgestellt und analysiert, die zur Lösung des Dirichlet-Problems bzw. der Berechnung harmonische Koordinaten herangezogen werden können. Steht die Entscheidung für eines dieser Verfahren an, kann man sich an folgenden Kriterien orientieren:

- In $d = 2$ bietet die CVBEM für Berechnung harmonischer Koordinaten eine echte Untermenge der BEM. Bei der CVBEM muss jedoch mit komplexen Zahlen gerechnet werden, was im Vergleich mit der BEM bei einem ähnlichen Ergebnis für eine höhere Laufzeit sorgt.

  Ein ausschlaggebendes Kriterium *für* die CVBEM kann jedoch sein, dass die berechneten Koeffizienten gleichzeitig die harmonisch konjugierte Funktion von U bestimmen.

- Die SIEM kann ebenfalls nur für $d = 2$ angewendet werden. Aufgrund der Komplexität der Implementierung und dem hohen Aufwand, der zur Berechnung der Lösung notwendig ist (bei gleichzeitigem Fehlen von Konvergenzresultaten), ist von der Verwendung der SIEM zur Berechnung harmonischer Koordinaten eher abzuraten.

  Die in dem Verfahren verwendete Methode, den Szegő-Kern zu berechnen, ist mit der in dieser Arbeit entwickelten Berechnung auf polygonalen Gebieten, jedoch für andere Anwendungen von Interesse (vgl. Anhang D).

- Die MFS ist ein in allen Dimensionen anwendbares, schnelles Verfahren mit leichter Implementierbarkeit. Für prototypische Entwicklungen oder Anwendungen, bei denen Geschwindigkeit und nicht numerische Genauigkeit im Vordergrund steht, ist die MFS eine gute Wahl. Bei nicht-konvexen Gebieten ist dabei besondere Sorgfalt im Platzieren der RBF-Zentren geboten.

- Die BEM ist wie die MFS in allen Dimensionen anwendbar und darüber hinaus in vielen Varianten verfügbar. Der hier vorgestellte Algorithmus als Kombination von indirekter Methode mit dem Doppelschichtpotential bei Verwendung eines Kollokationsverfahrens ist allerdings bereits eine der einfachsten Varianten. Die Implementierung ist deutlich komplizierter als bei der MFS, es gibt jedoch in der Literatur auch entsprechende Konvergenzresultate.

  Für Anwendungen, bei denen die numerische Genauigkeit im Vordergrund steht oder bei denen häufig nicht-konvexe Gebiete vorkommen, ist die BEM in einer entsprechenden Variante zu empfehlen.

Für eine zukünftige Vertiefung gibt es mehrere mögliche Richtungen:

- Die Vorteile der MFS zur Berechnung harmonischer Koordinaten werden durch die bei ungünstiger Wahl der RBF-Zentren entstehenden numerischen Probleme teilweise wieder aufgehoben.

  Hier würde sich eine Untersuchung anbieten, inwieweit man durch geschickte Platzierung der Singularitätenfunktionen oder adaptives Vorgehen Konvergenzresultate erzielen kann.

- Bei der Bewertung der MFS wurde genannt, dass der Gradient der berechneten Koordinatenfunktionen ψ_i bzw. die Jacobi-Matrix von $\psi := (\psi_1, \ldots, \psi_n)$ schnell berechenbar ist. Unter Verwendung eines multidimensionalen Newton-Verfahrens ließe sich zu einem gegebenen Koordinatentupel α damit schnell ein Punkt $x \in \Omega$ mit den baryzentrischen Koordinaten α finden.

  Eine interessante Forschungsfrage wäre, ob man mit Hilfe dieser Zuordnung $\alpha \mapsto x$ numerisch wertvolle Gitter in Ω für andere Anwendungen generieren kann bzw. inwieweit ein solches Verfahren schon angewendet wird.

- Die in der SIEM vorgestellte und auf polygonale Gebiete verallgemeinerte Methode der Bestimmung des Szegő-Kerns nach [KT86] kann unter anderem für die Berechnung von *Riemann-Abbildungen* verwendet werden, vgl. Anhang D.

  Hier wäre eine Implementierung dieses Verfahrens auf beliebigen Polygonen interessant. Kombinieren lässt sich das mit der Frage, wie dieses Verfahren modifiziert werden kann, um die drei Freiheitsgrade einer Riemann-Abbildung so zu wählen, dass das Resultat eine visuell hochqualitative Abbildung ist.

Literatur

[AF03] ABLOWITZ, Mark J.; FOKAS, Athanassios S.: Complex Variables – Introduction and Applications. Second Edition. Cambridge University Press, 2003

[Bel90] BELL, Steven R.: Solving the Dirichlet Problem in the Plane by Means of the Cauchy Integral. In: *Indiana Univ. Math. J.* 39 (1990), S. 1355–1371

[Bel92] BELL, Steven R.: The Cauchy transform, potential theory, and conformal mapping. CRC Press, 1992

[Bra07] BRAESS, Dietrich: Finite Elemente. Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie. Berlin, Heidelberg, New York : Springer, 2007

[BS07] BOBENKO, Alexander I.; SPRINGBORN, Boris A.: A Discrete Laplace-Beltrami Operator for Simplicial Surfaces. In: *Discrete Comput. Geom.* 38 (2007), Nr. 4, S. 740–756

[Cro93] CROW, John A.: Quadrature of Integrands with a Logarithmic Singularity. In: *Mathematics of Computation* 60 (1993), Nr. 201, S. 297–301

[DM06] DEROSE, Tony; MEYER, Mark: Harmonic Coordinates / Pixar. Version: 2006. http://graphics.pixar.com/library/HarmonicCoordinates/paper.pdf. 2006. – Forschungsbericht

[DMJ+07] DEROSE, Tony; MEYER, Mark; JOSHI, Pushkar; GREEN, Brian ; SANOCKI, Tom: Harmonic Coordinates for Character Articulation. In: *ACM Trans. Graph.* 26 (2007), Nr. 3, S. 71

[DR75] DAVIS, Philip J.; RABINOWITZ, Philip: Methods of numerical integration. Academic Press, New York, 1975

[Far02] FARIN, Gerald: Curves and surfaces for CAGD: a practical guide. San Francisco, CA, USA : Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2002

[FB06] FREITAG, Eberhard; BUSAM, Rolf: Funktionentheorie 1. Springer, 2006 (Springer-Lehrbuch)

[FHK06] FLOATER, Michael S.; HORMANN, Kai ; KÓS, Géza: A General Construction of Barycentric Coordinates over Convex Polygons. In: *Advances in Computational Mathematics* 24 (2006), S. 311–331

[FK98] FAIRWEATHER, Graeme; KARAGEORGHIS, Andreas: The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems. In: *Advances in Computational Mathematics* 9 (1998), S. 69–95

[Flo03] FLOATER, Michael S.: Mean value coordinates. In: *Computer Aided Geometric Design* 20 (2003), Nr. 1, S. 19–27

[GKB+98] GREHN, Joachim; KRAUSE, Joachim; BOLZ, Joachim; KRÜGER, Herwig; SCHMIDT, Herbert K. ; SCHWARZE, Heiner; GREHN, Joachim (Hrsg.); KRAUSE, Joachim (Hrsg.): Metzler Physik. 3. Auflage. Schroedel, 1998

[Gli09] GLICKENSTEIN, David: Discrete conformal variations and scalar curvature on piecewise flat two and three dimensional manifolds. arXiv:0906.1560v1 [math.DG], 2009

[Gou71] GOURAUD, Henri: Continuous shading of curved surfaces. In: *IEEE Transactions on Computers* C-20 (1971), Nr. 6, S. 623–629

[GT01] GILBARG, David; TRUDINGER, Neil S.: Elliptic Partial Differential Equations of Second Order. Berlin, Heidelberg, New York : Springer, 2001 (Classics in Mathematics)

[Hac86] HACKBUSCH, Wolfgang: Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen. Stuttgart : Teubner, 1986 (Teubner Studienbuecher: Mathematik)

[HG84] HROMADKA II, Theodore V.; GUYMON, G. L.: A complex variable boundary element method: Development. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 20 (1984), S. 25–37

[HL87] HROMADKA II, Theodore V.; LAI, Chintu: The Complex Variable Boundary Element Method in Engineering Analysis. Springer, 1987

[HS08] HORMANN, Kai; SUKUMAR, Natarajan: Maximum Entropy Coordinates for Arbitrary Polytopes. In: *Computer Graphics Forum* 27 (2008), Nr. 5, S. 1513–1520

[Jos98] JOST, Jürgen: Partielle Differentialgleichungen. Springer, 1998

[JSW05] JU, Tao; SCHAEFER, Scott ; WARREN, Joe: Mean value coordinates for closed triangular meshes. In: *ACM Trans. Graph.* 24 (2005), Nr. 3, S. 561–566

[Kle08] KLENKE, Achim: Wahrscheinlichkeitstheorie. 2., korrigierte Auflage. Springer, 2008

[KS78] KERZMAN, Norberto; STEIN, Elias M.: The Cauchy kernel, the Szegő kernel, and the Riemann mapping function. In: *Math. Ann.* (1978), Nr. 1, S. 85–93

[KS07] KORNHUBER, Ralf; SCHÜTTE, Christof: Numerik von partiellen Differentialgleichungen. Vorlesungsskript, 2007

[KT86] KERZMAN, Norberto; TRUMMER, Manfred R.: Numerical conformal mapping via the Szegő kernel. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 14 (1986), S. 111 – 123

[LKCOL07] LIPMAN, Yaron; KOPF, Johannes; COHEN-OR, Daniel ; LEVIN, David: GPU-assisted positive mean value coordinates for mesh deformations. In: *SGP '07: Proceedings of the fifth Eurographics symposium on Geometry processing*. Aire-la-Ville, Switzerland, Switzerland : Eurographics Association, 2007, S. 117–123

[LLCO08] LIPMAN, Yaron; LEVIN, David ; COHEN-OR, Daniel: Green Coordinates. In: *ACM Trans. Graph.* 27 (2008), Nr. 3, S. 1–10

[MKB+08] MARTIN, Sebastian; KAUFMANN, Peter; BOTSCH, Mario; WICKE, Martin ; GROSS, Markus: Polyhedral Finite Elements Using Harmonic Basis Functions. In: *Computer Graphics Forum* 27 (2008), Nr. 5, S. 1521–1529

[Mö27] MÖBIUS, August F.: Der barycentrische Calcul. Ein neues Hülfsmittel zur analytischen Behandlung der Geometrie. Johann Ambrosius Barth, 1827

[Nys30] NYSTRÖM, Evert J.: Über die Praktische Auflösung von Integralgleichungen mit Anwendungen auf Randwertaufgaben. In: *Acta Mathematica* 54 (1930), S. 185–204

[Pho75] PHONG, Bui T.: Illumination for computer generated pictures. In: *Commun. ACM* 18 (1975), Nr. 6, S. 311–317

[Ple08] PLEMELJ, Josip: Ein Ergänzungssatz zur Cauchyschen Integraldarstellung analytischer Funktionen, Randwerte betreffend. In: *Monatshefte für Mathematik* 19 (1908), S. 205–210

[Poz02] POZRIKIDIS, Costas: A Practical Guide to Boundary Element Methods with the Software Library BEMLIB. CRC Press, 2002

[PP93] PINKALL, Ulrich; POLTHIER, Konrad: Computing Discrete Minimal Surfaces and Their Conjugates. In: *Experimental Mathematics* 2 (1993), S. 15–36

[RLF09] RUSTAMOV, Raif; LIPMAN, Yaron ; FUNKHOUSER, Thomas: Interior Distance Using Barycentric Coordinates. In: *Computer Graphics Forum* 28 (2009), Nr. 5

[RM10] ROSSMANN, Jürgen; MAZ'YA, Vladimir: Elliptic equations in polyhedral domains. American Mathematical Society, 2010

[Rus08] RUSTAMOV, Raif: Boundary Element Formulation of Harmonic Coordinates / Department of Mathematics, Purdue University. Version: 2008. http://www.math.purdue.edu/~rustamov/bem_draft.pdf. 2008. – Forschungsbericht

[Sal] SALTER, Tom: Beauty is only a pixel deep. http://www.ntsc-uk.com/feature.php?featuretype=tec&fea=BeautyPixelDeep, abgerufen am 06.11.2010,

[SS04] SAUTER, Stefan; SCHWAB, Christoph: Randelementmethoden: Analyse, Numerik und Implementierung schneller Algorithmen. Teubner, 2004

[Tru86] TRUMMER, Manfred R.: An Efficient Implementation of a Conformal Mapping Method Based on the Szegö Kernel. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 23 (1986), Nr. 4, S. 853–872

[Wac75] WACHSPRESS, Eugene L.: A rational finite element basis. Academic Press, New York, 1975

[War96] WARREN, Joe: Barycentric Coordinates for Convex Polytopes. In: *Advances in Computational Mathematics 6*, 1996, S. 97–108

[War08] WARDETZKY, Max: Convergence of the Cotangent formula – an overview. In: BOBENKO, Alexander I. (Hrsg.); SULLIVAN, John M. (Hrsg.); SCHRÖDER, Peter (Hrsg.) ; ZIEGLER, Günter M. (Hrsg.): *Discrete Differential Geometry*. Birkhäuser Basel, 2008 (Oberwolfach Seminars), Kapitel 15, S. 275–286

[WBCG09] WEBER, Ofir; BEN-CHEN, Mirela ; GOTSMAN, Craig: Complex Barycentric Coordinates with Applications to Planar Shape Deformation. In: *Comput. Graph. Forum* 28 (2009), Nr. 2, S. 587–597

[WBG07] WICKE, Martin; BOTSCH, Mario ; GROSS, Markus: A Finite Element Method on Convex Polyhedra. In: *Computer Graphics Forum* 26 (2007), Nr. 3, S. 355–364

[Wer07] WERNER, Dirk: Funktionalanalysis. Sechste Auflage. Springer, 2007

[WG10] WEBER, Ofir; GOTSMAN, Craig: Controllable conformal maps for shape deformation and interpolation. In: *ACM Trans. Graph.* 29 (2010), S. 78:1–78:11

[WMKG07] WARDETZKY, Max; MATHUR, Saurabh; KÄLBERER, Felix ; GRINSPUN, Eitan: Discrete laplace operators: no free lunch. In: *SGP '07: Proceedings of the fifth Eurographics symposium on Geometry processing*. Aire-la-Ville, Switzerland : Eurographics Association, 2007, S. 33–37

A Harmonische Funktionen und Brown'sche Bewegung

A.1 Physikalische Grundlagen

Brown'sche Bewegung (nach ROBERT BROWN, 1773–1858) ist der Prototyp einer vollständig zufälligen Teilchenbewegung. Dies bedeutet unter anderem, dass die Bewegung eines Teilchens nur von der aktuellen Position abhängt (der Prozess hat kein „Gedächtnis") und jede Richtung der weiteren Bewegung gleich wahrscheinlich ist.

Auf dieser Brown'schen Bewegung basiert der physikalische Prozess der *Diffusion* [GKB+98], bei dem sich Teilchen in einem Fluid auch ohne Einwirkung von Strömungen oder Krafteinwirkung von außen bewegen.[34] Auf einem mikroskopischen Level ist diese Bewegung zufällig, führt aber auf dem makroskopischen Level bei einer unterschiedlichen Verteilung eines Stoffes im Laufe der Zeit zum Ausgleich von Konzentrationsgefällen.

C: Konzentration $I \times \Omega \to \mathbb{R}$

Bei der mathematischen Untersuchung der Diffusion betrachtet man nicht das Verhalten der einzelnen Teilchen, sondern nur ihre Wirkung als Masse. Betrachtet man in einem abgeschlossenen System Ω in einem Zeitintervall $I := [0, T[$ die Konzentration $C\colon I \times \Omega \to \mathbb{R}$ eines Stoffes mit der Anfangskonzentration $C(0, x) := C_0(x)$, so ist die Veränderung der Konzentration im Laufe der Zeit durch das *2. Fick'sche Gesetz* (nach ADOLF EUGEN FICK, 1829–1901) gegeben:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \langle \nabla, D \cdot \nabla C \rangle \tag{A.1}$$

Dabei bezieht sich ∇ nur auf die Variablen des Raumes und D ist der *Diffusionskoeffizient*, der in Abhängigkeit von z. B. Temperatur und Druck, ein Maß für die „Beweglichkeit" von Teilchen ist. Bei einem Diffusionskoeffizienten D, der nicht von der Position x abhängt, reduziert sich (A.1) auf die Gleichung:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \Delta C \tag{A.2}$$

Da die sich durch Diffusion bewegenden Teilchen auch für den Wärmetransport innerhalb eines Körpers verantwortlich sind, gilt das Gesagte nicht nur für die Konzentration, sondern auch für die Temperatur; (A.2) ist deswegen auch als *Wärmeleitungsgleichung* bekannt.

Zur Berechnung des Gleichgewichtszustands, in dem auf makroskopischer Ebene keine Veränderung mehr stattfindet (d. h. die Zeitableitung verschwindet), muss die partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial C}{\partial t}(t, x) = \Delta C(t, x) = 0$$

gelöst werden. Zur Lösung dieser Gleichung sind in dieser Arbeit einige Verfahren vorgestellt worden. Dies wirft jedoch die Frage auf: Wenn ein Verfahren zur Lösung des Dirichlet-Problems den Grenzzustand des Diffusionsprozesses berechnen kann, kann dann nicht auch über eine Simulation der Brown'schen Bewegung eine Lösung des Dirichlet-Problems bestimmt werden?

[34] Die Diffusion als Teilchenbewegung unterscheidet sich damit von der *Konvektion*, die durch die Strömung innerhalb eines Fluids bedingt ist.

A.2 Mathematische Betrachtung

Die Modellierung von Teilchenverhalten als Differentialgleichung beruht im Grunde auf dem Gesetz der großen Zahlen. Anstatt das Verhalten der N Teilchen eines Fluids einzeln zu untersuchen, wird der Grenzfall $N \to \infty$ betrachtet. In dieser Hinsicht gilt beispielsweise auch die (vereinfachte) Aussage des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik, „Wärme fließt immer nur in Richtung geringerer Temperatur“, nur *fast sicher*.

Vor diesem Hintergrund ist zu verstehen, dass in der modernen Stochastik der Zusammenhang zwischen Brown'scher Bewegung – als stochastischer Prozess auch unter dem Namen *Wiener-Prozess* (nach NORBERT WIENER, 1894–1964) bekannt – und Dirichlet-Problem wohlbekannt ist. Um auf Definition zahlreicher stochastischer Begriffe (Martingal, Markov-Prozess, Itō-Formel, ...) verzichten zu können, sei [Kle08, Satz 25.37] im Folgenden nur prosaisch wiedergegeben.

Satz A.1 (Lösung des Dirichlet-Problems, stochastische Methode) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet, $\varphi\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$ eine stetige Funktion und $U\colon \overline{\Omega} \to \mathbb{R}$ die Lösung des Dirichlet-Problems zum Randwert φ.

Sei W eine in $a \in \Omega$ gestartete Brown'sche Bewegung und μ_a das Wahrscheinlichkeitsmaß auf $\partial\Omega$, das angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit W in einem gewissen Bereich von $\partial\Omega$ auftrifft. Dann hat U die Darstellung

$$U(a) = \int_{\partial\Omega} \varphi(x)\,\mathrm{d}\mu_a(x) \tag{A.3}$$

μ_a: harmonisches Maß für $a \in \Omega$
P_a: Wahrscheinlichkeitsdichte von μ_a

Wegen dieser Eigenschaft heißt μ_a *harmonisches Maß*. Die *Wahrscheinlichkeitsdichte* von μ_a, also diejenige Funktion P_a mit $\int_{\partial\Omega} \varphi(x)\,\mathrm{d}\mu_a(x) = \int_{\partial\Omega} \varphi(x) \cdot P_a(x)\,\mathrm{d}\sigma_x$ ist fast überall identisch mit dem Poisson-Kern aus (2.6), denn nach Satz A.1 und Korollar 2.9 gilt:

$$\int_{\partial\Omega} p_a(x) \cdot \varphi(x)\,\mathrm{d}\sigma_x = U(a) = \int_{\partial\Omega} \varphi(x)\,\mathrm{d}\mu_a(x) = \int_{\partial\Omega} \varphi(x) \cdot P_a(x)\,\mathrm{d}\sigma_x$$

A.3 Algorithmische Umsetzung

Im Anfangsstadium dieser Diplomarbeit wurde versucht, einen Zusammenhang zwischen dem harmonischen Maß und der Geometrie von Ω zu finden, um daraus ein möglicherweise effizienteres Verfahren als die bisher bekannten herzuleiten.

Das obige Resultat zeigt, dass die Berechnung des harmonischen Maßes bzw. dessen Dichte genauso aufwändig ist wie die Berechnung des Poisson-Kerns bzw. einer Green'schen Funktion erster Art.

Es wurden ebenfalls einige Experimente durchgeführt, bei denen in einem Polygon Ω mit Ecken $v_1, \ldots, v_n$ die in einem Punkt a gestartete Brown'sche Bewegung durch *Random Walks* simuliert wurde. Die erhaltenen Histogramme der Aufschläge dieser Random Walks auf $\partial\Omega$ sind in Abbildung 24 gezeigt.

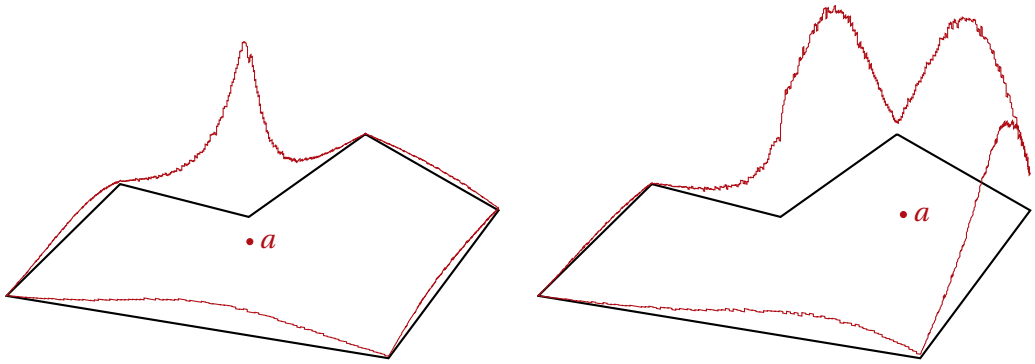


Abbildung 24: Ein im Punkt a gestarteter Random Walk trifft fast sicher irgendwann auf den Rand. Die gezeigten Histogramme zeigen die Anzahl der Aufschläge für verschiedene Startpunkte a und entsprechen der Wahrscheinlichkeitsdichte des harmonischen Maßes μ_a. Die Skalierung der Histogramme ist zur besseren grafischen Darstellung an die Bildhöhe angepasst; bei gleicher Achsenskalierung wäre das linke Histogramm etwa dreimal so hoch.

Dass diese Histogramme bei Skalierung tatsächlich das harmonische Maß approximieren, wurde überprüft, indem für ein dichtes Gitter aus Punkten $a_1, \ldots, a_M$ in Ω die Dichtefunktionen $P_{a_1}, \ldots, P_{a_M}$ berechnet und für jedes a_i die harmonischen Koordinaten $\psi_1(a_i), \ldots, \psi_n(a_i)$ über das Integral $\int_{\partial\Omega} \varphi_j(x) \cdot P_{a_i}(x)\, \mathrm{d}\sigma_x$ berechnet wurden.

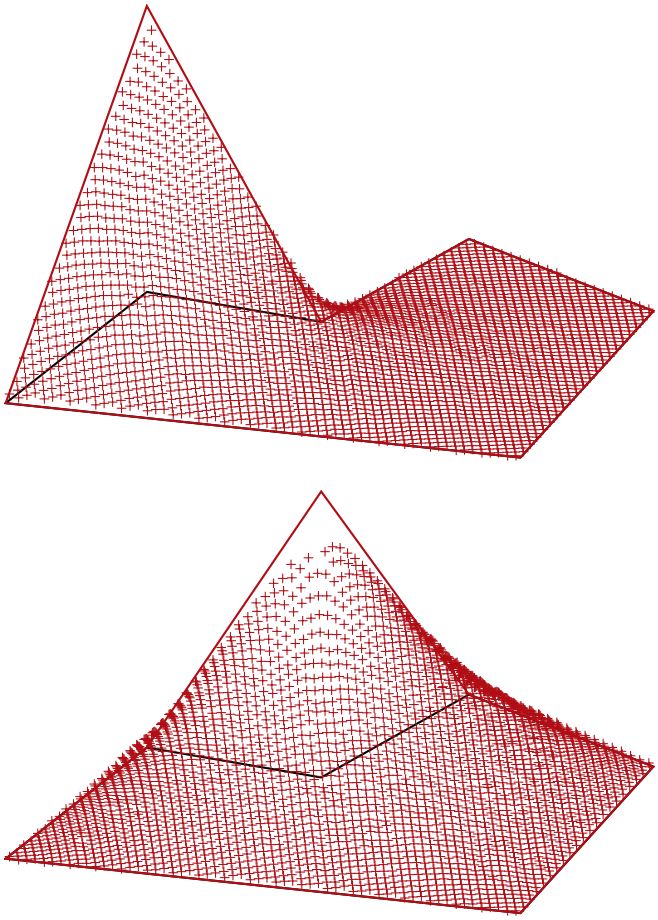


Abbildung 25: Die berechneten Wahrscheinlichkeitsverteilungen für jeden Punkt erlauben eine Berechnung der harmonischen Koordinaten. Die Grafiken zeigen einen Plot zweier harmonischer Koordinatenfunktionen für eine Menge von Gitterpunkten $\{a_1, \ldots, a_M\}$.

B Periodische lineare Spline-Interpolation

K: Integraloperator

Soll eine Integralgleichung der Form

$$K(u) = \varphi \tag{B.1}$$

auf einem Intervall $[a,b] \subset \mathbb{R}$ gelöst werden und kann man erwarten, dass die Lösung u eine stetige Funktion ist, verwendet man als Lösungsraum S^h häufig den Raum der stetigen, stückweise linearen Funktionen auf einem Gitter $x_1, \dots, x_{N+1}$.

$x_1, \dots, x_{N+1}$: Gitter für Lösungsraum S^h

$v_1, \dots, v_n$: Ecken des Polygons Ω

Repräsentiert (B.1) eine Integralgleichung auf dem Rand eines Polygons mit Ecken $v_1, \dots, v_n$, so muss für die Lösung insbesondere $u(x_1) = u(x_{N+1})$ gelten, d. h. die Funktion ist periodisch und die Dimension des Lösungsraums reduziert sich um 1. Bei Verwendung der Hütchenbasis werden für die Basisfunktionen $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ mit $\lambda_j(x_i) = \delta_{ij}$ also Koeffizienten u_j gesucht, so dass

$\lambda_1, \dots, \lambda_N$: Hütchenfunktionen

$$\sum_{j=1}^{N} u_j \cdot K(\lambda_j) \approx \varphi$$

gilt. Im Allgemeinen sollte man versuchen, an jeder Ecke des Polygons auch eine Hütchenfunktion zu platzieren, um charakteristische „Spitzen“ nicht versehentlich wegzuglätten.

Verwendet man die Nyström-Methode, so müssen N Kollokationspunkte $c_1, \dots, c_N$ gewählt werden, an denen die Gleichheit

$$\sum_{j=1}^{N} u_j \cdot K(\lambda_j)(c_i) = \varphi(c_i) \tag{B.2}$$

gelten soll.

Dies ist eine Aufgabe, die in gewisser Weise mit der *linearen Spline-Interpolation* verglichen werden kann. Dabei werden an N Gitterpunkten $c_1, \dots, c_N$ Funktionswerte $f_1, \dots, f_N$ vorgegeben und es soll eine Funktion $w = \sum_{j=1}^{N} w_j \cdot \lambda_j$ gefunden werden, so dass $w(c_i) = f(c_i)$ für alle c_i gilt. Die Lösbarkeit dieser Spline-Interpolations-Aufgabe ist also eine notwendige Voraussetzung, um (B.2) lösen zu können, denn $w = K(u)$ muss die vorgegebenen Funktionswerte annehmen. Bei der Wahl $c_i = x_i$, siehe Abbildung 26a, sind Existenz und Eindeutigkeit der Spline-Interpolations-Aufgabe offensichtlich, denn dann ist gerade $w_j = f_j$.

Nicht immer ist diese Wahl jedoch möglich: In der Szegő-Integralgleichungsmethode beispielsweise ist die rechte Seite φ an den Ecken des Polygons unstetig, somit kann dort kein Kollokationspunkt platziert werden. Eine alternative Wahl ist die Platzierung der Punkte in die Mitte eines Intervalls, d. h. $c_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$, siehe Abbildung 26b. Dabei treten allerdings bei der Frage nach der Existenz einer Lösung Probleme auf, wie folgender Satz zeigt:

Satz B.1 (Existenz periodischer linearer Splines) Sei $x_1, \dots, x_{N+1}$ ein Gitter und $c_1, \dots, c_N$ mit $c_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$. Dann gibt es genau dann eine stetige, auf $[x_i, x_{i+1}]$ lineare Funktion u mit $u(x_1) = u(x_N)$ und $u(c_i) = f_i$ für alle $f_1, \dots, f_N$, wenn N ungerade ist.

Beweis: Berechnung der Basiskoeffizienten aus den f_i.

P.1 Sei u eine stückweise lineare, periodische Funktion wie in den Voraussetzungen, d. h. u hat eine Darstellung $u = \sum_{j=1}^{N} u_j \cdot \lambda_j$, wobei λ_j die Hütchenfunktion zum Knoten x_j ist. Dann lassen sich die Werte von u an den Kollokationspunkten c_i durch Multiplikation der $N \times N$-Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & & & \\ & 1/2 & 1/2 & & \\ & & 1/2 & \ddots & \\ & & & \ddots & 1/2 \\ 1/2 & & & & 1/2 \end{pmatrix} \tag{B.3}$$

mit dem Koeffizientenvektor $(u_1, \ldots, u_N)$ berechnen, denn

$$u(c_i) = u(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) = \frac{u(x_i) + u(x_{i+1})}{2} = \frac{u_i + u_{i+1}}{2}$$

Es existiert also genau dann eine Funktion u mit $u(c_i) = f_i$ für *beliebige* $\{f_1, \ldots, f_N\}$, wenn A invertierbar ist.

P.2 Durch Entwicklung nach der ersten Spalte erhält man

$$\det A = 1/2 \cdot \det \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & & \\ & 1/2 & \ddots & \\ & & \ddots & 1/2 \\ & & & 1/2 \end{pmatrix} + (-1)^{1+N} \cdot 1/2 \cdot \det \begin{pmatrix} 1/2 & & & \\ 1/2 & 1/2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$= 1/2^N + (-1)^{1+N} \cdot 1/2^N = \begin{cases} 1/2^{N-1} & \text{falls } N \text{ ungerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

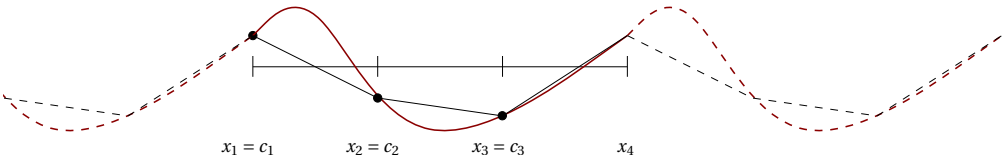
Folglich existiert nur dann zu beliebigen an den Kollokationspunkten $c_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$ vorgegebenen Funktionswerten f_i eine periodische, stückweise lineare Interpolante auf dem Gitter $x_1, \ldots, x_{N+1}$, wenn N ungerade ist. □

Jedoch birgt diese Wahl der c_i noch andere Probleme.

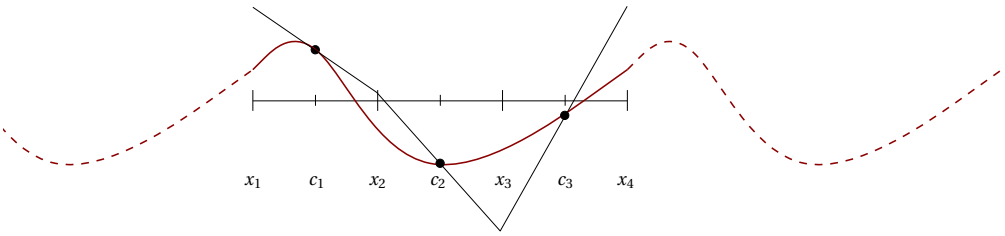
- Lokale Änderungen sind nicht mehr begrenzt, sondern haben globale Auswirkungen. Dazu kommt, dass sich solche Änderungen auch stark auswirken, denn die Matrix A aus (B.3) ist schlecht konditioniert: A^{-1} ist eine voll besetzte Matrix mit Einträgen ± 1, daher ist die Norm von A in $O(N)$.
- Die so entstehenden Splines haben häufig stark oszillierenden Charakter und approximieren die vorgegebene Funktion nur schlecht. Es ist nicht offensichtlich, dass es für $N \to \infty$ überhaupt eine Konvergenz (im Sinne der L^2-Norm) gibt.

In der Implementierung der SIEM im Rahmen dieser Arbeit wurde daher die Lösung gewählt, nur diejenigen Kollokationspunkte von den Spline-Stützstellen weg zu verschieben, die sich

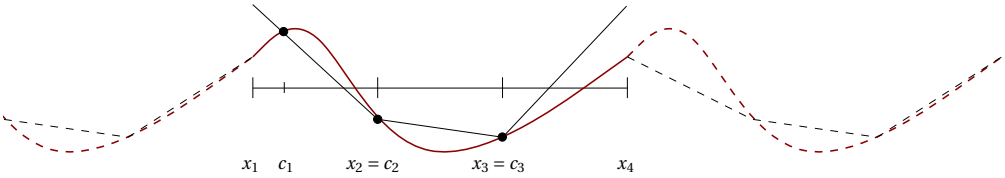
tatsächlich an unstetigen Stellen der rechten Seite befinden, siehe Abbildung 26c. Dadurch ist das Problem wieder lokaler Natur, es ist eine eindeutige Lösbarkeit gewährleistet und zumindest auf den nicht betroffenen Intervallen wird die Approximationseigenschaft der herkömmlichen linearen Splines geerbt.



(a): Die Kollokationspunkte fallen mit den Stützstellen des Splines zusammen. Je höher die Anzahl der Stützstellen, desto besser die Approximation an die vorgegebene Funktion.



(b): Szenario: An x_1 kann die vorgegebene Funktion nicht ausgewertet werden, die Kollokationspunkte werden daher in die Mitte jedes Intervalls gelegt. Es existiert nur für eine ungerade Anzahl von Intervallen überhaupt eine Lösung, beliebig große Fehler in der Approximation sind möglich.



(c): Szenario: An x_1 kann die vorgegebene Funktion nicht ausgewertet werden, daher wird der Kollokationspunkt c_1 in das Intervall $]x_1, x_2[$ hinein gelegt. Es existiert hier immer eine Lösung, für $c_1 \to x_1$ konvergiert der Spline gegen die Lösung aus 26a.

Abbildung 26: Verschiedene Möglichkeiten, die Kollokationspunkte für die lineare Spline-Interpolation einer gegebenen periodischen Funktion zu wählen.

C Integration singulärer Funktionen

V und K aus Kapitel 4.3 sind Integraloperatoren, die einer Funktion v eine andere Funktion der Form $a \mapsto \int_{\partial\Omega} k(a,x) \cdot v(x)\,\mathrm{d}\sigma_x$ zuordnen, wobei k eine Kernfunktion mit Singularität für $a = x$ ist. Nach [SS04, Bemerkung 5.1.13] sind die Kerne $k(a,x) = s_a(x)$ bzw. $k(a,x) = \frac{\partial s_a}{\partial \nu}(x)$ dieser Operatoren *Cauchy-singulär*, d. h. der *Cauchy'sche Hauptwert* (vgl. Abschnitt 4.4.1)

C. H. : Cauchy'scher Hauptwert

$$\text{C. H.} \int_{\partial\Omega} k(a,x) \cdot v(x)\,\mathrm{d}\sigma_x := \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\partial\Omega \setminus B_\varepsilon(a)} k(a,x) \cdot v(x)\,\mathrm{d}\sigma_x$$

existiert und stimmt nach [SS04, Bemerkung 5.1.8] mit dem uneigentlichen Integral überein.

Sei $A \in \{V, K\}$, $\mathcal{T}$ ein Simplex-Gitter auf $\partial\Omega$ und A_τ die Einschränkung des jeweiligen Integraloperators auf das Element $\tau \in \mathcal{T}$, also $A_\tau(v)(a) := \text{C. H.} \int_\tau k(a,x) \cdot v(x)\,\mathrm{d}\sigma_x$. Es ist nach [SS04, Lemma 5.1.14]:

$$A(v)(a) = \sum_{\tau \in \mathcal{T}} A_\tau(v)(a),$$

d. h. $A(v)$ kann durch Summation der einzelnen $A_\tau(v)$ berechnet werden. Dabei müssen zwei Fälle unterschieden werden:

1. Falls $a \notin \overline{\tau}$, kann $A_\tau(v)(a)$ ganz regulär durch bekannte Quadraturformeln für das Referenzelement approximiert werden.
2. Falls $a \in \overline{\tau}$, müssen spezielle Verfahren für Funktionen mit Singularitäten angewendet werden.

In diesem Abschnitt sollen Möglichkeiten der Integration von singulären Funktionen in $d = 2$ vorgestellt werden, wie sie bei der Randelementmethode auftreten können. Für den Fall $d \geq 3$ ist die Ausgangslage noch komplizierter; hier sei auf [SS04, Poz02] verwiesen.

Sei zunächst der Fall $d = 2$ betrachtet, d. h. $\partial\Omega$ ist ein Polygon mit Ecken $(v_1, \ldots, v_n)$, und $\mathcal{T}$ die Menge der Kanten $\tau_i := (v_i, v_{i+1})$. Sei mit τ_i gleichzeitig die Parametrisierung der Kante über $[0,1]$ bezeichnet, d. h.

τ_i: Kante (v_i, v_{i+1}) des Polygons

$\tau_i(t)$: Parametrisierung von (v_i, v_{i+1})

$$\tau_i(t) = (1-t) \cdot v_i + t \cdot v_{i+1} \quad \text{und} \quad \tau_i'(t) = v_{i+1} - v_i = \text{const.}$$

Sei $\{\hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_k\}$ eine polynomielle Basis auf $[0,1]$, die über die Parametrisierungen τ_i mittels $\lambda_j(\tau_i(t)) = \hat{\lambda}_j(t)$ eine polynomielle Basis $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_k\}$ auf den einzelnen Kanten induziert. Die (an den Ecken des Polygons möglicherweise unstetige) Funktion $u\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$ lässt sich dann in der Form

$\hat{\lambda}_j$: polynomielle Basisfunktion auf $[0,1]$

$$u(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{k} u_j^i \cdot \lambda_j(x)$$

mit (unbekannten) Koeffizienten u_j^i schreiben und es folgt:

u_j^i: Basiskoeffizient von u für λ_j auf τ_i

$$
\begin{aligned}
A(u)(a) &= \sum_{\tau \in \mathcal{T}} A_\tau(u)(a) \\
&= \sum_{i=1}^{n-1} \text{C. H.} \int_{\tau_i} k(a,x) \cdot u(x) \, \mathrm{d}\sigma_x \\
&= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{k} u_j^i \cdot \text{C. H.} \int_{\tau_i} k(a,x) \cdot \lambda_j(x) \, \mathrm{d}\sigma_x \\
&= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{k} u_j^i \cdot \text{C. H.} \int_0^1 k(a,\tau_i(t)) \cdot \hat{\lambda}_j(t) \cdot \left|\tau_i'\right| \mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

Der Term

$$
\int_0^1 k(a,\tau_i(t)) \cdot \hat{\lambda}_j(t) \cdot \left|\tau_i'\right| \mathrm{d}t \tag{C.1}
$$

ist für $a \notin \tau_i$ mittels herkömmlicher Quadraturformeln auswertbar, denn der Integrand ist genügend glatt. Für $a \in \tau_i$ hat k jedoch eine Singularität, d. h. hier müssen andere Methoden verwendet werden.

C.1 Einfachschichtpotential

Sei zunächst $A = V$ der Operator aus dem Einfachschichtpotential, d. h. $k(a,x) = s_a(x) = -\frac{1}{2\pi} \cdot \ln(\|x-a\|)$, und sei weiter $t_0 := {\tau_i}^{-1}(a)$. Es gibt hier mehrere Möglichkeiten, wie man das resultierende Integral

$$
-\frac{\left|\tau_i'\right|}{2\pi} \cdot \text{C. H.} \int_0^1 \ln(\|\tau_i(t_0) - \tau_i(t)\|) \cdot \hat{\lambda}_j(t) \, \mathrm{d}t \tag{C.2}
$$

numerisch auswerten kann.

1. Die Basisfunktionen $\hat{\lambda}_j$ sind polynomiell, also Linearkombinationen von Monomen der Form t^m. Man kann diese Basisfunktionen nun zerlegen und versuchen, (C.2) in ein Integral der Form

$$
\text{C. H.} \int_0^1 \ln(\left|s^* - s\right|) \cdot s^m \, \mathrm{d}s \tag{C.3}
$$

zu bringen und dafür eine geschlossene Darstellung in Abhängigkeit von t_0 und m zu

finden. Dies ist in der Tat möglich; es gilt:

$$\begin{aligned}
&-\frac{|\tau_i'|}{2\pi}\cdot \text{C. H.} \int_0^1 \ln(\|\tau_i(t_0)-\tau_i(t)\|)\cdot(t^m)\,\mathrm{d}t \\
&= -\frac{|\tau_i'|}{2\pi}\cdot \text{C. H.} \int_0^1 \ln(|t_0-t|\cdot\|v_{i+1}-v_i\|)\cdot(t^m)\,\mathrm{d}t \\
&= -\frac{|\tau_i'|}{2\pi}\cdot \text{C. H.} \int_0^1 \ln(|t_0-t|)\cdot(t^m)\,\mathrm{d}t \\
&\quad -\frac{|\tau_i'|}{2\pi}\cdot \int_0^1 \ln(\|v_{i+1}-v_i\|)\cdot(t^m)\,\mathrm{d}t \\
&= -\frac{|\tau_i'|}{2\pi}\cdot \text{C. H.} \int_0^1 \ln(|t_0-t|)\cdot(t^m)\,\mathrm{d}t - \frac{|\tau_i'|\cdot\ln(|\tau_i'|)}{2\cdot\pi\cdot(m+1)}
\end{aligned}$$

Das verbleibende Integral hat genau die gewünschte Form (C.3) und man kann mit Hilfe eines Computeralgebrasystems wie MAXIMA folgende geschlossene Darstellung berechnen:

$$\begin{aligned}
\text{C. H.} \int_0^1 \ln(|t_0-t|)\,\mathrm{d}t &= (1-t_0)\cdot\ln(1-t_0)+t_0\cdot\ln(t_0)-1 \\
\text{C. H.} \int_0^1 \ln(|t_0-t|)\cdot t\,\mathrm{d}t &= \frac{1}{2}\cdot\ln(\frac{t_0}{1-t_0})\cdot {t_0}^2-\frac{1}{2}\cdot {t_0}^1+\frac{1}{2}\cdot\ln(1-t_0)-\frac{1}{4} \\
\text{C. H.} \int_0^1 \ln(|t_0-t|)\cdot t^2\,\mathrm{d}t &= \frac{1}{3}\cdot\ln(\frac{t_0}{1-t_0})\cdot {t_0}^3-\frac{1}{3}\cdot {t_0}^2-\frac{1}{6}\cdot {t_0}^1+\frac{1}{3}\cdot\ln(1-t_0)-\frac{1}{9} \\
&\vdots \\
\text{C. H.} \int_0^1 \ln(|t_0-t|)\cdot t^m\,\mathrm{d}t &= \frac{1}{m+1}\cdot\ln(\frac{t_0}{1-t_0})\cdot {t_0}^{m+1}-\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{(i\cdot(m+1))}\cdot {t_0}^{m+1-i} \\
&\quad +\frac{1}{m+1}\cdot\ln(1-t_0)-\frac{1}{(m+1)^2}
\end{aligned}$$

Dieser Ansatz liefert also ein exaktes Ergebnis, erfordert aber die Zerlegung der Basisfunktionen in Monome und scheint bei der Implementierung aufwändig und fehleranfällig zu sein.

2. Ein anderer Ansatz ist die Verwendung von Quadraturformeln für Funktionen auf dem Intervall $[0,1]$ mit logarithmischer Singularität bei t_0. In der Literatur gibt es bekannte Lösungen für verschiedene Varianten dieser Aufgabe:
   - Funktionen auf $[0,1]$ der Form $f(x)\cdot x^{-\alpha}$ mit Singularität bei $x=0$ [DR75, 2.12.5]
   - Funktionen auf $[-1,1]$ der Form $f(x)\cdot(1-x)^{-\alpha}\cdot(1+x)^{-\beta}$ mit Singularitäten bei $x=\pm 1$ [DR75, 2.12.6]
   - Funktionen auf $[-a,a]$ mit Singularität bei 0 [DR75, 2.12.8]
   - Funktionen auf $[0,1]$ sder Form $\alpha(t)+\ln(t)\cdot\beta(t)$ für α und β Polynome [Cro93]

   Mit Ausnahme der Möglichkeit, (C.2) als Grenzwert von herkömmlichen Integralen

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{[a,b]\setminus B_\varepsilon(t_0)} f(t)\,\mathrm{d}t$$

(unter Verwendung einer Extrapolationsmethode) zu berechnen [DR75, 2.12.1], scheint es keine Methoden zu geben, die *genau* auf den gesuchten Typ von Quadraturformel passen. Es soll daher (C.2) in eine Summe zweier Integrale auf dem Intervall $[0,1]$ mit Singularität jeweils bei 0 zerlegt und diese mit den Formeln aus [Cro93] separat berechnet werden.[35] Die entsprechenden Auswertestellen und Gewichte sind in Tabelle 2 aufgelistet. Die unter N angegebenen Stellen und Gewichte integrieren Funktionen der Form $\alpha(t) + \ln(t) \cdot \beta(t)$ auf $[0,1]$ exakt, wenn α und β Polynome vom Grad $\leq N$ sind.

Tabelle 2: Quadraturgewichte für Funktionen der Form $\alpha(t) + \ln(t) \cdot \beta(t)$ auf $[0,1]$ nach [Cro93]

N	Stützstelle	Gewicht
0	0.36787 94411 71442 32159 55237 70161	1.00000 00000 00000 00000 00000 00000
1	0.88296 86513 76530 11759 59513 85185 $\cdot 10^{-1}$	0.29849 98937 05524 91470 84741 43289
	0.67518 64909 09887 20103 62743 16962	0.70150 01062 94475 08529 15258 56711
2	0.28811 66253 09518 31174 32844 63059 $\cdot 10^{-1}$	0.10333 07079 64928 64676 92515 92664
	0.30406 37296 12137 65261 08623 58639	0.45463 65259 70098 70884 06911 21425
	0,81166 92253 44078 11686 37051 77761	0.44203 27660 64972 64439 00572 85911
3	0.11802 59099 78449 18264 91730 11095 $\cdot 10^{-1}$	0.43391 02877 84143 91101 89836 96321 $\cdot 10^{-1}$
	0.14282 56799 77483 69513 68513 69176	0.24045 20976 59460 67597 84500 61567
	0.48920 15226 54574 47871 90313 05699	0.42140 34522 59775 93197 88150 24211
	0.87867 99740 69183 70280 76889 06265	0.29475 34213 02349 00094 08365 44590
4	0.56522 28205 08009 71359 27256 19673 $\cdot 10^{-2}$	0.21046 94579 18546 29119 00268 26421 $\cdot 10^{-2}$
	0.73430 37174 26522 73406 15889 38883 $\cdot 10^{-1}$	0.13070 55407 44446 69759 10762 54992
	0.28495 74044 62558 15371 45276 01926	0.28970 23016 71314 15684 15903 51057
	0.61948 22640 84778 38140 68089 43051	0.35022 03701 20398 71028 55468 04135
	0.91575 80830 04698 33378 46091 80928	0.20832 48416 71985 80616 27839 07174
5	0.30258 02137 54625 87097 29970 37526 $\cdot 10^{-2}$	0.11351 33881 72726 09440 49112 38284 $\cdot 10^{-2}$
	0.40978 25415 59506 15053 46596 31089 $\cdot 10^{-1}$	0.75241 06995 49165 22917 35628 91092 $\cdot 10^{-1}$
	0.17086 32955 26877 29472 51498 29786	0.18879 00416 15416 35460 95079 43772
	0.41325 57088 44793 24766 64814 55164	0.28582 07218 27227 31198 66834 80085
	0.70909 51467 90628 54395 00459 17084	0.28448 64278 91408 80004 51516 69844
	0.93823 95903 77167 09135 50205 94716	0.15431 03998 93758 40100 08094 93362
6	0.17596 52118 46577 42805 62642 84949 $\cdot 10^{-2}$	0.66326 66319 02570 51178 39049 89051 $\cdot 10^{-2}$
	0.24469 65071 25133 67427 64533 73497 $\cdot 10^{-1}$	0.45799 70797 84753 34125 57673 48120 $\cdot 10^{-1}$
	0.10674 80568 58788 95418 02597 81083	0.12384 02080 71318 19455 04895 64922
	0.27580 76412 95917 38307 78595 12057	0.21210 19260 23811 93010 79148 75456
	0.51785 51421 51833 71615 86689 61982	0.26139 06456 72007 72564 65806 06859
	0.77181 54853 62384 90027 46468 69494	0.23163 61802 90909 38431 88155 26104
	0.95284 13405 81090 55899 43065 88503	0.11859 86656 44451 72613 27836 41957

[35] Dies geht natürlich nur, weil der natürliche Logarithmus auf $[0,1]$ selbst schon ein endliches Integral hat. Wäre die Singularität z. B. vom Typ $\frac{1}{x}$, würde diese Methode so nicht funktionieren.

Die Transformation von (C.2) kann wie folgt durchgeführt werden:

$$
\begin{aligned}
&\text{C. H.} \int_0^1 \ln(\|\tau_i(t_0) - \tau_i(t)\|) \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t \\
&= \text{C. H.} \int_0^1 \ln(|t_0 - t| \cdot \|v_{i+1} - v_i\|) \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t \\
&= \text{C. H.} \int_0^{t_0} \ln(t_0 - t) \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t + \text{C. H.} \int_{t_0}^1 \ln(t - t_0) \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t \\
&\qquad + \int_0^1 \ln(|\tau_i'|) \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t \\
&= \text{C. H.} \int_0^1 \ln(t \cdot t_0) \cdot \hat{\lambda}_j((1-t) \cdot t_0) \cdot t_0\,\mathrm{d}t \\
&+ \text{C. H.} \int_0^1 \ln(t \cdot (1 - t_0)) \cdot \hat{\lambda}_j(t \cdot (1 - t_0) + t_0) \cdot (1 - t_0)\,\mathrm{d}t \\
&\qquad + \int_0^1 \ln(|\tau_i'|) \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t \\
&= \text{C. H.} \int_0^1 \ln(t) \cdot \hat{\lambda}_j((1-t) \cdot t_0) \cdot t_0\,\mathrm{d}t \\
&\qquad + \int_0^1 \ln(t_0) \cdot \hat{\lambda}_j((1-t) \cdot t_0) \cdot t_0\,\mathrm{d}t \\
&+ \text{C. H.} \int_0^1 \ln(t) \cdot \hat{\lambda}_j(t \cdot (1 - t_0) + t_0) \cdot (1 - t_0)\,\mathrm{d}t \\
&\qquad + \int_0^1 \ln(1 - t_0) \cdot \hat{\lambda}_j(t \cdot (1 - t_0) + t_0) \cdot (1 - t_0)\,\mathrm{d}t \\
&\qquad + \int_0^1 \ln(|\tau_i'|) \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

Sei also

$$
\begin{aligned}
\alpha(t) &:= \ln(t_0) \cdot \hat{\lambda}_j((1-t) \cdot t_0) \cdot t_0 + \ln(1 - t_0) \cdot \hat{\lambda}_j(t \cdot (1 - t_0) + t_0) \cdot (1 - t_0) + \ln(|\tau_i'|) \cdot \hat{\lambda}_j(t) \\
\beta(t) &:= \hat{\lambda}_j((1-t) \cdot t_0) \cdot t_0, + \hat{\lambda}_j(t \cdot (1 - t_0) + t_0) \cdot (1 - t_0),
\end{aligned}
$$

dann ist

$$
\begin{aligned}
&-\frac{|\tau_i'|}{2\pi} \cdot \text{C. H.} \int_0^1 \ln(\|\tau_i(t_0) - \tau_i(t)\|) \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t \\
&\qquad\qquad = -\frac{|\tau_i'|}{2\pi} \cdot \text{C. H.} \int_0^1 \alpha(t) + \ln(t) \cdot \beta(t)\,\mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

und dies ist genau die Sorte von Integralen, die mit den Formeln aus Tabelle 2 behandelt werden kann.

C.2 Doppelschichtpotential

Sei nun $A = K$, d. h.

$$k(a,x) = \frac{\partial s_a}{\partial \nu}(x) = \langle \nabla s_a(x), \nu \rangle = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\langle a - x, \nu \rangle}{\|a - x\|^2},$$

wobei ν die äußere Einheitsnormale an x auf $\partial\Omega$ ist. Zerlegt in Integrale über die einzelnen Polygonkanten, erhält man eine Summe von Integralen der Form:

$$\frac{|\tau_i'|}{2\pi} \cdot \text{C. H.} \int_0^1 \frac{\langle a - \tau_i(t), \nu_i \rangle}{(\|a - \tau_i(t)\|^2)} \cdot \hat{\lambda}_j(t)\,\mathrm{d}t \tag{C.4}$$

Hierbei ist ν_i die auf der Kante τ_i senkrecht stehende Normale, d. h. insbesondere ist ν auf $\partial\Omega$ eine stückweise konstante Funktion mit Unstetigkeiten an den Ecken v_i. Falls $a \notin \tau_i$, so ist der Integrand glatt und mittels herkömmlicher Quadraturformeln auswertbar. Für $a \in \tau_i$ erwartet man ähnliche Schwierigkeiten wie mit den logarithmischen Singularitäten im Fall des Einfachschichtpotentials, wird aber positiv überrascht: Da $a - \tau_i(t)$ für $a \neq \tau_i(t)$ senkrecht auf ν_i steht, verschwindet das Skalarprodukt und der Integrand ist auf der a enthaltenden Kante konstant 0.

Hier sei noch einmal an die Verwandtschaft zur Cauchy-Transformation erinnert. Für reellwertige Randfunktionen v gilt $\mathrm{Re}(\mathscr{C} v) = -\mathscr{D} v$; insbesondere gilt das auch in diesem Fall, denn auf τ_i ist:

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \int_0^1 \frac{v(\tau_i(t))}{\tau_i(t) - a} \cdot \tau_i'(t)\,\mathrm{d}t = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \int_0^1 \frac{v(\tau_i(t))}{((t - t_0) \cdot \tau_i'(t))} \cdot \tau_i'(t)\,\mathrm{d}t = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \int_0^1 \frac{v(\tau_i(t))}{(t - t_0)}\,\mathrm{d}t$$

und dies ist für reellwertiges v ein rein imaginärer Term.

D Szegő-Kern und Riemann'scher Abbildungssatz

Der Riemann'sche Abbildungssatz (nach GEORG FRIEDRICH BERNHARD RIEMANN, 1826–1866) besagt, dass sich jede einfach zusammenhängende echte Teilmenge $\Omega \subset \mathbb{C}$ biholomorph auf die offene Einheitsscheibe $B^2 \subset \mathbb{C}$ abbilden lässt [FB06, Theorem 4.5].[36] Für ein festes $a \in \Omega$ gibt es genau eine solche Riemann-Abbildung $H\colon \Omega \to B^2$ mit

B^2: Einheitskreisscheibe in $\mathbb{C}$
H: Riemann-Abbildung $\Omega \to B^2$

$$H(a) = 0 \quad \text{und} \quad H'(a) \in \mathbb{R}, \quad H'(a) > 0$$

Ein Satz von CONSTANTIN CARATHÉODORY (1873–1950) besagt, dass diese Abbildung auch stetig auf den Rand zu einer Abbildung $H\colon \overline{\Omega} \to \overline{B^2}$ fortgesetzt werden kann. Die Berechnung von H lässt sich über den Szegő-Kern bewerkstelligen:

Satz D.1 (Riemann-Abbildung via Szegő-Kern [Bel92, Theorem 8.1]) Sei Ω ein einfach zusammenhängendes, beschränktes Gebiet in $\mathbb{C}$ und $a \in \Omega$. Seien S_a der Szegő-Kern und L_a der Garabedian-Kern zu a und Ω, wie in Abschnitt 4.4 definiert. Dann ist die Riemann-Abbildung zum Punkt a durch

S_a: Szegő-Kern
L_a: Garabedian-Kern

$$H(z) = \frac{S_a(z)}{L_a(z)} \tag{D.1}$$

gegeben.

Beweis: Es wird gezeigt, dass $\frac{S_a}{L_a}$ die Riemann-Abbildung ist.

P.1 Zunächst sei [Bel92, Theorem 7.1] zitiert: Sei $\sigma\colon \Omega \to \mathbb{C}$ holomorph und sei stetig auf $\overline{\Omega}$ fortsetzbar. Sei $\lambda\colon \Omega\backslash\{a\} \to \mathbb{C}$ holomorph, habe eine einfache Polstelle mit Residuum $\frac{1}{2\pi}$ bei $z = a$ und sei stetig auf $\partial\Omega$ fortsetzbar. Wenn

$$\overline{\sigma(z)} = \frac{1}{\mathrm{i}} \cdot \lambda(z) \cdot T(z)$$

für $z \in \partial\Omega$, dann ist $\sigma = S_a$ und $\lambda = L_a$.

P.2 Sei H die Riemann-Abbildung zum Punkt a. Sei

$$\lambda(z) := \frac{S_a(z)}{H(z)} \quad \text{und} \quad \sigma(z) := H(z) \cdot L_a(z), \tag{D.2}$$

dann ist λ meromorph, hat eine einfache Polstelle bei $z = a$ und ist stetig auf $\partial\Omega$ fortsetzbar. Weiter ist σ holomorph auf Ω (die Polstelle von L_a bei $z = a$ wird von der Nullstelle von H ausgelöscht) und kann stetig auf $\overline{\Omega}$ forgesetzt werden. Da auf $\partial\Omega$ S_a und L_a wie in (4.23) in Verbindung stehen und dort $\overline{H} = \frac{1}{H}$ gilt, folgt für $z \in \partial\Omega$:

$$\overline{\sigma(z)} = \overline{H(z)} \cdot \overline{L_a(z)} = \frac{1}{H(z)} \cdot \frac{1}{\mathrm{i}} \cdot S_a(z) \cdot T(z) = \frac{1}{\mathrm{i}} \cdot \lambda(z) \cdot T(z)$$

[36] Eng verwandt mit solchen Abbildungen sind die *Schwarz-Christoffel-Transformationen*, die die obere Halbebene winkeltreu auf ein einfach zusammenhängendes, polygonal berandetes Gebiet in der komplexen Ebene abbilden.

und nach obigem Satz impliziert dies $\lambda(z) = c \cdot L_a(z)$ für eine Konstante c, also gilt

$$c \cdot H(z) = \frac{S_a(z)}{L_a(z)}$$

auf $\partial\Omega$ und weil $\frac{S_a}{L_a}$ sich holomorph nach innen fortsetzt, auch auf ganz Ω.

P.3 Es bleibt zu zeigen, dass $c = 1$. Weil auf $\partial\Omega$ $|S_a(z)| = |L_a(z)|$ und auch $|H(z)| = 1$ gilt, folgt bereits $|c| = 1$.
Betrachte $\left(\frac{S_a}{L_a}\right)'(a)$. Nach Quotientenregel gilt

$$\left(\frac{S_a}{L_a}\right)'(z) = \frac{S_a'(z) \cdot L_a(z) - S_a(z) \cdot L_a'(z)}{L_a(z)^2} = \frac{S_a'(z)}{L_a(z)} - S_a(z) \cdot \frac{L_a'(z)}{L_a(z)^2}$$

Der Term $\frac{S_a'(z)}{L_a(z)}$ verschwindet bei $z = a$ wegen der Polstelle von L_a.
$L_a(z)$ hat eine einfache Polstelle bei $z = a$, d. h. es existiert in einer Umgebung von a eine Laurententwicklung der Form

$$L_a(z) = \frac{1}{2\pi} \cdot (z-a)^{-1} + \sum_{k \geq 0} \cdots \quad \text{und daher gilt} \quad L_a'(z) = \frac{-1}{2\pi} \cdot (z-a)^{-2} + \sum_{k \geq -1} \cdots$$

Der Term $\frac{L_a'(z)}{L_a(z)^2}$ ist in einer Umgebung von a also ein Quotient der Form

$$\frac{\frac{-1}{2\pi} \cdot (z-a)^{-2} + \sum_{k \geq -1} \cdots}{\frac{1}{(2\pi)^2} \cdot (z-a)^{-2} + \sum_{k \geq -1} \cdots}$$

und daher gilt $\lim_{z \to a} \frac{L_a'(z)}{L_a(z)^2} = -2\pi$.
Nach Voraussetzung gilt $H'(a) > 0$. Da $c \cdot H'(a) = (\frac{S_a}{L_a})'(a) = 2 \cdot \pi \cdot S_a(a)$ und $S_a(a)$ selbst eine positive reelle Zahl ist, folgt daraus, dass auch $c = \frac{2 \cdot \pi \cdot S_a(a)}{H(a)}$ eine positive reelle Zahl sein muss. Wegen $|c| = 1$ ist also $c = 1$ und damit auch $H(z) = \frac{S_a(z)}{L_a(z)}$ für alle $z \in \overline{\Omega}$.

□

In [KT86] wird ein numerisches Verfahren entwickelt, um auf glatt berandeten Gebieten den Szegő-Kern und anschließend die Riemann-Abbildung zu berechnen. In [Tru86] wird dieses Verfahren auf Effizienz hin optimiert und auch ein Quadrat testweise mit der Methode behandelt, ohne jedoch die Eckpunkte besonders zu behandeln. Der Autor bewertet das Ergebnis wie folgt:

> "Without further modifications we still get reasonable approximations to the solution. Similar results are obtained for other regular polygons. However, we do not feel that ths is a good way to treat regions with corners."