

Multivariate numerische Integration und Anwendungen in der Peridynamik

DIPLOMARBEIT

zur Erlangung des akademischen Grades

DIPL.-MATH.

an der

Fakultät II – Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Berlin

– Institut für Mathematik –

vorgelegt von

Henrik Büsing

betreut durch

Priv.-Doz. Dr. Etienne Emmrich

Berlin, 10. Dezember 2008

Die selbstständige und eigenhändige Anfertigung dieser Arbeit versichere ich an Eides statt.

Berlin, 10. Dezember 2008

Henrik Büsing

Vorwort

Die numerische Simulation ist in der heutigen Welt ein immer wichtigeres Mittel zur Vorhersage von Abläufen in der Realität. Es existieren Modelle zur Simulation des Wetters, der Entwicklung von Erdbeben, dem Entstehen von Wellen in Küstenregionen, oder den auftretenden Spannungen in Festkörpern. Einerseits können aufwändige und teure Tests durch Simulationen reduziert werden, andererseits ermöglichen sie erst Messungen und Aussagen über das Verhalten von Kenngrößen der zu untersuchenden Objekte.

Die zu Grunde liegenden Modelle haben häufig die Form von Systemen nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, so z.B. die NAVIER-STOKES-Gleichungen zur Beschreibung von Flüssigkeiten oder die NAVIER-LAMÉ-Gleichungen zur Beschreibung von Festkörpern. Eine analytische Lösung dieser Systeme von Gleichungen ist schwierig und häufig sogar unmöglich. Mit Hilfe der numerischen Simulation ist jedoch eine Diskretisierung der Gleichungen und die näherungsweise Berechnung von Lösungen mit dem Computer möglich. Die folgenden Fragen sind bei der Betrachtung von Problemen mit Differentialgleichungen und ihrer numerischen Approximation zu beachten. Existiert eine Lösung des gegebenen Problems? Wenn ja, ist die Lösung eindeutig? Können Aussagen über das Verhalten der Lösung getroffen werden? Konvergiert das numerische Verfahren für eine Näherungslösung gegen die exakte Lösung? Wenn ja, wie schnell konvergiert das Verfahren?

In dieser Arbeit beschäftigen wir uns mit einem Modell der nichtlokalen Elastizitätstheorie, der Peridynamik. Sie beschreibt das Verhalten von Festkörpern unter auftretenden Kräften. Die dabei entstehenden Verschiebungen und Geschwindigkeiten innerhalb des Festkörpers werden durch eine Integro-Differentialgleichung modelliert. Die Gleichung beruht wesentlich auf einer Kraftfunktion, die die Interaktion zwischen einzelnen Partikeln beschreibt. Wir betrachten eine spezielle lineare Kraftfunktion, für die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen gezeigt wurde. Nach Diskretisierung des Integralterms mit Hilfe der Quadraturformelmethode wird die Konvergenz des numerischen Verfahrens gegen die Lösung untersucht und eine Konvergenzordnung bestimmt. Die hier vorgestellten Untersuchungen zur Konvergenzordnung sind neu und wurden in der Literatur bisher nicht betrachtet.

Es zeigt sich, dass die Konvergenzordnung des Verfahrens von dem bei der Approximation des Integrals entstehenden Quadraturfehler abhängt. Ein Schwerpunkt liegt auf der Abschätzung dieses Fehlers und es wird eine Fehlerordnung von $\mathcal{O}(h^d)$ bewiesen, wobei d der Raumdimension entspricht. Im Folgenden sei ein Überblick über den Aufbau der vorliegenden Arbeit gegeben.

Im ersten Kapitel stellen wir zunächst Quadraturformeln auf Dreieck- und Rechteckgebieten vor. Diese dienen in einer summierten Quadraturformel zur Approximation des Integralterms in der Peridynamik. Anschließend beschreiben wir ein Verfahren zur Kon-

struktion von Quadraturformeln beliebigen Grades auf Dreiecken. In Kapitel 2 beschäftigen wir uns mit der Konvergenz von Quadraturformeln. Kapitel 3 stellt einige klassische Resultate zur Abschätzung des Quadraturfehlers mit PEANO- und SARD-Kernen im Ein- und Zweidimensionalen vor. Mit Hilfe des Lemmas von BRAMBLE und HILBERT gelangen wir schließlich zu Aussagen über den Quadraturfehler für Funktionen aus bestimmten SOBOLEW-Räumen in beliebigen Dimensionen. Das vierte Kapitel gibt eine Einführung in die Peridynamik und beschäftigt sich mit einigen Eigenschaften des Modells, so z.B. mit der Energieerhaltung. Für einen Spezialfall, in dem wir die Lösung der Bewegungsgleichung explizit angeben können, untersuchen wir verschiedene Möglichkeiten der Zeitdiskretisierung.

Kapitel 5 geht genauer auf die Kraftfunktion der Peridynamik ein und behandelt in einem ersten Abschnitt ihre Regularität unter Annahmen an die Regularität der Lösung. Anhand dieser Resultate ist dann eine Abschätzung des Quadraturfehlers, der bei der Approximation des Integralterms entsteht, im nächsten Abschnitt möglich. Hier befassen wir uns auch kurz mit der Randapproximation eines Horizontes und beschreiben warum eine Modifikation des Standardmodells für eine höhere Fehlerordnung notwendig ist. Anschließend stellen wir die Quadraturformelmethode vor und geben mit ihrer Hilfe eine Gesamtfehlerabschätzung für das lineare Modell an.

Den Abschluss der Arbeit bildet ein Kapitel über numerische Ergebnisse. Hier wird das Verhalten der numerischen Lösungen für verschiedene Testbeispiele untersucht und die Konvergenzordnung numerisch bestimmt.

Im Anhang finden sich einige Anmerkungen zur Notation und Überlegungen zum numerischen Modell der Peridynamik. Außerdem werden in einem weiteren Abschnitt die auftretenden Quadraturformeln als interpolatorische Quadraturformeln gedeutet.

Zum Abschluss möchte ich mich ganz herzlich bei meinem Betreuer Priv.-Doz. Dr. Etienne Emmrich für die Möglichkeit der Erstellung dieser Arbeit bedanken. Stephan Kusche danke ich für die gute Zusammenarbeit innerhalb des Projektes „Numerical Methods in the Peridynamic Theory“, ohne die das Kapitel über numerische Ergebnisse so nicht möglich gewesen wäre. Bei Christian Kreuzler und Dario Götz möchte ich mich für die zahlreichen Diskussionen und das Interesse an dieser Arbeit bedanken. Auch meiner Familie und meinen Freunden sei ein großer Dank für die Unterstützung bei der Erstellung dieser Arbeit ausgesprochen. Insbesondere bei Christina Puhl möchte ich mich für ihren Rückhalt und ihr Verständnis mit mir gerade in den letzten Monaten bedanken.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Übersicht über die verwendeten Kubaturformeln	1
1.1.1	Notation und Begriffsbildung	1
1.1.2	Kubaturformeln für Rechtecke	3
1.1.3	Kubaturformeln für Dreiecke	5
1.2	Stroud's konische Produkt-Formeln	7
2	Konvergenz von Quadraturformeln	12
2.1	Konvergenz für stetige Funktionen	12
3	Methoden zur Fehlerabschätzung	16
3.1	Peano-Kerne	16
3.1.1	Fehlerabschätzungen im Eindimensionalen	16
3.2	Sard-Kerne	23
3.2.1	Fehlerabschätzungen im Zweidimensionalen	25
3.3	Das Lemma von Bramble und Hilbert	28
3.3.1	Fehlerabschätzungen in beliebigen Dimensionen	28
4	Peridynamik	36
4.1	Die Bewegungsgleichung der Peridynamik	37
4.1.1	Der Horizont	37
4.1.2	Die Kraftfunktion	38
4.1.3	Energieerhaltung	40
4.2	Lösung der Bewegungsgleichung für einen Spezialfall	42
4.3	Numerische Zeitintegration	44
4.3.1	Vergleich verschiedener Zeitintegratoren	45
5	Fehlerabschätzung in der Peridynamik	47
5.1	Regularität des Integranden	47
5.1.1	Unstetigkeit der Kraftfunktion	47
5.1.2	Beschränktheit der Kraftfunktion	49
5.1.3	Abschätzungen in L^p -Räumen	50
5.1.4	Abschätzungen in Sobolew-Normen	52
5.2	Fehlerabschätzung im Falle einer Singularität	63
5.2.1	Randapproximation des Horizontes	69
5.3	Die Quadraturformelmethode	71
5.4	Gesamtfehlerabschätzung für das lineare Modell	72

6	Numerische Ergebnisse	77
6.1	Testbeispiel mit glattem Verschiebungsfeld	77
6.1.1	Abschätzung der Konvergenzordnung	78
6.2	Testbeispiel mit unstetigem Verschiebungsfeld	81
6.3	Testbeispiel mit Bruch	83
A	Anhang	85
A.1	Bemerkungen zur Peridynamik	85
A.1.1	Transformation auf Polarkoordinaten	85
A.1.2	Räumliche Diskretisierung	85
A.1.3	Behandlung der Singularität	86
A.1.4	Die Formeln von Clenshaw und Curtis	89
A.2	Räume und Normen	90
B	Interpolatorische Quadratur	92
B.1	Polynominterpolation	92
B.2	Interpolation auf Dreiecken	93
B.3	Interpolation auf Rechtecken	94
	Literaturverzeichnis	96

1 Einleitung

Im 15. Jahrhundert nahm der Handel, insbesondere mit dem heimischen Wein, in Süddeutschland zu. Für die Weinhändler wurde es deswegen zunehmend wichtiger, den Inhalt eines Fasses bestimmen zu können. Im Jahre 1613 soll Johannes KEPLER einem Händler bei der Bestimmung des Inhalts seiner Weinfässer zugesehen haben. Er hatte Zweifel an der Richtigkeit der Methode und verfasste ein Buch *Nova stereometria doliorum vinariorum*¹, in dem er unter anderem die heute noch unter dem Namen KEPLERSche Fassregel bekannte Kubaturformel beschreibt. Unter Kubatur versteht man die Bestimmung des Volumens eines Festkörpers. Kubaturformeln sind demnach Formeln, die eine Näherung an das Volumen ermöglichen. In dieser Diplomarbeit ist mit einer Kubaturformel eine gewichtete Summe von Funktionsauswertungen zur Berechnung eines multivariaten Integrals, d.h. der Integrand hängt von mehreren Variablen ab, gemeint. KEPLER's Fassformel hat im Eindimensionalen dann die Form

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{b+a}{2}\right) + f(b) \right).$$

Bezeichnet $f(x)$ die Querschnittsfläche des Fasses in der Entfernung x zum Boden und ist h die Höhe des Fasses so ist $\int_0^h f(x) dx$ das Volumen des Fasses und die Fassformel gibt eine Näherung. Für bestimmte Körper wie Kegel oder Zylinder ist das genäherte Volumen exakt.

In den folgenden Abschnitten geben wir eine Übersicht über Kubaturformeln auf Rechtecken und Dreiecken. Diese dienen später als Grundlage für summierte Kubaturformeln.

1.1 Übersicht über die verwendeten Kubaturformeln

1.1.1 Notation und Begriffsbildung

Zu Beginn legen wir einige Schreibweisen und Begriffe fest. Sei f eine auf dem Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ integrierbare Funktion. Dann ist das Integral I

$$I[f] := \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \tag{1.1.1}$$

mit $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \Omega$ ein lineares Funktional. Stammt die Funktion f aus $L^p(\Omega)$, $p \in [1, \infty]$, so ist $I: L^p(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ außerdem beschränkt und damit stetig.

¹Neue Inhaltsberechnung von Weinfässern

Das Integral I soll durch eine gewichtete Summe von Funktionsauswertungen approximiert werden

$$I[f] \approx Q[f] := \sum_{i=0}^{N-1} w_i f(\mathbf{x}_i). \quad (1.1.2)$$

Ist I ein eindimensionales Integral, so ist $Q[f]$ eine *Quadraturformel*, für höherdimensionale Integrale findet sich auch die Bezeichnung *Kubaturformel*. Wir verwenden den Begriff Kubaturformel, wenn wir betonen wollen, dass es sich um eine Formel in zwei oder mehr Dimensionen handelt. Der Begriff Quadraturformel sei aber für beliebige Dimensionen gültig. Die Zahlen $w_j \in \mathbb{R}$ nennen wir *Gewichte* und die \mathbf{x}_j *Stützstellen*. Bei der Approximation des Integrals einer Funktion durch eine Quadratur- bzw. Kubaturformel entsteht ein Fehler. Dieser *Quadratur-* bzw. *Kubaturfehler* ist definiert als

$$E[f] := I[f] - Q[f]. \quad (1.1.3)$$

Zur Verdeutlichung des Integrationsgebietes schreiben wir auch I_Ω und E_Ω .

Ein Kriterium zur Klassifikation von Quadraturformeln ist ihr *Grad*. Zur Definition geben wir als erstes eine kurze Einführung in Polynomräume. Mit $\mathcal{P}^k(\mathbb{R}^d)$ bezeichnen wir den Raum der Polynome vom Höchstgrade k in \mathbb{R}^d . Somit gilt

$$\mathcal{P}^k(\mathbb{R}^d) := \text{span}\{x_1^{\alpha_1} \cdot \dots \cdot x_d^{\alpha_d} \text{ mit } \alpha_1 + \dots + \alpha_d \leq k\}.$$

Beispiel 1.1.1. Häufig werden Probleme in dieser Arbeit im zweidimensionalen euklidischen Raum betrachtet. Ein Beispiel für einen Polynomraum basierend auf dem \mathbb{R}^2 ist

$$\mathcal{P}^2(\mathbb{R}^2) = \text{span}\{1, x, y, xy, x^2, y^2\}.$$

Die Dimension dieses Raumes beträgt 6. △

Allgemein gilt:

Lemma 1.1.2. *Die Dimension von $\mathcal{P}^k(\mathbb{R}^d)$ beträgt*

$$\dim \mathcal{P}^k(\mathbb{R}^d) = \binom{d+k}{k}.$$

Einen weiteren wichtigen Polynomraum stellt $\mathcal{Q}^k(\mathbb{R}^d)$ dar. In ihm sind alle Polynome enthalten, die in jeder Variablen den Höchstgrad k nicht überschreiten.

Beispiel 1.1.3. Als Beispiel sei hier

$$\mathcal{Q}^2(\mathbb{R}^2) = \text{span}\{1, x, y, xy, x^2, y^2, xy^2, x^2y, x^2y^2\}$$

genannt. Die Dimension des Raumes beträgt 9. △

Elemente aus $\mathcal{Q}^k(\mathbb{R}^d)$ können als Produkt von Polynomen aus $\mathcal{P}^k(\mathbb{R})$ geschrieben werden. Für $p \in \mathcal{Q}^k(\mathbb{R}^d)$ existieren d Polynome $p_i \in \mathcal{P}^k(\mathbb{R})$ so, dass

$$p(x_1, x_2, \dots, x_d) = p_1(x_1)p_2(x_2) \dots p_d(x_d).$$

Lemma 1.1.4. *Es gilt*

$$\dim \mathcal{Q}^k(\mathbb{R}^d) = (k + 1)^d.$$

Mit Hilfe der Polynomräume können wir nun den Grad einer Quadraturformel definieren.

Definition 1.1.5. Eine Quadraturformel Q für ein Integral I besitzt den *Grad* k , falls sie exakt ist für alle Polynome $p \in \mathcal{P}^k(\mathbb{R}^d)$ und mindestens ein Polynom vom Grad $k + 1$ existiert für das die Formel nicht exakt ist.

Analog definieren wir

Definition 1.1.6. Eine Quadraturformel Q für ein Integral I besitzt den *globalen Grad* k , falls sie exakt ist für alle Polynome $p \in \mathcal{Q}^k(\mathbb{R}^d)$ und mindestens ein Polynom mit Grad $k + 1$ in jeder Dimension existiert für das sie nicht exakt ist.

Der Grad einer Quadraturformel Q ist ein Maß für die Qualität der Formel. Man nimmt an, dass eine gutartige Funktion sich auch gut durch ein Polynom (z.B. ihre Taylor-Polynome) approximieren lässt. Somit erwarten wir, dass das Integral dieser Funktion gut durch eine Quadraturformel mit hinreichend großem Grad approximiert wird. Ein anderes Argument ist, dass die Konvergenzrate einer zusammengesetzten Quadraturformel bei Verkleinerung der Gitterweite direkt mit dem algebraischen Grad der Quadraturformel zusammenhängt. Natürlich lässt sich dieses Argument nur auf Quadraturformeln über Gebieten anwenden aus denen sich eine zusammengesetzte Quadratur aufbauen lässt; dies ist bei Dreiecken und Rechtecken der Fall.

1.1.2 Kubaturformeln für Rechtecke

Eine der einfachsten zweidimensionalen Kubaturformeln ist eine Verallgemeinerung der Trapezregel

$$Q[f] = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)),$$

aus dem Eindimensionalen auf dem Intervall $[a, b]$. Statt der Endpunkte des Intervalls verwendet man die Eckpunkte $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_4$ des Rechtecks T über das integriert werden soll,

$$\int_T f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \approx \frac{|T|}{4} (f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2) + f(\mathbf{x}_3) + f(\mathbf{x}_4)). \quad (1.1.4)$$

Die Kubaturformel (siehe Abbildung 1.1.1) ist exakt für Polynome $p \in \mathcal{Q}^1(\bar{T}) \supseteq \mathcal{P}^1(\bar{T})$ und führt, wie wir in Kapitel 3.2 sehen, auf eine Fehlerabschätzung zweiter Ordnung.

Als weitere Regel, die exakt ist für Polynome $p \in \mathcal{Q}^1(\bar{T}) \supseteq \mathcal{P}^1(\bar{T})$, stellen wir die Mittelpunktregel vor,

$$\int_T f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \approx |T| f(\mathbf{x}_M),$$

mit dem Mittelpunkt \mathbf{x}_M von T (Abb. 1.1.1). Auch hier erhalten wir wieder eine Fehlerabschätzung der Ordnung zwei.

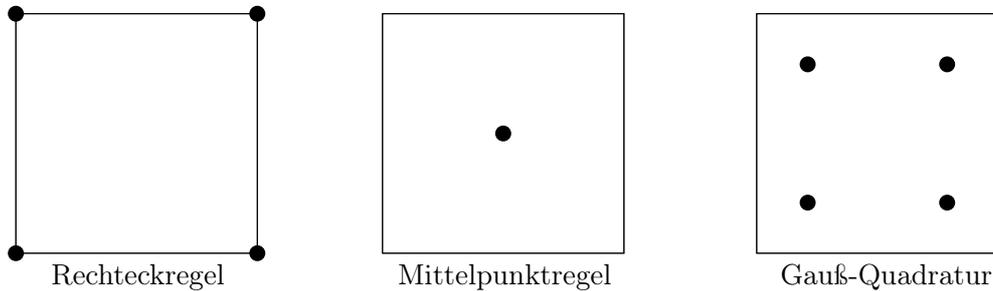


Abbildung 1.1.1: Kubaturformeln auf Rechtecken, exakt für \mathcal{Q}^1 , \mathcal{Q}^1 , \mathcal{Q}^3

Als letzte Rechteckregel betrachten wir die Gauß-Legendre-Kubatur mit vier Punkten (Abb. 1.1.1). Sie kann genau wie die Formel (1.1.4) geschrieben werden, wobei diesmal $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_4$ die Gauß-Punkte bezeichnen. Diese können für ein beliebiges Rechteck mit Hilfe einer affin-linearen Transformation des Einheitsquadrates bestimmt werden. Auf diesem sind die Gauß-Punkte gegeben durch $(\pm\sqrt{3}/3, \pm\sqrt{3}/3)$. Die Kubaturformel ist exakt für Polynome $p \in \mathcal{Q}^3(\bar{T}) \supsetneq \mathcal{P}^3(\bar{T})$ und führt, wie wir später sehen, auf eine Fehlerabschätzung vierter Ordnung.

Die Stützstellen für die obigen Kubaturformeln sind in Abbildung 1.1.2 für das Einheitsquadrat dargestellt. Die genannten Kubaturformeln lassen sich auch auf höhere Di-

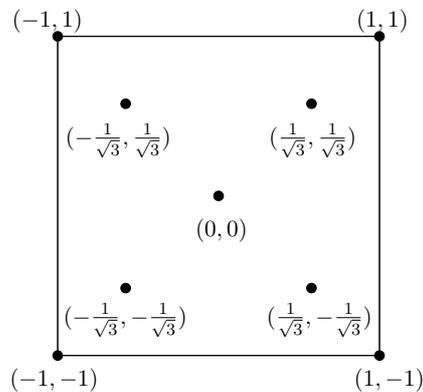


Abbildung 1.1.2: Stützstellen im Einheitsquadrat

mensionen verallgemeinern, so z.B. auf Quader, oder allgemeiner Parallelepipede, im Dreidimensionalen.

1.1.3 Kubaturformeln für Dreiecke

Ebenso wie für Rechtecke, lassen sich auch für Dreiecke Kubaturformeln mit Eckpunkten oder inneren Punkten finden.

Für ein Dreieck T betrachten wir die Formel

$$\int_T f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \approx \frac{|T|}{3} (f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2) + f(\mathbf{x}_3)), \quad (1.1.5)$$

mit den Eckpunkten $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$ von T . Sie ist exakt für Polynome $p \in \mathcal{P}^1(\bar{T})$, besitzt somit den Grad eins, und führt zu einer Fehlerabschätzung zweiter Ordnung. Eine Formel gleichen Grades mit minimaler Anzahl Punkte ist

$$\int_T f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \approx |T| f(\mathbf{x}_M), \quad (1.1.6)$$

wobei \mathbf{x}_M den Schwerpunkt von T bezeichnet.

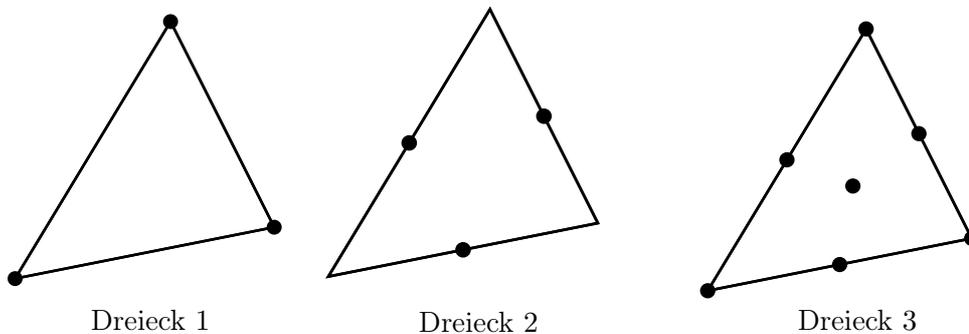


Abbildung 1.1.3: Kubaturformeln auf Dreiecken, exakt für $\mathcal{P}^1, \mathcal{P}^2, \mathcal{P}^3$

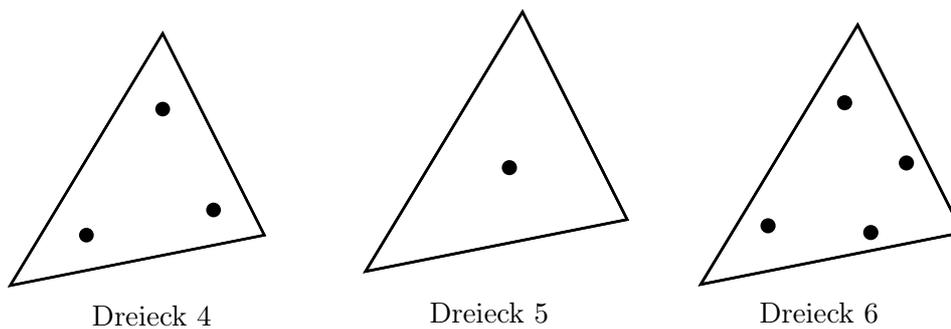


Abbildung 1.1.4: Kubaturformeln auf Dreiecken, exakt für $\mathcal{P}^2, \mathcal{P}^1, \mathcal{P}^3$

Eine Kubaturformel mit minimaler Anzahl Punkte vom Grad zwei ist z.B. die Formel (1.1.5), wobei diesmal allerdings $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$ die Seitenmittelpunkte des Dreiecks T

bezeichnen. Sie ist exakt für Polynome $p \in \mathcal{P}^2(\bar{T})$ und führt somit auf eine Fehlerabschätzung der Ordnung drei.

Eine Kubaturformel mit gleichem Grad und ebenfalls minimaler Anzahl Punkte entsteht, wenn man $\mathbf{x}_1 = (\frac{1}{6}, \frac{1}{6})$, $\mathbf{x}_2 = (\frac{1}{6}, \frac{2}{3})$, $\mathbf{x}_3 = (\frac{2}{3}, \frac{1}{6})$ im Einheitsdreieck wählt. Mit Hilfe einer affin-linearen Transformation können die entsprechenden Punkte in einem beliebigen Dreieck bestimmt werden.

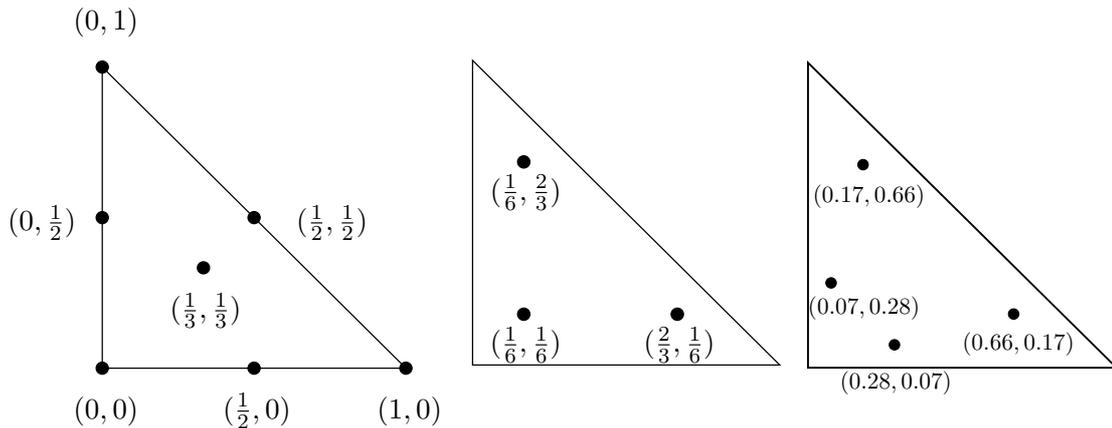


Abbildung 1.1.5: Stützstellen im Einheitsdreieck

Abschließend betrachten wir noch zwei Kubaturformeln vom Grad drei. Zum einen ist
$$\int_T f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \approx \frac{|T|}{60} (3(f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2) + f(\mathbf{x}_3)) + 8(f(\mathbf{x}_{12}) + f(\mathbf{x}_{23}) + f(\mathbf{x}_{13})) + 27f(\mathbf{x}_{123})),$$
 mit den Eckpunkten $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$, den Seitenmittelpunkten $\mathbf{x}_{12}, \mathbf{x}_{23}, \mathbf{x}_{34}$, und dem Schwerpunkt \mathbf{x}_{123} von T , eine Formel, die exakt für Polynome $p \in \mathcal{P}^3(\bar{T})$ ist.

Eine zweite Formel mit Fehlerordnung vier und minimaler Anzahl Punkten ist

$$Q[f] = |T| \left(\left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{6}}{36} \right) (f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2)) + \left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{6}}{36} \right) (f(\mathbf{x}_3) + f(\mathbf{x}_4)) \right), \quad (1.1.7)$$

mit $\mathbf{x}_1 \doteq (0.07, 0.28)$, $\mathbf{x}_2 \doteq (0.28, 0.07)$, $\mathbf{x}_3 \doteq (0.66, 0.17)$ und $\mathbf{x}_4 \doteq (0.17, 0.66)$. Für eine detaillierte Herleitung der Quadraturgewichte und Stützstellen dieser Formel siehe [43]. Eine neue exakte Wurzelarstellung der Stützstellen findet sich in Anhang B.2.

Die Stützstellen der genannten Kubaturformeln finden sich in den Abbildungen 1.1.3 und 1.1.4, die Stützstellen im Einheitsdreieck sind in Abbildung 1.1.5 gezeigt.

Eine Verallgemeinerung der Formeln in höheren Dimensionen ist möglich, so z.B. für Tetraeder im Dreidimensionalen. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass diese Formeln nicht mehr eine optimale Anzahl Punkte besitzen müssen. Je höher die Dimension, desto weniger optimale Formeln sind bekannt.

Um später summierte Kubaturformeln basierend auf Dreiecken zu verwenden benötigen wir eine Diskretisierung des Gebietes. Wir verwenden entweder regelmäßige Diskretisierungen, die wir aus einer Rechteckerlegung gewinnen können oder benutzen

eine Delaunay-Triangulierung. Diese wird häufig im Zusammenhang mit der Finiten-Elemente-Methode verwandt (siehe [12, S. 346 ff.]).

1.2 Stroud's konische Produkt-Formeln

In diesem Abschnitt leiten wir weitere Kubaturformeln für das Einheitsdreieck, nach einem Verfahren von STROUD und SECREST, her [27]. Im Eindimensionalen existieren in einem gewissen Sinne optimale Quadraturformeln. So integrieren die Gauß-Legendre-Quadraturen mit N Punkten Polynome vom Grad $2N - 1$ exakt und es ist bekannt, dass keine Quadraturformel existiert die mit N Punkten Polynome vom Grad $2N$ exakt integriert (siehe z.B. PLATO [20]). Stützstellen und Gewichte für eine Quadraturformel mit beliebigem Grad und für diesen Grad minimaler Anzahl Punkte lassen sich somit berechnen.

Im Zweidimensionalen ist die Lage komplizierter. Bisher ist noch keine allgemeine Formel zur Berechnung von Quadraturformeln mit einer minimalen Anzahl von Punkte bekannt. Unser Ziel ist es für das Dreieck Formeln von beliebig hohem Grad zu berechnen indem wir die Berechnung des Integrals über das Dreieck auf eindimensionale Integrale zurückführen. Die berechneten Formeln müssen aber nicht die minimale Anzahl Punkte besitzen.

Im Folgenden benutzen wir die von STROUD so benannten konischen Produkt-Formeln, um Kubaturen zu bestimmen. Diese werden von STROUD und SECREST in [27], unter anderem für Simplizes beliebiger Dimension, vorgestellt. Der Name leitet sich aus der Definition eines allgemeinen Kegels ab, mit dem dann Formeln zur Approximation von Integralen bestimmt werden. Für die allgemeine Definition eines d -dimensionalen Kegels und des Verfahrens siehe STROUD [25]. Wir beschränken uns auf die Konstruktion von Quadraturformeln für das Dreieck. In diesem Fall reduziert sich der Kegel auf ein Intervall. Betrachten wir das Integral

$$I[f] = \int_0^1 \int_0^{1-x} f(x, y) dy dx.$$

Eine Transformation auf das Rechteck $[0, 1] \times [0, 1]$ mit $x = \tilde{x}$ und $y = \tilde{y}(1 - \tilde{x})$ liefert

$$\int_0^1 \int_0^1 (1 - \tilde{x}) f(\tilde{x}, \tilde{y}) d\tilde{x} d\tilde{y},$$

denn die Determinante der Jacobi-Matrix zur zugehörigen Transformation ist $(1 - \tilde{x})$. Betrachten wir Monome $f(x, y) = x^\alpha y^\beta$ so können wir das ursprüngliche Doppelintegral als Produkt von zwei eindimensionalen Integralen schreiben

$$\int_0^1 (1 - \tilde{x})^{\beta+1} \tilde{x}^\alpha d\tilde{x} \int_0^1 \tilde{y}^\beta d\tilde{y} = \int_0^1 (1 - \tilde{x}) p(\tilde{x}) d\tilde{x} \int_0^1 \tilde{y}^\beta d\tilde{y}$$

mit einem Polynom $p \in \mathcal{P}^{\alpha+\beta}(\mathbb{R})$. Berechnen wir nun

$$\int_0^1 f(y) dy \approx Q_L[f] \quad \text{und} \quad \int_0^1 (1 - x) f(x) dx \approx Q_J[f]$$

numerisch mit einer Gauß-Legendre- und einer Gauß-Jacobi-Quadratur und haben beide Formeln den Grad M , so hat auch die entsprechende Kubaturformel für das Dreieck den Grad M . Im Beweis betrachtet man alle α und β mit $\alpha + \beta = M$ und nutzt die Rücktransformation der entsprechenden Polynome auf das Dreieck.

Beispiel 1.2.1. Wir verwenden die Mittelpunkregel und die entsprechende Gauß-Jacobi-Formel. Dadurch erhalten wir für die Gewichte $w_1 = 1$ und $w_2 = 1/2$. Die Auswertungen finden an der Stelle $x_1 = 1/2$ und $x_2 = 1/3$ statt. Das Gewicht der Kubaturformel für das Dreieck ist dann gegeben als $w = w_1 w_2 = 1/2$ und die Auswertung findet an $(x, y) = (1/3, 1/3)$ statt. Dabei entsteht das Gewicht durch Multiplikation und der Punkt (x, y) durch Rücktransformation.

Diese Kubaturformel integriert lineare Polynome auf Dreiecken exakt. Es ist die uns schon bekannte Formel (1.1.6). \triangle

Beispiel 1.2.2. Als nächstes bestimmen wir eine Gauß-Jacobi-Formel mit zwei Punkten, die für kubische Polynome $p \in \mathcal{P}^3(\mathbb{R})$ auf dem Intervall $[0, 1]$ exakt ist, d.h. es gelte

$$I_J[p] = \int_0^1 (1-x)p(x) dx = w_1 p(x_1) + w_2 p(x_2) = Q_J[p] \quad \forall p \in \mathcal{P}^3(\mathbb{R}).$$

Das zu lösende nichtlineare Gleichungssystem sieht folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 &= 1/2 \\ w_1 x_1 + w_2 x_2 &= 1/6 \\ w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 &= 1/12 \\ w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3 &= 1/20. \end{aligned}$$

Eine Lösung ist gegeben durch

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{6}}{36} \doteq 0.318041381 & w_2 &= \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{6}}{36} \doteq 0.181958618 \\ x_1 &= \frac{2}{5} - \frac{\sqrt{6}}{10} \doteq 0.155051025 & x_2 &= \frac{2}{5} + \frac{\sqrt{6}}{10} \doteq 0.644948974. \end{aligned}$$

Analog lässt sich eine Lösung für die Gauß-Legendre-Formel für

$$I_L[p] = \int_0^1 p(x) dx = w_3 p(x_3) + w_4 p(x_4) = Q_L[p]$$

finden:

$$\begin{aligned} w_3 &= \frac{1}{2} & w_4 &= \frac{1}{2} \\ x_3 &= \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} \doteq 0.211324865 & x_4 &= \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} \doteq 0.788675134. \end{aligned}$$

$f(x)$	$I_J[f]$	$Q_J[f]$	$I_L[f]$	$Q_L[f]$
1	1/2	1/2	1	1
x	1/6	1/6	1/2	1/2
x^2	1/12	1/12	1/3	1/3
x^3	1/20	1/20	1/4	1/4
x^4	1/30	19/600	1/5	7/36

Tabelle 1.2.1: Werte für Gauß-Legendre- und Gauß-Jacobi-Quadratur vom Grad drei

Tabelle 1.2.1 zeigt die Werte des Integrals und der Quadraturformeln für die ersten fünf Basispolynome. Setzen wir nun beide Formeln zusammen um das Integral über das Dreieck zu berechnen

$$I[f] = \int_0^1 \int_0^{1-x} f(x, y) dy dx \approx \omega_1 f(\nu_1, \nu_3) + \omega_2 f(\nu_1, \nu_4) + \omega_3 f(\nu_2, \nu_5) + \omega_4 f(\nu_2, \nu_6),$$

erhalten wir eine 4-Punkt-Formel vom Grad drei mit

$$\omega_{1,2} = \frac{1}{8} + \frac{\sqrt{6}}{72} \doteq 0.159020690$$

$$\omega_{3,4} = \frac{1}{8} - \frac{\sqrt{6}}{72} \doteq 0.090979309$$

$$\nu_1 = \frac{2}{5} - \frac{\sqrt{6}}{10} \doteq 0.155051025$$

$$\nu_2 = \frac{2}{5} + \frac{\sqrt{6}}{10} \doteq 0.644948974.$$

$$\nu_3 = \frac{1}{60}(3 - \sqrt{3})(6 + \sqrt{6}) \doteq 0.178558728$$

$$\nu_4 = \frac{1}{60}(3 + \sqrt{3})(6 + \sqrt{6}) \doteq 0.666390246$$

$$\nu_5 = \frac{1}{60}(3 - \sqrt{3})(6 - \sqrt{6}) \doteq 0.075031110$$

$$\nu_6 = \frac{1}{60}(3 + \sqrt{3})(6 - \sqrt{6}) \doteq 0.280019915.$$

Wie in Abbildung 1.2.1 zu sehen, ist die Anordnung der Quadraturpunkte nicht sym-

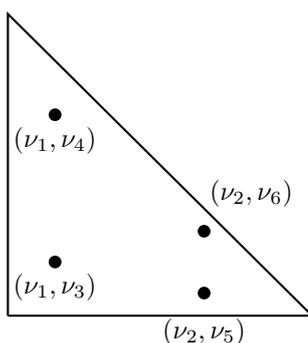


Abbildung 1.2.1: Kubatur für das Dreieck

metrisch. Die Formel hat nach Konstruktion Grad drei und besitzt die minimale Anzahl Punkte für den gegebenen Grad. \triangle

Wir haben aus eindimensionalen Quadraturformeln Kubaturformeln für das Dreieck konstruiert. Dieses Vorgehen beschreiben STROUD und SECREST in [27], neben Simplizes, auch für Würfel, Kugel und Oberfläche der Kugel, in beliebigen Dimensionen. Hauptaugenmerk des Buches liegt jedoch auf Gaußschen Quadraturformeln im Eindimensionalen, insbesondere Gauß-Legendre, Gauß-Hermite und Gauß-Laguerre Formeln. Die Autoren geben Gewichte und Stützstellen in Tabellenform an. Außerdem werden Fehlerkoeffizienten für die gezeigten Formeln bestimmt. Diese ermöglichen es Fehlerabschätzungen zu geben, vorausgesetzt man kann Aussagen über höhere Ableitungen der zu integrierenden Funktion machen.

Für bestimmte Standardregionen können Kubaturformeln beliebigen Grades konstruiert werden. Leider haben die Formeln nicht immer die minimale Anzahl Punkte für den jeweiligen Grad. Bisher ist noch kein einheitliches Verfahren zur Bestimmung von minimalen Formeln bekannt.

Ein Beispiel einer minimalen Kubaturformel vom Grad drei mit vier Punkten für das Dreieck gibt HILLION in [43] an. Dies ist die in (1.1.7) beschriebene Formel, deren Quadraturpunkte gewissen Symmetriebedingungen genügen. HILLION verwendet zur Berechnung dieser Formel ein System nichtlinearer Gleichungen. Mit steigendem Grad der Kubaturformel erhöht sich auch die Komplexität der zu lösenden Gleichungen. Daher sind Einschränkungen, wie geforderte Symmetriebedingungen, notwendig um das System zu vereinfachen. Solche Vereinfachungen hat HILLION durchgeführt um dann ein reduziertes System zu lösen. Das anfängliche System von zehn Gleichungen mit zwölf Unbekannten kann er so auf ein System von sechs Gleichungen mit sechs Unbekannten reduzieren. Betrachtet man die geforderte Symmetriebedingung für das Dreieck so wird klar, dass Formeln mit einer ungeraden Anzahl an Punkten mindestens einen Punkt auf der Symmetrieachse besitzen müssen.

Es ist zwar kein einheitlicher Weg zur Bestimmung von minimalen Kubaturformeln im Mehrdimensionalen bekannt, aber es existieren eine Anzahl von Büchern und Artikeln, die bekannte Formeln tabellieren. So hat STROUD im Jahre 1971 sein Buch APPROXIMATE CALCULATION OF MULTIPLE INTEGRALS [25] veröffentlicht. Hierin sind eine Auflistung von Kubaturformeln für eine Reihe von Regionen, darunter d-Würfel, d-Kugel sowie d-Simplex oder auch den kompletten Raum, enthalten.

In [34] finden sich untere Schranken für die Anzahl Punkte in einer Kubaturformel mit gegebenem Grad. Häufig bestehen jedoch Lücken zwischen diesen Schranken und den bekannten Kubaturformeln mit niedrigster Anzahl Punkten. Je höher der Grad der Formel und je größer die Dimension umso größer werden auch diese Lücken.

In [40] sind unteren Schranken für die Anzahl Punkte, sowie die niedrigste Anzahl Punkte in einer bekannten Kubaturformel, aufgelistet.

Problematisch ist häufig auch, dass der Zugang zu den Formeln schwierig ist. COOLS beschreibt daher in [37] wie er Kubaturformeln für mehrdimensionale Integrale einer breiteren Öffentlichkeit zugänglich machen will.

Im Jahre 1993 veröffentlichten COOLS und RABINOWITZ außerdem einen Artikel [39] in dem sie versuchen alle bis dato bekannten Kubaturformeln aufzulisten und geben über hundert Referenzen zu den entsprechenden Artikeln. So findet sich in dem Artikel auch keine einzige Kubaturformel sondern nur Verweise. Eine Aktualisierung führt COOLS 1999

mit seinem Artikel [35] durch. Hier bemerkt er jedoch schon, dass neue Kubaturformeln eher selten gefunden werden und der Fortschritt in diesem Bereich sich verlangsamt.

Zu speziellen Regionen existieren noch einige Übersichtsartikel, so z.B. [44] für Dreiecke aus dem Jahr 1994 oder [38] für den Einheitskreis aus dem Jahr 2000. Insgesamt ist jedoch festzuhalten, dass eine befriedigende Untersuchung von Quadraturformeln nur im Eindimensionalen existiert, und im Mehrdimensionalen noch Lücken existieren, die mit höherem Grad und höherer Dimension zunehmen.

2 Konvergenz von Quadraturformeln

2.1 Konvergenz für stetige Funktionen

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit der Frage unter welchen Voraussetzungen eine Folge von Quadraturformeln gegen den Wert des zu approximierenden Integrals konvergiert, wenn für die zu integrierende Funktion nur die Stetigkeit verlangt wird. Wir betrachten den eindimensionalen Fall und suchen mit Hilfe der Quadraturformel Q_N eine Approximation and das Integral I

$$I[f] = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N-1} w_i f(x_i) = Q_N[f].$$

Für die N Stützstellen x_i gelte $a \leq x_0 < \dots < x_{N-1} \leq b$. Bei der Wahl einer *äquidistanten* Verteilung der Stützstellen erhalten wir $h = \frac{x_{N-1} - x_0}{N-1}$ und $x_i := x_{i-1} + h$, $i = 1, \dots, N-1$. Bei Anwendung der Quadraturformel zur Berechnung des Integrals entsteht ein Fehler, der Quadraturfehler nach (1.1.3)

$$E_N[f] = I[f] - Q_N[f].$$

Eine Quadraturformel $Q_N[f]$ ist *konvergent*, wenn der Quadraturfehler $E_N[f]$ gegen Null konvergiert für $N \rightarrow \infty$. Im Folgenden untersuchen wir unter welchen Bedingungen der Quadraturfehler bei Erhöhung der Anzahl der Stützstellen gegen Null strebt. Dies schließt einerseits den Fall summierter Quadraturformeln bei Erhöhung der Anzahl der Teilintervalle ein, aber auch z.B. die Folge der Gaußschen Quadraturformeln mit wachsender Stützstellenzahl oder die Folge der NEWTON-COTES-Formeln.

Beispiel 2.1.1. Betrachten wir die summierte Trapezregel mit äquidistanten Stützstellen

$$Q_N[f] = \frac{b-a}{N-1} \left(\frac{f(x_0) + f(x_{N-1})}{2} + f(x_1) + \dots + f(x_{N-2}) \right). \quad (2.1.1)$$

Für den Quadraturfehler gilt bekanntlich

$$|E_N[f]| \leq \frac{h^2}{12} (b-a) \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|. \quad (2.1.2)$$

Erhöhen wir jetzt N und somit die Anzahl der Stützstellen so verringern wir die Schrittweite h . Falls f aus $C^2[a, b]$, und damit eine beschränkte zweite Ableitung besitzt, konvergiert der Quadraturfehler für $N \rightarrow \infty$ gegen Null. \triangle

Der Satz von SZEGÖ gibt eine allgemeine Charakterisierung von konvergenten Quadraturformeln für stetige Funktionen an.

Satz 2.1.2 (SZEGÖ). *Die Quadraturformeln $Q_N[f]$ konvergieren genau dann für beliebige stetige Funktionen $f \in C[a, b]$, wenn gilt:*

- (i) *Es existiert ein $M > 0$, so dass $\sum_{i=0}^{N-1} |w_i^N| \leq M < \infty$, $N = 1, 2, \dots$*
- (ii) *Für jedes Polynom p gilt: $E_N[p] \rightarrow 0$ für $N \rightarrow \infty$.*

Nach dem Satz von SZEGÖ muss die Summe der Beträge aller Gewichte w_i somit gleichmäßig beschränkt sein bezüglich N . Außerdem müssen die Formeln für jedes Polynom konvergieren. Wir folgen in der Darstellung WLOKA [29] und wählen für den Beweis des Satzes von SZEGÖ den funktionalanalytischen Zugang mit Hilfe des Satzes von BANACH-STEINHAUS.

Satz 2.1.3 (BANACH-STEINHAUS). *Eine Folge linearer stetiger Abbildungen A_N , die einen Banach-Raum X in einen Banach-Raum Y abbildet, konvergiert genau dann punktweise gegen eine lineare, stetige Abbildung A , wenn die folgenden beiden Bedingungen erfüllt sind:*

- (i) *Die Normen der Abbildungen A_N sind gleichmäßig beschränkt, $\|A_N\| \leq M < \infty$.*
- (ii) *Die Folge $A_N[f]$ konvergiert gegen $A[f]$ für alle $f \in D$, wobei D dicht in X liegt.*

Beweis. Für einen Beweis siehe WLOKA [29, S. 126]. □

Kommen wir nun zum Beweis des Satzes von SZEGÖ.

Beweis von Satz 2.1.2. Betrachte die linearen, stetigen Funktionale

$$Q_N[f] = \sum_{i=0}^{N-1} w_i^N f(x_i), \quad N = 1, 2, \dots, \text{ sowie } I[f] = \int_a^b f(x) dx$$

auf $C[a, b]$. Es gilt $\|Q_N\| = \sum_{i=0}^{N-1} |w_i^N|$. Nach dem Satz von Weierstraß liegt die Menge der Polynome p dicht in $C[a, b]$. Damit entsprechen die Bedingungen aus dem Satz von SZEGÖ den Bedingungen des Satzes von Banach-Steinhaus. □

Beispiel 2.1.4. Betrachten wir noch einmal die summierte Trapezregel (2.1.1). Um die Konvergenz für stetige Funktion $f \in C[a, b]$ nachzuweisen, müssen die zwei Bedingungen des Satzes von SZEGÖ erfüllt sein. Wir hatten schon gesehen, dass die Trapezregel für Funktionen mit beschränkter zweiter Ableitung, wie dies bei Polynomen der Fall ist, konvergiert. Somit ist Bedingung (ii) erfüllt. Bleibt noch die Beschränktheit der Gewichte zu zeigen. Für die Operatornorm von Q_N gilt

$$\|Q_N\| = \sum_{i=0}^{N-1} |w_i^N| = (b - a) < \infty,$$

denn die Gewichte der Trapezregel sind sämtlich positiv und sie integriert konstante Funktionen exakt. Somit konvergiert die Trapezregel für beliebige stetige Funktionen. Aussagen über die Konvergenzgeschwindigkeit, wie wir sie durch (2.1.2) erhalten haben, können wir nur unter der Voraussetzung der Stetigkeit jedoch nicht geben. \triangle

Eine wichtige Klasse von Quadraturformeln bilden diejenigen mit nichtnegativen Gewichten. Die Gefahr der numerischen Auslöschung bei der Berechnung mit Hilfe von Computern besteht bei ihnen nicht. Unter dieser Annahme vereinfacht sich der Satz von SZEGÖ folgendermaßen.

Satz 2.1.5 (STEKLOV). *Die Gewichte der Quadraturformel Q_N seien nichtnegativ. Unter dieser Voraussetzung konvergiert die Quadraturformel Q_N genau dann für alle stetige Funktionen $f \in C[a, b]$, wenn sie für alle Polynome p konvergiert.*

Die erste Bedingung in Satz 2.1.2 kann fallengelassen werden.

Beweis von Satz 2.1.5. Wählen wir als Polynom $p(x) \equiv 1$. Nach Voraussetzung geht der Quadraturfehler gegen Null für beliebige Polynome, $E_N[p] \rightarrow 0$ für $N \rightarrow \infty$. Damit gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{N-1} w_i^N = \int_a^b 1 dx = (b - a).$$

Aufgrund der Nichtnegativität der Gewichte ergibt sich somit

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{N-1} |w_i^N| = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{N-1} w_i^N < \infty,$$

woraus die gleichmäßige Beschränktheit der Summen $\sum_{i=0}^{N-1} w_i^N$ folgt. Damit ist auch die erste Bedingung aus Satz 2.1.2 erfüllt. \square

Es gibt Quadraturformeln, z.B. die Gaußschen, bei denen tatsächlich alle Gewichte positiv sind. Im Gegensatz dazu stehen die Regeln von NEWTON-COTES. Hier ist die Positivität der Gewichte bei höherem Grad nicht mehr gewährleistet. Im Satz von KUSMIN wird gezeigt, dass für abgeschlossene NEWTON-COTES-Formeln die Bedingung (i) in Satz 2.1.2 nicht erfüllt ist.

Satz 2.1.6 (KUSMIN). *Für die Gewichte w_i^N , $i = 0, \dots, N - 1$, der abgeschlossenen NEWTON-COTES-Formeln gilt*

$$\sum_{i=0}^{N-1} |w_i^N| \rightarrow \infty \text{ für } N \rightarrow \infty.$$

Beweis. Ein Beweis findet sich z.B. in NATANSON [19, S. 129 ff.]. \square

Damit folgt aus Satz 2.1.2, dass eine stetige Funktion f existiert für die die NEWTON-COTESschen Quadraturformeln nicht konvergieren. Neben dieser Existenzaussage gibt es Beweise, die explizit eine solche Funktion angeben und die Art der Divergenz präzisieren. BRASS gibt 1977 einen sehr kurzen Beweis zur Divergenz der NEWTON-COTESschen Quadraturformeln für die Funktion $f(x) = |x|$ [32]. Zuvor wurden schon wesentlich längere Beweise geführt, so z.B. 1933 von PÓLYA in [45], der sogar für eine auf $[0, 1]$ analytische Funktion die Divergenz zeigt.

Zum Schluss sei noch bemerkt, dass auch Konvergenzbedingungen für die Klasse aller RIEMANN-integrierbaren Funktion bekannt sind (siehe PÓLYA [45]). Diese sind im allgemeinen Fall etwas unhandlich, nehmen aber für Quadraturverfahren mit positiven Gewichten eine einfache Gestalt an.

Satz 2.1.7. *Besitzt ein Quadraturverfahren nichtnegative Gewichte und ist es für alle Polynome konvergent, so ist es sogar für alle RIEMANN-integrierbaren Funktionen konvergent.*

Beweis. Ein Beweis findet sich in BRASS [3] auf S. 35 ff. □

Wir werden später sehen, dass die zu integrierende Kraftfunktion der Peridynamik, die im Vorwort erwähnt wurde unstetig ist. Die Menge der Unstetigkeitspunkte ist jedoch eine Nullmenge. Unter hinreichenden Voraussetzungen an das Verschiebungsfeld ist die Kraftfunktion beschränkt und somit RIEMANN-integrierbar. Weiter haben die verwendeten summierten Quadraturverfahren alle positive Gewichte. Somit ist die Konvergenz der Verfahren nach Satz 2.1.7 gesichert.

Im nächsten Kapitel wollen wir Aussagen über die Konvergenzordnung von Quadraturverfahren bei der Anwendung auf bestimmte Funktionenklassen treffen. Bisher haben wir nur Aussagen über die Konvergenz an sich, diese kann aber beliebig langsam ausfallen. Daher ist es eine interessante Frage mit welcher Geschwindigkeit ein Verfahren konvergiert.

3 Methoden zur Fehlerabschätzung

3.1 Peano-Kerne

In der Einleitung haben wir einige Quadraturformeln kennengelernt, unter anderem die Mittelpunkregel und die Gauß-Quadratur. Die Konvergenz dieser Quadraturformeln haben wir anschließend in Kapitel 2 untersucht. Wichtige Kriterien für die Konvergenz sind die Positivität der Gewichte und die Konvergenz der Quadraturformel für Polynome. Betrachtet man nun summierte Quadraturformeln, so erkennt man einen unmittelbaren Zusammenhang zwischen der Konvergenzordnung und ihrer Exaktheit für Polynome gewissen Grades.

In diesem Abschnitt bestimmen wir die Konvergenzordnung von summierten Quadraturformeln im Eindimensionalen. Dies werden wir zuerst beispielhaft für die Mittelpunkregel durchführen und anschließend, mit Hilfe des Satzes von PEANO, auch für die Gauß-Quadratur. Zum Abschluss formulieren wir den Satz von PEANO für beliebige summierte Quadraturformeln .

3.1.1 Fehlerabschätzungen im Eindimensionalen

Die Idee der summierten Quadraturformeln besteht in der Unterteilung des Integrationsintervalls in Teilintervalle, der Durchführung einer Quadratur auf jedem dieser Teilintervalle und der anschließenden Summierung der berechneten Werte zu einer Approximation des Integrals. Sei dazu $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$ eine Unterteilung des Intervalls $[a, b]$. Wählen wir eine äquidistante Verteilung der Punkte $x_i, i = 0, \dots, N$, so ergibt sich für die Schrittweite $h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{N}$. In diesem Kapitel geben die Punkte x_i die Unterteilung des Intervalls $[a, b]$ und nicht die Stützstellen einer Quadraturformel an. Die Stützstellen einer summierten Quadraturformel liegen in den Intervallen $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, N - 1$. Zum Beispiel gilt für die summierte Mittelpunkregel im Eindimensionalen

$$Q[f] := h \sum_{i=0}^{N-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right).$$

Für den Quadraturfehler $E[f]$ gilt folgendes Lemma.

Lemma 3.1.1. *Ist $f \in C^2[a, b]$, dann gilt für den Fehler der summierten Mittelpunkregel*

$$|E[f]| \leq \frac{h^2}{24}(b-a) \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|.$$

Beweis. Einen ersten Beweis führen wir mit Hilfe partieller Integration. Wir betrachten den Quadraturfehler $E_{[x_i, x_{i+1}]}$ auf dem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$

$$E_{[x_i, x_{i+1}]}[f] = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx - (x_{i+1} - x_i) f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right), \quad i = 0, \dots, N-1.$$

Durch Aufspalten des Integrals und partieller Integration erhalten wir

$$\begin{aligned} E_{[x_i, x_{i+1}]}[f] &= \int_{x_i}^{x_i+h/2} f(x) dx + \int_{x_i+h/2}^{x_{i+1}} f(x) dx - (x_{i+1} - x_i) f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \\ &= x_i \left(f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) - f(x_i) \right) - \int_{x_i}^{x_i+h/2} x f'(x) dx \\ &\quad + x_{i+1} \left(f(x_{i+1}) - f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \right) - \int_{x_i+h/2}^{x_{i+1}} x f'(x) dx \\ &= - \int_{x_i}^{x_i+h/2} (x - x_i) f'(x) dx + \int_{x_i+h/2}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x) f'(x) dx. \end{aligned}$$

Erneute Anwendung partieller Integration auf die beiden Integrale liefert

$$\begin{aligned} E_{[x_i, x_{i+1}]}[f] &= - \frac{1}{2} (x - x_i)^2 f'(x) \Big|_{x_i}^{x_i+h/2} + \int_{x_i}^{x_i+h/2} \frac{(x - x_i)^2}{2} f''(x) dx \\ &\quad - \frac{1}{2} (x_{i+1} - x)^2 f'(x) \Big|_{x_i+h/2}^{x_{i+1}} + \int_{x_i+h/2}^{x_{i+1}} \frac{(x_{i+1} - x)^2}{2} f''(x) dx \\ &= \int_{x_i}^{x_i+h/2} \frac{(x - x_i)^2}{2} f''(x) dx + \int_{x_i+h/2}^{x_{i+1}} \frac{(x_{i+1} - x)^2}{2} f''(x) dx. \end{aligned}$$

Damit lässt sich der Quadraturfehler auf $[x_i, x_{i+1}]$, unter der Annahme $f \in C^2[a, b]$, abschätzen durch

$$\begin{aligned} |E_{[x_i, x_{i+1}]}[f]| &\leq \frac{1}{2} \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]} |f''(x)| \left(\int_{x_i}^{x_i+h/2} (x - x_i)^2 dx + \int_{x_i+h/2}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x)^2 dx \right) \\ &= \frac{h^3}{24} \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]} |f''(x)|. \end{aligned}$$

Dadurch erhalten wir für den Quadraturfehler auf $[a, b]$

$$|E[f]| \leq \sum_{i=0}^{N-1} |E_{[x_i, x_{i+1}]}[f]| \leq \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h^3}{24} \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]} |f''(x)| = \frac{h^2}{24} (b - a) \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|.$$

□

Aber schon unter weit schwächeren Voraussetzungen erhalten wir die gleiche Fehlerordnung.

Lemma 3.1.2. *Ist $f'' \in L^1(a, b)$, so hat der Fehler der summierten Mittelpunkregel die Ordnung zwei.*

Beweis. Wie nutzen partielle Integration wie im Beweis zuvor.

$$\begin{aligned} |E_{[x_i, x_{i+1}]}| &= \left| \int_{x_i}^{x_i + \frac{h}{2}} \frac{(x - x_i)^2}{2} f''(x) \, dx + \int_{x_i + \frac{h}{2}}^{x_{i+1}} \frac{(x_{i+1} - x)^2}{2} f''(x) \, dx \right| \\ &\leq \max_{x \in [x_i, x_i + \frac{h}{2}]} \frac{(x - x_i)^2}{2} \int_{x_i}^{x_i + \frac{h}{2}} |f''(x)| \, dx + \max_{x \in [x_i + \frac{h}{2}, x_{i+1}]} \frac{(x_{i+1} - x)^2}{2} \int_{x_i + \frac{h}{2}}^{x_{i+1}} |f''(x)| \, dx \\ &= \frac{h^2}{8} \int_{x_i}^{x_{i+1}} |f''(x)| \, dx. \end{aligned}$$

Summieren wir über alle Teilintervalle so bleibt die Fehlerordnung erhalten:

$$|E[f]| \leq \frac{h^2}{8} \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} |f''(x)| \, dx = \frac{h^2}{8} \int_a^b |f''(x)| \, dx.$$

□

Eine allgemeine Methode zur Abschätzung des Quadraturfehlers bietet das Konzept der PEANO-Kerne. GIUSEPPE PEANO (1858-1932) lehrte an der Universität von Turin. In den Jahren 1915-1918 organisierte er an allen Samstag Mathematikerkonferenzen, um die Qualität an den Turiner Schulen zu heben. Mehrere auf diesen Konferenzen von ihm gehaltene Referate beschäftigten sich mit der numerischen Approximation und der Darstellung von Restgliedern verschiedener Quadraturformeln. Hieraus entstand die Restglieddarstellung mit PEANO-Kernen. Für eine ausführlich Biographie PEANOS sei auf KENNEDY [17] verwiesen. Der folgende Satz findet sich in ENGELS [10].

Satz 3.1.3 (PEANO). *Sei $f \in C^{k+1}[-1, 1]$ und $Q[f]$ eine Quadraturformel vom Grad $m \geq k \geq 0$. Dann hat der Quadraturfehler $E[f] = I[f] - Q[f]$ die Darstellung*

$$E[f] = \frac{1}{k!} \int_{-1}^1 K(t) f^{(k+1)}(t) \, dt.$$

Dabei ist $K(t) = K_k(t) = E^x[(x - t)_+^k]$ der Peano-Kern von $Q[f]$, wobei

$$(x - t)_+^m = \begin{cases} (x - t)^m & \text{für } x \geq t \\ 0 & \text{für } x < t \end{cases}.$$

Die Bezeichnung E^x bedeutet die Anwendung des Fehlerfunctionals E bezüglich der Variablen x .

Beweis. Wir zeigen als erstes, dass die folgende Darstellung für f gilt:

$$f(x) = \sum_{\nu=0}^k \frac{f^{(\nu)}(0)}{\nu!} x^\nu + \int_0^x \frac{(x-t)^k}{k!} f^{(k+1)}(t) \, dt. \quad (3.1.1)$$

Die Darstellung ist richtig für $k = 0$ aufgrund der Differenzierbarkeitseigenschaften von f ,

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

Mit Hilfe vollständiger Induktion und partieller Integration erhält man

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu=0}^k \frac{f^{(\nu)}(0)}{\nu!} x^\nu + \int_0^x \frac{(x-t)^k}{k!} f^{(k+1)}(t) dt \\ &= f(x) + \frac{x^k}{k!} f^k(0) + \frac{(x-t)^k}{k!} f^k(t) \Big|_0^x \\ &= f(x). \end{aligned}$$

Wenden wir nun das Fehlerfunktional E auf (3.1.1) an, so erhalten wir unter der Voraussetzung, dass die Quadraturformel $Q[f]$ einen Grad $m \geq k$ hat:

$$E[f] = \frac{1}{k!} E \left[\int_0^1 (x-t)_+^k f^{(k+1)}(t) dt \right].$$

Wegen der Stetigkeit des Integranden für $k > 0$ und der Linearität von $E[f]$ und des Integrals gilt

$$E[f] = \frac{1}{k!} \int_0^1 E^x [(x-t)_+^k] f^{(k+1)}(t) dt,$$

und wir erhalten nach einer Skalierung die gewünschte Darstellung. Für $k = 0$ ist der Integrand nicht mehr stetig (siehe Abbildung 3.1.1 und 3.1.2 für Beispiele). Allerdings lässt sich in diesem Fall das Fehlerfunktional stückweise schreiben. \square

Benutzen wir Satz 3.1.3 als erstes, um eine Fehlerabschätzung für die summierte Mittelpunkregel unter optimalen Bedingungen an den Integranden zu erhalten.

Beispiel 3.1.4. Sei $f \in C^2[a, b]$ und somit $k = 1$. Der PEANO-KERN der summierten Mittelpunkregel (siehe Abbildung 3.1.1) hat auf dem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ mit der Kurzschreibweise $E_i[f] := E_{[x_i, x_{i+1}]}[f]$ die Form

$$\begin{aligned} K_1(t) &= E_i^x [(x-t)_+^k] = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-t)_+ dx - h(x_i + \frac{h}{2} - t)_+ \\ &= \frac{1}{2}(x_{i+1} - t)^2 - h \begin{cases} (x_i + \frac{h}{2} - t) & \text{für } t \leq x_i + \frac{h}{2} \\ 0 & \text{für } t > x_i + \frac{h}{2}. \end{cases} \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich

$$\begin{aligned} |E[f]| &\leq \sum_{i=0}^{N-1} \left| \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_1(t) f''(t) dt \right| \\ &\leq \sum_{i=0}^{N-1} \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]} |f''(x)| \int_{x_i}^{x_{i+1}} |K_1(t)| dt \\ &= \frac{h^2}{24} (b-a) \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|. \end{aligned}$$

\triangle

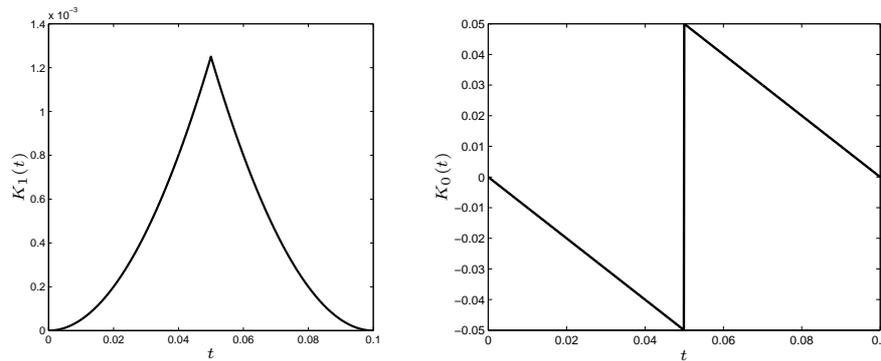


Abbildung 3.1.1: Peano-Kerne $K_1(t)$ und $K_0(t)$ auf $[0, h]$ mit $h=0.1$

Wie zu erwarten erhalten wir die gleiche Fehlerabschätzung wie mit Hilfe der partiellen Integration. Dort hatten wir zwei Mal partielle Integration angewendet. Bricht man schon nach der ersten partiellen Integration ab, so ergeben sich Fehlerabschätzungen unter geringeren Differenzierbarkeitsanforderungen an f . Die Darstellung mit Peano-Kernen liefert auch diese Abschätzungen.

Benutzen wir noch einmal Satz 3.1.3 um eine Fehlerabschätzung unter suboptimalen Bedingungen, hier falls $f \in C^1[a, b]$, herzuleiten.

Beispiel 3.1.5. Der PEANO-Kern der summierten Mittelpunkregel (siehe Abbildung 3.1.1) berechnet sich zu

$$\begin{aligned} K_0(t) &= E^x[(x-t)_+^0] = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-t)_+^0 dx - h(x_i + \frac{h}{2} - t)_+^0 \\ &= \begin{cases} x_i - t & \text{für } t \leq x_i + \frac{h}{2} \\ x_{i+1} - t & \text{für } t > x_i + \frac{h}{2} \end{cases}. \end{aligned}$$

Analog zu den obigen Überlegungen erhalten wir daraus

$$|E[f]| \leq \frac{h}{4}(b-a) \max_{x \in [a,b]} |f'(x)|.$$

△

Wir wollen nun die summierte Gauß-Quadratur betrachten und den PEANO-Kern unter maximalen Regularitätseigenschaften an f berechnen.

Beispiel 3.1.6. Sei $f \in C^4[a, b]$, d.h. $k = 3$. Für die summierte Gauß-Quadratur gilt

$$Q[f] = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (f(x_i^+) + f(x_i^-)),$$

wobei $x_i^+ := x_i + h(\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}})$ und $x_i^- := x_i + h(\frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}})$. Aus Satz 3.1.3 ergibt sich

$$|E[f]| \leq \frac{1}{k!} \max_{x \in [a,b]} |f^{(k+1)}(x)| \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)| dt.$$

Wir berechnen den Peano-Kern $K(t)$ auf den Intervallen $[x_i, x_{i+1}]$. O.B.d.A. genügt es $K(t)$ auf dem Referenzintervall $[0, h]$ zu bestimmen:

$$\begin{aligned} K_3(t) &= E^x[(x-t)_+^3] \\ &= \int_0^h (x-t)_+^3 dx - \frac{h}{2} [(x^- - t)_+^3 + (x^+ - t)_+^3] \\ &= \frac{1}{4}(h-t)^4 - \frac{h}{2} \begin{cases} \left(h\frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} - t\right)^3 & \text{für } h\frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} \geq t \\ 0 & \text{für } h\frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} < t \end{cases} - \frac{h}{2} \begin{cases} \left(h\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} - t\right)^3 & \text{für } h\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} \geq t \\ 0 & \text{für } h\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} < t. \end{cases} \end{aligned}$$

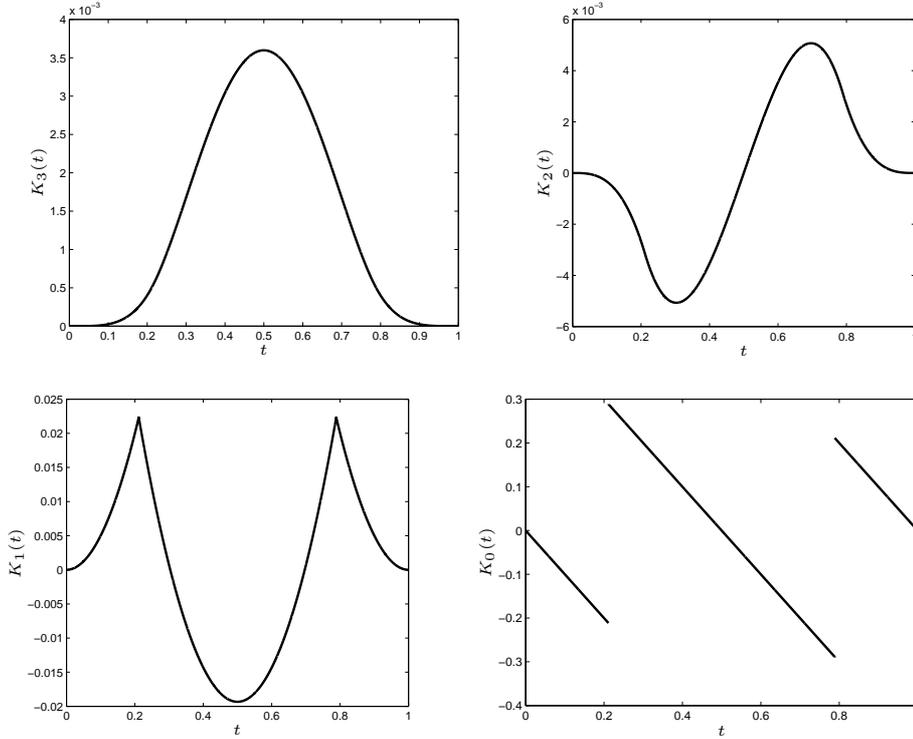


Abbildung 3.1.2: Peano-Kerne $K_k(t)$ auf $[0, 1]$, $k = 0, \dots, 3$

Da $K_3(t)$ sein Vorzeichen in $[0, h]$ nicht wechselt (siehe Abbildung 3.1.2), erhalten wir

$$\int_0^h |K_3(t)| = \left| \int_0^h K_3(t) dt \right| = \frac{h^5}{720}.$$

Insgesamt gilt damit für den Quadraturfehler der Gauß-Legendre-Quadratur

$$|E[f]| \leq \frac{h^4}{4320} \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)| (b-a).$$

△

Der Satz von Peano ist nicht nur anwendbar auf Funktionen $f \in C^{k+1}[a, b]$, sondern auch auf $K \in L^q(a, b)$ und $f^{(k+1)} \in L^p(a, b)$ mit $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. Dies folgt mit Hilfe eines Dichteschlusses aus der Dichtheit von $C^{k+1}[a, b]$ in $W^{k+1,p}(a, b)$. Wir formulieren den Satz von Peano für summierte Quadraturformeln unter dieser schwächeren Voraussetzung.

Satz 3.1.7. Sei $f^{(k+1)} \in L^p(a, b)$, $K \in L^q(a, b)$ mit $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ und $Q[f]$ eine summierte Quadraturformel vom Grad $m \geq k \geq 0$. Dann gilt für den Quadraturfehler

$$|E[f]| \leq \frac{1}{k!} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)| dt \right)^{1/q} |f|_{k+1,p}.$$

Beweis. Nach dem Satz von PEANO 3.1.3 gilt für den Quadraturfehler $E_i[f]$ auf dem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$

$$E_i[f] = \frac{1}{k!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} K(t) f^{(k+1)}(t) dt.$$

Mit Hilfe der HÖLDER-Ungleichung ergibt sich dann

$$\begin{aligned} |E_i[f]| &\leq \frac{1}{k!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)| |f^{(k+1)}(t)| dt \\ &\leq \frac{1}{k!} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)|^q dt \right)^{1/q} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} |f^{(k+1)}(t)|^p dt \right)^{1/p}. \end{aligned}$$

Summieren wir jetzt über alle Intervalle und wenden die diskrete Hölder-Ungleichung an, so erhalten wir

$$\begin{aligned} |E[f]| &\leq \frac{1}{k!} \sum_{i=0}^{N-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)|^q dt \right)^{1/q} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} |f^{(k+1)}(t)|^p dt \right)^{1/p} \\ &\leq \frac{1}{k!} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)|^q dt \right) \right)^{1/q} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} |f^{(k+1)}(t)|^p dt \right) \right)^{1/p} \\ &= \frac{1}{k!} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)|^q dt \right) \right)^{1/q} |f|_{k+1,p}. \end{aligned}$$

□

Beispiel 3.1.8. Wir wollen den Satz auf die summierte Mittelpunkregel mit einer äquidistanten Intervall-Unterteilung anwenden. Die Fehlerabschätzung soll optimal sein, wir wählen $k = 1$. Wir hatten schon den entsprechenden Peano-Kern mit

$$K_1(t) = \frac{1}{2}(x_{i+1} - t)^2 - h \begin{cases} (x_i + \frac{h}{2} - t) & \text{für } t \leq x_i + \frac{h}{2} \\ 0 & \text{für } t > x_i + \frac{h}{2} \end{cases}$$

in Beispiel 3.1.4 berechnet. Benutzen wir, dass der Peano-Kern positiv ist, so ergibt sich

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)|^q dt = \int_{x_i}^{x_{i+1}} K(t)^q dt = \frac{h^{2q+1}}{(2q+1)2^{3q}}.$$

Somit ist

$$\frac{1}{k!} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} |K(t)|^q dt \right) \right)^{1/q} = \left(\frac{b-a}{2q+1} \right)^{1/q} \frac{h^2}{8}$$

und damit

$$|E[f]| \leq \left(\frac{b-a}{2q+1} \right)^{1/q} \frac{h^2}{8} |f|_{2,p}.$$

Für $p = \infty$ und $q = 1$, sowie für $p = 1$ und $q = \infty$, ergeben sich die bekannten Fehlerabschätzungen. \triangle

Die Berechnung der Konvergenzordnung mündet in eine Berechnung des PEANO-Kerns. Die Genauigkeit der Fehlerkonstanten hängt damit von der Genauigkeit der Berechnung des Integrals über den PEANO-Kern ab. Später werden wir Fehlerabschätzungen mit Hilfe des Lemma's von BRAMBLE und HILBERT führen. Dabei bestimmen wir zwar die Konvergenzordnung, geben die Fehlerkonstante c aber nicht näher an. Mit dem Satz von PEANO besteht die Möglichkeit diese Fehlerkonstante im Eindimensionalen zu berechnen.

3.2 Sard-Kerne

Im letzten Abschnitt hatten wir den Satz von PEANO zur Fehlerabschätzung bei Quadraturformeln im Eindimensionalen kennengelernt. In diesem Abschnitt stellen wir eine Erweiterung von PEANO-Kernen auf zwei Raumdimensionen, wie von SARD im Jahr 1963 aufgezeigt [23], vor. Folgender Satz, nebst Definition, findet sich in ENGELS [10].

Definition 3.2.1. Die SARD-Kerne K_1^μ , K_2^μ und $K_{\kappa,\lambda}$ sind wie folgt definiert. Für $k > 0$ sei

$$\begin{aligned} K_1^\mu(u) &:= E^{x,y}[y^\mu(x-u)_+^{k-\mu}], & \mu = 0, 1, \dots, \kappa, & (x,y) \in \bar{\Omega} \\ K_2^\mu(v) &:= E^{x,y}[x^\mu(y-v)_+^{k-\mu}], & \mu = 0, 1, \dots, \kappa, & (x,y) \in \bar{\Omega} \\ K_{\kappa,\kappa}(u,v) &:= E^{x,y}[(x-u)_+^\kappa(y-v)_+^\kappa], & k = 2\kappa + 1, & (x,y) \in \bar{\Omega} \\ K_{\kappa,\kappa-1}(u,v) &:= E^{x,y}[(x-u)_+^\kappa(y-v)_+^{\kappa-1}], & k = 2\kappa, & (x,y) \in \bar{\Omega}. \end{aligned}$$

Dabei bezeichne $E^{x,y}$ die Anwendung des Fehlerfunktionals bezüglich der Variablen x und y .

Im weiteren Verlauf sei $\Omega \subsetneq \mathbb{R}^2$ ein Gebiet mit $(0, 0) \in \overline{\Omega}$ und es gelte $x \geq 0$ und $y \geq 0$ für alle $(x, y) \in \overline{\Omega}$. Außerdem seien im folgenden Satz $\tau = \tau(y) > 0$ und $\sigma = \sigma(x) > 0$ Zahlen mit $(\tau, y) \in \partial\Omega$, und $(x, \sigma) \in \partial\Omega$ (siehe Abbildung 3.2.1). Ferner definieren wir

$$\Sigma^* = \begin{cases} \Sigma & \text{für } k = 2\kappa + 1 \\ \Sigma' & \text{für } k = 2\kappa \end{cases} \text{ mit } \sum_{\mu=0}^{\kappa} a_{\mu} = a_0 + a_1 + \dots + a_{\kappa-1} + \frac{1}{2}a_{\kappa}.$$

Der Satz von SARD bietet nun eine Möglichkeit den Quadraturfehler für Funktionen $f \in C^{k+1}(\overline{\Omega})$ abzuschätzen.

Satz 3.2.2 (SARD). *Sei Ω ein glatt berandetes, beschränktes Gebiet, $f \in C^{k+1}(\overline{\Omega})$ und $Q[f]$ eine Quadraturformel vom Grad $m \geq k > 0$. Dann kann das Fehlerfunktional $E[f] = I[f] - Q[f]$ dargestellt werden als*

$$E[f] = \frac{1}{k!} \sum_{\mu=0}^{\kappa} \binom{k}{\mu} \left[\int_0^{\tau} K_1^{\mu} f_{k+1-\mu, \mu}(u, 0) du + \int_0^{\sigma} K_2^{\mu}(v) f_{\mu, k+1-\mu}(0, v) dv \right] \\ + \begin{cases} \frac{1}{\kappa! \kappa!} \iint_{\Omega} K_{\kappa, \kappa}(u, v) f_{\kappa+1, \kappa+1}(u, v) du dv, & \text{für } k = 2\kappa + 1 \\ \frac{1}{2(\kappa-1)! \kappa!} \left[\iint_{\Omega} K_{\kappa, \kappa-1}(u, v) f_{\kappa+1, \kappa}(u, v) du dv \right. \\ \left. + \iint_{\Omega} K_{\kappa-1, \kappa}(u, v) f_{\kappa, \kappa+1}(u, v) du dv \right], & \text{für } k = 2\kappa. \end{cases}$$

Beweis. Ein Beweis findet sich bei ENGELS [10] auf S. 100 ff. Er beruht auf einer Taylorentwicklung mit dem Restglied in Integralschreibweise. Die Anwendung des Fehlerfunktionals E auf diese Entwicklung liefert die Restglieddarstellung durch SARD-Kerne. \square

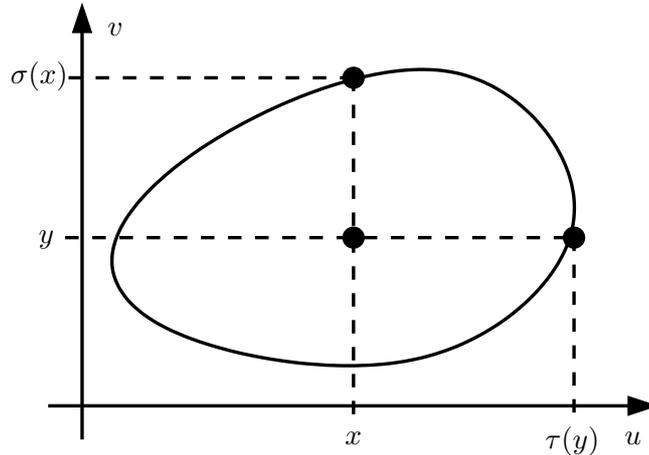


Abbildung 3.2.1: Definition von τ und σ für gegebene x, y

3.2.1 Fehlerabschätzungen im Zweidimensionalen

Anhand der Mittelpunkregel zeigen wir zunächst eine Abschätzung des Kubaturfehlers über eine Taylorentwicklung (Beispiel 3.2.3) und anschließend mit Hilfe von SARD-Kernen (Beispiel 3.2.4).

Beispiel 3.2.3. Als Beispiel betrachten wir die summierte Mittelpunkregel im Zweidimensionalen:

$$Q[f] = h_x h_y \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} f\left(x_i + \frac{h_x}{2}, y_j + \frac{h_y}{2}\right).$$

Ein Rechteckgebiet $\bar{\Omega} = [0, b] \times [0, d]$ sei dabei in x -Richtung äquidistant in M Teilintervalle unterteilt und in y -Richtung in N . Wir erhalten $M \times N$ Rechteckelemente mit den Seitenlängen h_x und h_y . Wir leiten nun eine Fehlerabschätzung mit Hilfe einer Taylorentwicklung um den Punkt $(x^*, y^*) := (x_i + h_x/2, y_j + h_y/2)$ her. Sei $f \in C^2(\bar{\Omega})$, so gilt

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(x^*, y^*) + f^{(1,0)}(x^*, y^*)(x - x^*) + f^{(0,1)}(x^*, y^*)(y - y^*) \\ &\quad + \frac{1}{2} f^{(2,0)}(\xi, \eta)(x - x^*)^2 + \frac{1}{2} f^{(0,2)}(\xi, \eta)(y - y^*)^2 + f^{(1,1)}(\xi, \eta)(x - x^*)(y - y^*) \end{aligned}$$

mit $(\xi, \eta) \in [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$. O.B.d.A. betrachten wir wieder nur das Element $[0, h_x] \times [0, h_y]$. Wenden wir das Fehlerfunktional E auf die Taylor-Entwicklung an, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \left| \int_0^{h_y} \int_0^{h_x} f(x, y) dx dy - h_x h_y f(h_x/2, h_y/2) \right| &\leq \max_{(x,y) \in [0, h_x] \times [0, h_y]} |f^{(1,1)}(x, y)| \frac{h_x^2 h_y^2}{16} \\ &\quad + \max_{(x,y) \in [0, h_x] \times [0, h_y]} |f^{(2,0)}(x, y)| \frac{h_x^3 h_y}{24} + \max_{(x,y) \in [0, h_x] \times [0, h_y]} |f^{(0,2)}(x, y)| \frac{h_x h_y^3}{24}. \end{aligned}$$

Aufsummieren liefert

$$|E[f]| \leq |\Omega| \left[\max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |f^{(2,0)}(\mathbf{x})| \frac{h_x^2}{24} + \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |f^{(0,2)}(\mathbf{x})| \frac{h_y^2}{24} + \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |f^{(1,1)}(\mathbf{x})| \frac{h_x h_y}{16} \right].$$

△

Betrachten wir im Folgenden eine Fehlerabschätzung mit Hilfe von SARD-Kernen.

Beispiel 3.2.4. Sei $f \in C^2(\bar{\Omega})$, mit $\bar{\Omega} = [0, b] \times [0, d]$ wie zuvor. Durch die Wahl des Gebietes vereinfachen sich τ und σ zu $\tau(y) = b$ und $\sigma(x) = d$. Nach dem Satz von SARD 3.2.2 können wir den Quadraturfehler $E[f]$ abschätzen durch

$$\begin{aligned} |E[f]| \leq \max_{x \in [0, b]} |f^{(2,0)}(x, 0)| \int_0^b |K_1^0(x)| dx + \max_{y \in [0, d]} |f^{(0,2)}(0, y)| \int_0^d |K_2^0(y)| dy \\ + \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |f^{(1,1)}(\mathbf{x})| \iint_{\Omega} |K_{0,0}(x, y)| dx dy. \end{aligned}$$

Betrachten wir das Referenzelement $[0, h_x] \times [0, h_y]$. Wir erhalten für die SARD-Kerne der summierten Mittelpunkregel

$$\int_0^{h_x} |K_1^0(u)| du = \frac{1}{24} h_x^3 h_y, \quad \int_0^{h_y} |K_2^0(v)| dv = \frac{1}{24} h_x h_y^3 \text{ und}$$

$$\int_0^{h_y} \int_0^{h_x} |K_{0,0}(u, v)| du dv = \frac{7}{32} h_x^2 h_y^2.$$

Dabei entsprechen die Kerne K_1^0 und K_2^0 dem schon bekannten Kern K_1 aus Abbildung 3.1.1. Aufsummieren über alle Elemente der Zerlegung liefert

$$|E[f]| \leq |\Omega| \left[\frac{1}{24} \left(\max_{\mathbf{x} \in \Omega} |f^{(2,0)}(\mathbf{x})| h_x^2 + \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |f^{(0,2)}(\mathbf{x})| h_y^2 \right) + \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |f^{(1,1)}(\mathbf{x})| \frac{7}{32} h_x h_y \right].$$

Bei der summierten Quadraturformel ist dabei zu beachten, dass der Satz von SARD auf jedem Element der Zerlegung angewendet wird. Die Fehlerabschätzung hat eine schlechtere Fehlerkonstante, als die einfache Fehlerabschätzung mit Hilfe der Taylorentwicklung. Dies liegt daran, dass wir über den Betrag von $K_{0,0}$ integrieren, und $K_{0,0}$ auf Ω sein Vorzeichen wechselt (siehe Abbildung 3.2.2).

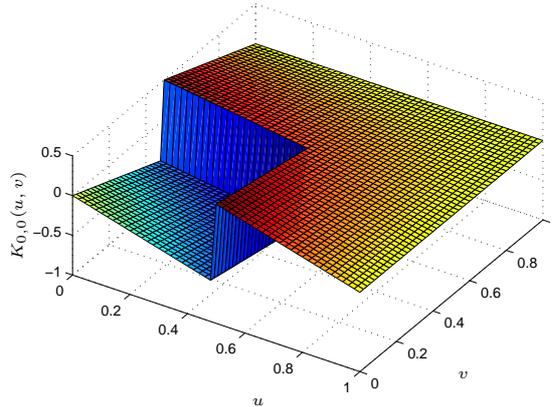


Abbildung 3.2.2: Sard-Kern $K_{0,0}$ für Mittelpunkregel auf $[0, 1] \times [0, 1]$

△

Beispiel 3.2.5. Als weiteres Beispiel betrachten wir die summierte Gauß-Legendre-Regel

$$Q[f] = \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{h_x h_y}{4} \left[f(x_i^-, y_j^-) + f(x_i^+, y_j^-) + f(x_i^+, y_j^+) + f(x_i^-, y_j^+) \right]$$

mit den Punkten

$$(x_i^\pm, y_j^\pm) = \left(x_i + h_x \frac{\sqrt{3} \pm 1}{2\sqrt{3}}, y_j + h_y \frac{\sqrt{3} \pm 1}{2\sqrt{3}} \right).$$

In diesem Fall sind die Integrale über die Kerne K_1^0 , K_2^0 , K_1^1 , K_2^1 sowie $K_{1,1}$ zu bestimmen, wobei die Berechnungen der Kerne K_1^0 und K_2^0 , sowie K_1^1 und K_2^1 , zueinander symmetrisch sind. Die Kerne K_1^0 und K_2^0 entsprechen außerdem dem schon bekannten PEANO-Kern K_3 und die Kerne K_1^1 und K_2^1 dem Kern K_2 (siehe Abbildung 3.1.2). Für eine Darstellung des Sard-Kerns $K_{1,1}$ siehe Abbildung 3.2.3. Gut zu erkennen ist, dass die Funktion $K_{1,1}$ entlang der Linien $u = u_i$ und $v = v_i$ nicht stetig differenzierbar ist, wobei (u_i, v_i) ein Kubatur-Punkt ist. Man erhält

$$\begin{aligned} \int_0^{h_x} |K_1^0(u)| du &= \frac{h_x^5 h_y}{720}, & \int_0^{h_x} |K_2^0(v)| dv &= \frac{h_x h_y^5}{720} \\ \int_0^{h_x} |K_1^1(u)| du &= \frac{h_x^4 h_y^2 (9 - 4\sqrt{3})}{1728}, & \int_0^{h_x} |K_2^1(v)| dv &= \frac{h_x^2 h_y^4 (9 - 4\sqrt{3})}{1728} \\ \int_0^{h_y} \int_0^{h_x} |K_{1,1}(u, v)| du dv &\leq \frac{3h_x^3 h_y^3}{1000}. \end{aligned}$$

Dabei wurde die letzte Ungleichung durch numerische Integration über $|K_{1,1}|$ bestimmt. Aufsummieren über alle Elemente der Zerlegung liefert

$$\begin{aligned} |E[f]| \leq c |\Omega| &\left[\max_{\mathbf{x} \in \Omega} |f^{(4,0)}(\mathbf{x})| h_x^4 + \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |f^{(0,4)}(\mathbf{x})| h_y^4 \right. \\ &\left. + \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |f^{(3,1)}(\mathbf{x})| h_x^3 h_y + \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |f^{(1,3)}(\mathbf{x})| h_x h_y^3 + \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |f^{(2,2)}(\mathbf{x})| h_x^2 h_y^2 \right] \end{aligned}$$

mit einer Konstanten c , die nicht von der Zerlegung abhängt.

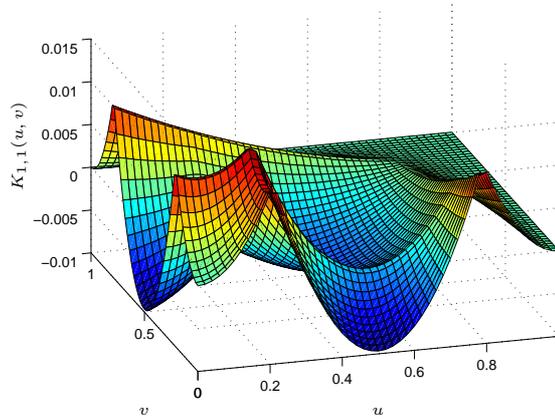


Abbildung 3.2.3: Sard-Kern $K_{1,1}$ für Gauß-Quadratur auf $[0, 1] \times [0, 1]$

△

Zum Schluss dieses Abschnittes sei noch auf einige Verallgemeinerungen des Satzes von SARD hingewiesen. Wir haben unter der Voraussetzung $f \in C^{k+1}(\bar{\Omega})$ und abhängig von

dem Parameter k eine Fehlerabschätzung mit Hilfe aller partiellen Ableitungen gegeben. Falls noch weitere einzelne partielle Ableitungen höherer Ordnung existieren, können diese in die Entwicklung mit einbezogen werden. Für entsprechende Sätze siehe STROUD [25, Kapitel 5]. Verallgemeinerungen der von STROUD gegebenen Sätze und vollständige Beweise finden sich bei SARD [23, Kapitel 4]. Neben der Anwendung auf Funktionen $f \in C^{k+1}(\bar{\Omega})$ lassen sich mit Hilfe der HÖLDER-Ungleichung und eines Dichteschlusses auch Abschätzungen für Funktionen geben, deren partielle Ableitungen zu einer gewissen Potenz integrierbar sind. Allerdings ist in diesem Setting mit SOBOLEW-Räumen $W^{k+1,p}(\Omega)$ darauf zu achten, dass $(k+1)p > d$ gilt. Ansonsten könnten die Funktionswerte an den Quadraturpunkten, die eine Nullmenge bilden, abgeändert werden. Damit wäre eine Konvergenz der Quadraturformel gegen das Integral nicht gegeben.

Mit Hilfe von SARD-Kernen lässt sich die Konvergenzordnung von summierten Quadraturformeln im Zweidimensionalen angeben. Desweiteren ist eine genaue Bestimmung der Fehlerkonstanten möglich. Eine Erweiterung in höhere Dimensionen ist denkbar, wird aber aufwändig. Im nächsten Abschnitt verzichten wir daher auf die genaue Bestimmung der Fehlerkonstanten und beschränken uns auf die Fehlerordnung. Der Ansatz mit Hilfe des Lemma's von BRAMBLE-HILBERT erlaubt uns Fehlerordnungen in beliebigen Dimensionen zu bestimmen.

3.3 Das Lemma von Bramble und Hilbert

Das Lemma von BRAMBLE und HILBERT aus dem Jahr 1970 [30] gibt eine Abschätzung von linearen, beschränkten Funktionalen auf SOBOLEW-Räumen, die für Polynome eines gewissen Grades verschwinden. Anwendung finden solche Funktionale z.B. bei der Approximation und Interpolation von Funktionen.

Im Gegensatz zu Abschätzungen mit PEANO- und SARD-Kernen, in denen die Form der Kerne bekannt sein müssen, erlaubt das Lemma von BRAMBLE und HILBERT Abschätzungen unter Voraussetzungen, die einfach zu prüfen sind. In einer weiteren Arbeit [31] aus dem Jahre 1971 verallgemeinern die beiden Autoren ihre Ergebnisse auf Klassen von Polynomen \mathcal{P}^K , die zwischen \mathcal{P}^{k-1} und \mathcal{P}^k liegen. Die Beweise sind in dem Sinne nicht konstruktiv, als dass sie keine Bestimmung der Fehlerkonstanten c in der Abschätzung erlauben. DUPON und SCOTT veröffentlichen in ihrer Arbeit [42] aus dem Jahr 1980 konstruktive Beweise, aus denen ersichtlich wird, wie die Konstante c bestimmt werden kann. In unseren Betrachtungen interessiert uns vor allem die Fehlerordnung einer summierten Quadraturformel, und nicht so sehr die Konstante. Daher verweisen wir nur auf die Abschnitte über PEANO- und SARD-Kernen für eine Möglichkeit der Berechnung.

3.3.1 Fehlerabschätzungen in beliebigen Dimensionen

Wir beginnen mit dem Lemma von BRAMBLE und HILBERT und dessen Beweis. Anschließend beschreiben wir die Vorgehensweise zur Bestimmung der Fehlerordnung einer summierten Quadraturformel. Im Folgenden sei $T \subsetneq \mathbb{R}^d$ ein beschränktes Gebiet. Für den Beweis des Lemma's von BRAMBLE und HILBERT verwenden wir folgendes Lemma.

Lemma 3.3.1 (DENY-LIONS). *Auf dem Faktorraum $W^{m+1,p}(T)/\mathcal{P}^m(T)$ ist $|\cdot|_{m+1,p}$ zur Quotientennorm äquivalent. Es existiert somit ein $c > 0$, so dass $\forall v \in W^{m+1,p}(T)$*

$$\|[v]\|_{W^{m+1,p}(T)} := \inf_{q \in \mathcal{P}^m(T)} \|v + q\|_{m+1,p} \leq c |v|_{m+1,p}.$$

Bemerkung. Die Abschätzung ist auch umgekehrt erfüllt, da für jedes Polynom $p \in \mathcal{P}^m(T)$

$$\|v + p\|_{m+1,p} = (|v|_{m+1,p}^p + \|v + p\|_{m,p}^p)^{1/p} \geq |v|_{m+1,p}$$

gilt.

Beweis. Ein Beweis findet sich z.B. in CIARLET [5, Kap. 3, S. 115f]. □

Formulieren wir nun das Lemma von BRAMBLE und HILBERT.

Lemma 3.3.2 (BRAMBLE-HILBERT). *Sei F ein lineares, beschränktes Funktional auf $W^{m+1,p}(T)$ und gelte*

$$F(q) = 0 \quad \forall q \in \mathcal{P}^m(T).$$

Dann gibt es eine Konstante c , die vom Gebiet T abhängt, so dass für alle $v \in W^{m+1,p}(T)$ gilt

$$|F(v)| \leq c \|F\|_{(W^{m+1,p}(T))^*} |v|_{m+1,p},$$

wobei $\|\cdot\|_{(W^{m+1,p}(T))^*}$ die Norm auf dem Dualraum von $W^{m+1,p}(T)$ ist.

Bemerkung. Das Besondere dieses Lemmas ist die Abschätzung durch die *Halbnorm*. Eine Abschätzung mit der $\|\cdot\|_{m+1,p}$ -Norm erhält man schon aus der Beschränktheit des Funktionals F .

Beweis. Seien $v \in W^{m+1,p}(T)$ und $q \in \mathcal{P}^m(T)$. Das Funktional F ist nach Voraussetzung linear und beschränkt und annulliert sämtliche Polynome p aus $\mathcal{P}^m(T)$. Man erhält somit

$$|F(v)| = |F(v) + F(q)| = |F(v + q)| \leq \|F\|_{(W^{m+1,p}(T))^*} \|v + q\|_{m+1,p}.$$

Mit dem Lemma von Deny-Lions folgt

$$|F(v)| \leq \|F\|_{(W^{m+1,p}(T))^*} \inf_{q \in \mathcal{P}^m(T)} \|v + q\|_{m+1,p} \leq c \|F\|_{(W^{m+1,p}(T))^*} |v|_{m+1,p}.$$

□

Um Fehlerabschätzungen mit dem Lemma von Bramble und Hilbert zu erhalten, werden wir folgende Schritte durchführen:

1. Transformation auf ein Referenzelement,
2. Abschätzung auf dem Referenzelement,
3. Rücktransformation.

Im ersten Schritt transformieren wir ein beliebiges Element auf das Referenzelement (z.B. das Einheitsdreieck oder das Einheitsquadrat). In einem zweiten Schritt folgt die Abschätzung mit dem Lemma von Bramble-Hilbert auf diesem Referenzelement. Im letzten Schritt müssen wir nun noch zurücktransformieren und erhalten so die Abschätzung für ein beliebiges Element.

Um Elemente von Zerlegungen charakterisieren zu können, benötigen wir noch einige Größen, insbesondere den Durchmesser $\text{diam}(T)$ sowie $\rho(T)$.

Definition 3.3.3. Der *Durchmesser* eines Elementes T sei mit

$$\text{diam}(T) := \sup\{|x - y| \mid x, y \in T\}$$

bezeichnet. Im Zweidimensionalen ist $\text{diam}(T)$ für ein Rechteck die Länge der Diagonalen und für ein Dreieck die Länge der größten Seite. Mit

$$\rho(T) := \sup\left\{\frac{\text{diam}(S)}{2} \mid S \text{ ist eine Kugel in } \mathbb{R}^d \text{ und } S \subset T\right\}.$$

bezeichnen wir den *Radius der größten in T eingeschriebenen euklidischen Kugel*. Damit ist $\rho(T)$ im Zweidimensionalen für ein Rechteck die Hälfte der Länge der kleinsten Seite und für ein Dreieck der Inkreisradius.

Im Folgenden betrachten wir der Einfachheit halber den zweidimensionalen Fall. Alle Ergebnisse lassen sich aber auf höhere Dimensionen übertragen.

Transformation auf das Referenzelement

Für die Fehlerabschätzung müssen wir ein beliebiges Element auf das Referenzelement abbilden können. Wir beschränken uns zunächst auf Dreiecke. Seien $\mathbf{b}_{1,T}$, $\mathbf{b}_{2,T}$ und $\mathbf{b}_{3,T}$ die Eckpunkte des zu transformierenden Elementes. Die Koordinaten von $\mathbf{b}_{i,T}$ seien (x_i, y_i) ; $\mathbf{b}_{1,T}$ werde auf $(0, 0)$ abgebildet, $\mathbf{b}_{2,T}$ auf $(1, 0)$ und $\mathbf{b}_{3,T}$ auf $(0, 1)$. Dann können wir durch

$$F_T \left(\begin{bmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{bmatrix} \right) = B_T \begin{bmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{bmatrix} + \mathbf{b}_T$$

die Koordinaten $\hat{x}, \hat{y} \in E$ des Einheitselementes auf ein beliebiges Element transformieren. Dabei ist

$$B_T := [\mathbf{b}_{2,T} - \mathbf{b}_{1,T}, \mathbf{b}_{3,T} - \mathbf{b}_{1,T}] = \begin{bmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{b}_T = \mathbf{b}_{1,T} = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}.$$

Mit Hilfe der Abbildung F_T^{-1} lassen sich beliebige Elemente auf das Referenzelement abbilden. Natürlich können wir durch die affin-lineare Abbildung F nicht nur Dreiecke, sondern auch Rechtecke und sogar Parallelogramme auf ihr Referenzelement abbilden, da die vierte Seite schon durch die ersten drei festgelegt ist.

Auch im Eindimensionalen lässt sich das Einheitsintervall $[-1, 1]$ durch die einfache Abbildung

$$F_I(\hat{x}) = \frac{(\hat{x} + 1)(b - a)}{2} + a$$

auf ein beliebiges Intervall $[a, b]$ abbilden.

Lemma 3.3.4. *Seien T und \hat{T} zwei Drei- oder Rechtecke und sei $F_T : \hat{T} \rightarrow T$, $F_T(\hat{\mathbf{x}}) = B_T \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}_T$ eine bijektive, affin-lineare Abbildung. Dann gilt in der Spektralnorm $\|\cdot\|_2$*

$$\|B_T\|_2 \leq \frac{1}{2} \frac{\text{diam}(T)}{\rho_{\hat{T}}},$$

$$\|B_T^{-1}\|_2 \leq \frac{1}{2} \frac{\text{diam}(\hat{T})}{\rho_T}.$$

Beweis. Für die Norm von B_T gilt

$$\|B_T\|_2 = \sup_{\hat{\mathbf{z}} \neq \mathbf{0}} \frac{|B_T \hat{\mathbf{z}}|}{|\hat{\mathbf{z}}|} = \sup_{|\hat{\mathbf{z}}|=2\rho_{\hat{T}}} \frac{|B_T \hat{\mathbf{z}}|}{2\rho_{\hat{T}}}$$

Sei $\hat{\mathbf{z}} := \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{x}}$. Wir betrachten nur Vektoren $\hat{\mathbf{x}}$ und $\hat{\mathbf{y}}$ auf der Peripherie des Inkreises von \hat{T} . Mit Hilfe einer Nullergänzung ergibt sich

$$\begin{aligned} B_T \hat{\mathbf{z}} &= (B_T \hat{\mathbf{y}} + \mathbf{b}_T) - (B_T \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}_T) \\ &= F_T(\hat{\mathbf{y}}) - F_T(\hat{\mathbf{x}}) =: \mathbf{y} - \mathbf{x}. \end{aligned}$$

Da F_T surjektiv ist, liegen $\mathbf{y} = F_T(\hat{\mathbf{y}})$ und $\mathbf{x} = F_T(\hat{\mathbf{x}})$ in T . Damit gilt $|\mathbf{y} - \mathbf{x}| \leq \text{diam}(T)$. Insgesamt erhalten wir

$$\|B_T \hat{\mathbf{z}}\|_2 = |\mathbf{y} - \mathbf{x}| \leq \text{diam}(T)$$

und somit

$$\|B_T\|_2 \leq \frac{1}{2} \frac{\text{diam}(T)}{\rho_{\hat{T}}}.$$

Für die zweite Abschätzung ersetzen wir T durch \hat{T} . □

Lemma 3.3.5. *Sei \hat{T} das Einheitsdreieck, $F_T(\hat{\mathbf{x}}) = B_T \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}_T$ eine bijektive, affin-lineare Abbildung von \hat{T} auf T . Für eine hinreichend glatte Funktion $\hat{f} : \hat{T} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f = \hat{f} \circ F_T^{-1}$, d.h. $f(\mathbf{x}) = \hat{f}(F_T^{-1}(\mathbf{x}))$, gilt:*

$$\int_T f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 2|T| \int_{\hat{T}} \hat{f}(\hat{\mathbf{x}}) \, d\hat{\mathbf{x}} \tag{3.3.1}$$

$$\left| \hat{f} \right|_{m,2,\hat{T}} \leq c |\det B_T|^{-1/2} \|B_T\|^m |f|_{m,2,T} \tag{3.3.2}$$

$$|f|_{m,2,T} \leq c |\det B_T|^{1/2} \|B_T^{-1}\|^m \left| \hat{f} \right|_{m,2,\hat{T}} \tag{3.3.3}$$

Beweis. Mit Hilfe der Transformationsformel erhält man

$$\begin{aligned} \int_T f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_{\hat{T}} \hat{f}(\hat{\mathbf{x}}) |\det DF_T(\hat{\mathbf{x}})| \, d\hat{\mathbf{x}} \\ &= |\det B_T| \int_{\hat{T}} \hat{f}(\hat{\mathbf{x}}) \, d\hat{\mathbf{x}} \end{aligned}$$

mit $|\det B_T| = (x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (y_2 - y_1)(x_3 - x_1) = 2|T|$ und $|\hat{T}| = \frac{1}{2}$. Hier bezeichne DF_T die Jacobi-Matrix der Abbildung F_T . Der Betrag der Jacobi-Determinante ist gleich dem Doppelten des Flächeninhaltes von T . Dies erhält man z.B. mit der Formel von Heron für den den Flächeninhalt eines Dreiecks. Seien weiter $\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}, \hat{y})^T$ und $\mathbf{x} = (x, y)^T$, dann gilt nach der Kettenregel im \mathbb{R}^2 für die partielle Ableitung nach \hat{x} und \hat{y} von \hat{f}

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{x}}(\hat{x}, \hat{y}) &= \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) \frac{\partial x}{\partial \hat{x}} + \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) \frac{\partial y}{\partial \hat{x}} \\ \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{y}}(\hat{x}, \hat{y}) &= \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) \frac{\partial x}{\partial \hat{y}} + \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) \frac{\partial y}{\partial \hat{y}}.\end{aligned}$$

Dabei ist

$$\begin{aligned}\frac{\partial x}{\partial \hat{x}} &= x_2 - x_1, & \frac{\partial x}{\partial \hat{y}} &= x_3 - x_1, \\ \frac{\partial y}{\partial \hat{x}} &= y_2 - y_1, & \frac{\partial y}{\partial \hat{y}} &= y_3 - y_1.\end{aligned}$$

Für die zweiten Ableitungen gilt

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \hat{f}}{\partial \hat{x}^2}(\hat{x}, \hat{y}) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x, y)(x_2 - x_1)^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y)(x_2 - x_1)(y_2 - y_1) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x, y)(y_2 - y_1)^2 \\ \frac{\partial^2 \hat{f}}{\partial \hat{y}^2}(\hat{x}, \hat{y}) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x, y)(x_3 - x_1)^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y)(x_3 - x_1)(y_3 - y_1) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x, y)(y_3 - y_1)^2 \\ \frac{\partial^2 \hat{f}}{\partial \hat{x} \partial \hat{y}}(\hat{x}, \hat{y}) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x, y)(x_2 - x_1)(x_3 - x_1) + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y)(x_2 - x_1)(y_3 - y_1) \\ &\quad + \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x, y)(y_2 - y_1)(x_3 - x_1) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x, y)(y_2 - y_1)(y_3 - y_1).\end{aligned}$$

Wie man sieht, treten in den ersten Ableitungen Einträge der Matrix B_T in der ersten Potenz auf. In den zweiten Ableitungen treten Einträge von B_T zum Quadrat auf oder zwei kombinierte Einträge. Fährt man fort treten in der m -ten Ableitung jeweils m Einträge der Matrix B_T auf. Schätzen wir die einzelnen Einträge durch die Spektralnorm von B_T ab, so gilt

$$\begin{aligned}|(x_2 - x_1)| &\leq |(x_2 - x_1, y_2 - y_1)^T| = |B_T(1, 0)^T| \\ &\leq \|B_T\|_2 |(1, 0)^T| = \|B_T\|_2.\end{aligned}$$

Analog kann man die anderen Einträge der Matrix B_T durch die Spektralnorm von B_T abschätzen. Man erhält insgesamt

$$\left| \hat{f} \right|_{m,2,T}^2 = \sum_{|\alpha|=m} \int_{\hat{T}} \left| \partial^\alpha \hat{f}(\hat{\mathbf{x}}) \right|^2 d\hat{\mathbf{x}} \leq c |\det B_T|^{-1} \|B_T\|_2^{2m} |f|_{m,2,T}^2.$$

Nach Ziehen der Wurzel folgt die Behauptung. Analog führt man die Abschätzung für \hat{f} durch. \square

Bemerkung. Der allgemeine Beweis für $|\cdot|_{m,p,T}$ und $p \in [1, \infty]$ findet sich bei CIARLET [5, Kap. 3, S. 117 ff.]. So gilt der Satz nicht nur für Dreiecke, sondern für beliebige Elemente, die sich mit Hilfe einer affin-linearen Abbildung aufeinander transformieren lassen.

Satz 3.3.6. *Sei T ein offenes Dreieck. Falls die Quadraturformel Q_T exakt für Polynome mit Höchstgrad $k \geq 0$ ist und falls $\phi \in W^{n,p}(T)$ mit $np > d$ und $n \leq k + 1$ ist, dann gilt*

$$|E_T[\phi]| \leq c |T|^{1-\frac{1}{p}} (\text{diam}(T))^n |\phi|_{n,p,T} \quad (3.3.4)$$

mit einer Konstanten c , die unabhängig von T und ϕ ist.

Beweis. Wir haben vorausgesetzt, dass $np > d$ gelte. Daher gilt $W^{n,p}(T) \hookrightarrow C(\bar{T})$. Das Fehlerfunktional E_T ist linear und beschränkt in $W^{n,p}(\Omega)$, denn

$$|E_T[\phi]| \leq c_1 \|\phi\|_{0,\infty,T} \leq c_2 \|\phi\|_{n,p,T}.$$

Betrachten wir jetzt das Referenzelement \hat{T} . Da Q_T exakt für Polynome mit Grad k ist, gilt

$$E_{\hat{T}}[p] = \int_{\hat{T}} p(\hat{\mathbf{x}}) d\hat{\mathbf{x}} - Q_{\hat{T}}(p) = 0 \quad \forall p \in \mathcal{P}^k(\hat{T}).$$

Zusätzlich ist $E_{\hat{T}}$ linear und beschränkt in $W^{n,p}(\hat{T})$ für $\hat{\phi} \in W^{n,p}(\hat{T}) \hookrightarrow C(\bar{\hat{T}})$. Mit dem Lemma von Bramble-Hilbert erhalten wir sogar die Abschätzung

$$\left| E_{\hat{T}}[\hat{\phi}] \right| \leq c \left| \hat{\phi} \right|_{n,p,\hat{T}}.$$

Nun müssen wir noch die Rücktransformation durchführen um eine Abschätzung auf T zu erhalten. Sei dazu wie gewohnt F_T die affin-lineare Transformation des Referenzelementes auf T . Wir hatten schon gesehen, dass der Betrag der Jacobi-Determinante von F_T für Dreiecke gleich dem Doppelten des Flächeninhaltes von T ist (siehe Beweis zu Lemma 3.3.5). Außerdem gilt $E_T[\phi] = 2|T| E_{\hat{T}}[\hat{\phi}]$ nach (3.3.1). Analog zu Lemma 3.3.5 ergibt sich

$$\left| \hat{\phi} \right|_{n,p,\hat{T}} \leq c |\det(B_T)|^{-\frac{1}{p}} \|B_T\|^n |\phi|_{n,p,T}.$$

Zusammen mit Lemma 3.3.4 erhalten wir insgesamt

$$\begin{aligned} |E_T[\phi]| &= 2|T| \left| E_{\hat{T}}[\hat{\phi}] \right| \leq 2|T| c \left| \hat{\phi} \right|_{n,p,\hat{T}} \\ &\leq 2|T| c (2|T|)^{-\frac{1}{p}} \|B_T\|^n |\phi|_{n,p,T} \\ &\leq c |T|^{1-\frac{1}{p}} (\text{diam}(T))^n |\phi|_{n,p,T} \end{aligned}$$

mit einer Konstanten c . □

Für den Fall, dass T ein Rechteck ist verändert sich nur die Konstante. Außerdem lässt sich Satz 3.3.6 auch unter der stärkeren Voraussetzung der stetigen Differenzierbarkeit des Integranden ϕ formulieren.

Satz 3.3.7. Sei T wieder ein offenes Dreieck oder Rechteck. Die Quadraturformel Q_T sei exakt für Polynome mit Höchstgrad $k \geq 0$. Es gilt

$$E_T[p] = \int_T p(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} - Q_T(p) = 0 \quad \forall p \in \mathcal{P}^k(\bar{T}).$$

Weiter sei der Integrand ϕ mindestens n -mal stetig differenzierbar auf \bar{T} mit $n \leq k + 1$. Dann gilt

$$|E_T[\phi]| \leq c|T| (\text{diam } T)^n |\phi|_{n,\infty,T}, \quad (3.3.5)$$

mit einer von T und ϕ unabhängigen Konstante c .

Bemerkung. Wir benutzen hier die Halbnorm

$$|\phi|_{n,\infty,T} := \sum_{|\alpha|=n} \max_{\mathbf{x} \in \bar{T}} |\partial^\alpha \phi(\mathbf{x})|$$

auf $C^n(\bar{T})$. Die Glattheit des Integranden kann abgeschwächt werden, indem man Funktionen mit schwachen Ableitungen aus SOBOLEW-Räumen benutzt.

Natürlich benötigen wir nicht nur eine Fehlerabschätzung auf einem einzelnen Element, sondern auch eine Gesamtfehlerabschätzung für das ganze Gebiet.

Satz 3.3.8. Sei Ω unterteilt in Drei- oder Rechtecke T_ℓ , $\ell = 1, 2, \dots, M$. Auf jedem dieser Elemente sei eine Quadraturformel Q_{T_ℓ} definiert, die exakt sei für Polynome vom Höchstgrad k . Ist $\phi \in W^{n,\infty}(\Omega)$ oder $\phi \in C^n(\bar{\Omega})$, mit $1 \leq n \leq k + 1$, dann gilt

$$|E_\Omega[\phi]| \leq \sum_{\ell=1}^M |T_\ell| (\text{diam } T_\ell)^n |\phi|_{n,\infty,T_\ell} \leq c|\Omega| h_{\max}^n |\phi|_{n,\infty,\Omega}. \quad (3.3.6)$$

Falls $\phi \in W^{n,p}(\Omega)$ mit $np > d$ und $1 \leq n \leq k + 1$, erhalten wir

$$|E_\Omega[\phi]| \leq c|\Omega|^{1-1/p} \left(\sum_{\ell=1}^M (\text{diam } T_\ell)^{pn} |\phi|_{n,p,T_\ell}^p \right)^{1/p} \leq c|\Omega|^{1-1/p} h_{\max}^n |\phi|_{n,p,\Omega}. \quad (3.3.7)$$

Dabei ist c wieder eine von Ω , der Zerlegung und ϕ unabhängige Konstante.

Beweis. Der Beweis besteht im Aufsummieren von (3.3.4) aus Satz 3.3.6 und (3.3.5) aus Satz 3.3.7. Es gilt nämlich

$$\begin{aligned} |E_\Omega[\phi]| &\leq \sum_{\ell=1}^M |E_{T_\ell}[\phi]| \\ &\leq c \sum_{\ell=1}^M |T_\ell| (\text{diam}(T_\ell))^n |\phi|_{n,\infty,T_\ell} \\ &\leq c|\Omega| h_{\max}^n |\phi|_{n,\infty,\Omega} \end{aligned}$$

und wir erhalten (3.3.6). Analog erhalten wir unter Zuhilfenahme der HÖLDER-Ungleichung für Summen (3.3.7):

$$\begin{aligned}
|E_\Omega[\phi]| &\leq \sum_{\ell=1}^M |E_{T_\ell}[\phi]| \\
&\leq c \sum_{\ell=1}^M |T_\ell|^{1-1/p} (\text{diam}(T_\ell))^n |\phi|_{n,p,T_\ell} \\
&\leq c \left(\sum_{\ell=1}^M |T_\ell| \right)^{1-1/p} \left(\sum_{\ell=1}^M (\text{diam}(T_\ell))^{pn} |\phi|_{n,p,T_\ell}^p \right)^{1/p} \\
&\leq c |\Omega|^{1-1/p} h_{\max}^n |\phi|_{n,p,\Omega}.
\end{aligned}$$

□

Bemerkung. Die Menge Ω kann durchaus nur einen Teil des gesamten Gebietes ausmachen. Man könnte sich z.B. vorstellen unterschiedliche Quadraturen in unterschiedlichen Teilgebieten zu verwenden. Dann erhält man in jedem Teilgebiet die entsprechenden Fehlerabschätzungen für die jeweilige Quadratur.

Weiter kann es sinnvoll sein in Gebieten, in denen der Integrand ϕ in der entsprechenden Norm “groß” wird zu verfeinern. Durch obige Ungleichungen erhält man auch lokale Fehlerabschätzungen.

Im nächsten Kapitel stellen wir die Theorie der Peridynamik vor. Nach einer Diskretisierung des Integralterms mit Hilfe von Quadraturformeln gewissen Grades stellt sich die Frage wie gut diese Approximation ist. Wir werden uns vor allem mit der zu integrierenden Kraftfunktion \mathbf{f} beschäftigen und später Aussagen über ihre Regularität treffen. Für eine Abschätzung des Quadraturfehlers sind die Resultate aus diesem Abschnitt maßgeblich.

4 Peridynamik

Die Peridynamik ist eine nichtlokale Theorie der Kontinuumsmechanik, eingeführt von SILLING im Jahre 2000 in [57]. Einer ihrer großen Vorteile liegt in der Integralformulierung, die mit ableitungsfreien Termen auskommt. Im Gegensatz dazu steht die klassische Theorie, in der bei Entstehen eines Bruches (Unstetigkeit im Verschiebungsfeld) die auftretenden Ableitungen zunächst nicht definiert sind. Die Bewegungsgleichung der Peridynamik hingegen gilt auch an Stellen, an denen die Verschiebungen nicht glatt sind, da nur das Integral berechnet werden muss.

Eine Anwendung findet die Peridynamik zum Beispiel bei der Rissausbreitung in Festkörpern. So untersucht SILLING zusammen mit ASKARI, BOBARU, GERSTLE und SAU mit Hilfe der Peridynamik Fragestellungen der Festkörpermechanik, z.B. Ankerzugversuche [55] und Schaden [56] in Beton, das Kalthoff-Winkler-Experiment [58], Brüche in gekerbten Stahlplatten [59], die Rissentwicklung einer Platte mit anfänglichem Riss im Inneren, sowie Hertzsche Risse [60], das Reißen von Membranen, und schließlich das Platzen von Ballons und die Verformung von Fasern und Faserverbundwerkstoffen [61]. Die numerischen Untersuchungen von SILLING basieren dabei auf der zusammengesetzten Mittelpunkregel zur Approximation des Integrals und dem Schema der zentralen dividierten Differenzen mit konstanter Zeitschrittweite zur Zeitdiskretisierung (siehe [58] und [60]). Dieser Ansatz wurde im Computer-Code EMU umgesetzt.

Theoretischere Betrachtungen zum Modell der Peridynamik, so z.B. die Verformung eines unendlichen Balken, finden sich bei ABEYARATNE, EMMRICH, WECKNER und ZIMMERMANN in [51, 53, 62, 63, 64, 65]. Auf die numerische Approximation wird insbesondere in [51, 53, 64] eingegangen. So vergleichen EMMRICH und WECKNER in [53] unterschiedliche Möglichkeiten der Ortsdiskretisierung: die Quadraturformelmethode mittels Gauß-Hermite-Quadratur und Mittelpunkregel, und die Finite-Elemente-Methode. Betrachtungen zur Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen für den eindimensionalen, unendlichen Balken bei spezieller Kraftfunktion finden sich in [51]. Der Fall höherer Dimensionen wird von EMMRICH und WECKNER in [54] für den linearen Fall behandelt. Neuere Resultate zur Wohlgestelltheit und Dissipativität finden sich in [52]. Hier wird auch die Konvergenz gegen die Gleichungen der klassischen Elastizitätstheorie für verschwindende Nichtlokalität untersucht. Ungeklärt ist die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen im Fall einer nichtlinearen Kraftfunktion. Für die mathematischen Konvergenzuntersuchungen in dieser Arbeit greifen wir daher auf das lineare Modell zurück. Im Folgenden stellen wir die Gleichungen der Peridynamik vor und geben verschiedene Ansätze für die Kraftfunktion f an.

4.1 Die Bewegungsgleichung der Peridynamik

Die Gleichung der Peridynamik ist eine partielle Integro-Differentialgleichung zweiter Ordnung in der Zeit,

$$\rho(\mathbf{x})\partial_t^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}, t), t) d\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \mathcal{V} \times (0, T), \quad (4.1.1)$$

in Lagrange-Koordinaten $\mathbf{x} \in \mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$. Dabei beschreibt ρ die Dichte, \mathbf{u} ist das Verschiebungsfeld des Körpers mit dem Volumen $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$, \mathbf{f} ist die Kraftfunktion, die beschreibt welche Kräfte ein Partikel $\hat{\mathbf{x}}$ auf das Partikel \mathbf{x} ausübt, und \mathbf{b} beinhaltet alle äußere Kräfte. Die Integro-Differentialgleichung (4.1.1) wird um Anfangsbedingungen $\mathbf{u}(\cdot, 0)$ und $\partial_t \mathbf{u}(\cdot, 0)$ ergänzt. Randbedingungen existieren hingegen in der Peridynamik nicht, da keine räumlichen Ableitungen in (4.1.1) auftreten. Die Gleichungen beruhen wesentlich auf der Funktion \mathbf{f} . Betrachten wir im Weiteren einige ihrer Eigenschaften.

4.1.1 Der Horizont

In der Peridynamik haben Kräfte eine gewisse vorgegebene Reichweite. Diese Entfernung, in der unterschiedliche Partikel noch miteinander interagieren, wird durch den *Horizont* δ beschrieben. Er bestimmt den Radius einer Kugel um den aktuellen Punkt \mathbf{x} . Innerhalb dieser Kugel interagieren Partikel und außerhalb findet keine Interaktion statt, d.h. die Kraftfunktion \mathbf{f} wird auf Null gesetzt

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}, t), t) = 0 \quad \text{falls } |\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}| \geq \delta. \quad (4.1.2)$$

Abbildung 4.1.1 zeigt zwei Punkte \mathbf{x} und $\hat{\mathbf{x}}$ innerhalb des Horizontes und ihre verschobene Position.

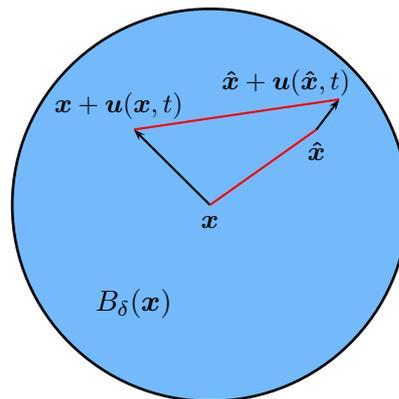


Abbildung 4.1.1: Horizont $B_\delta(\mathbf{x})$ der Interaktion

4.1.2 Die Kraftfunktion

Die Kraftfunktion \mathbf{f} beschreibt in welcher Form verschiedene Partikel miteinander interagieren. Für ihre mathematische Analyse ist es sinnvoll alle Komponenten, von denen \mathbf{f} abhängt, einzeln zu betrachten. Für diesen Abschnitt führen wir allerdings einige abkürzende Bezeichnungen ein. So sei die *relative Position* von zwei Partikeln $\hat{\mathbf{x}}$ und \mathbf{x} zueinander definiert als

$$\boldsymbol{\xi} = \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}$$

und ihre *relative Verschiebung* als

$$\boldsymbol{\eta} = \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$$

(siehe auch Abbildung 4.1.1). Die physikalische Interaktion zwischen den Partikeln $\hat{\mathbf{x}}$ und \mathbf{x} bezeichnen wir als *Bond*. Im Falle einer elastischen Interaktion stellen wir uns das Verhalten der zwei Punkte \mathbf{x} und $\hat{\mathbf{x}}$ ähnlich zu dem Verhalten von zwei durch eine Feder verbundenen Partikeln vor. Mit diesen Bezeichnungen schreiben wir

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}, t), t) = \mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}, \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}).$$

Wir betrachten damit nicht vollkommen allgemeine Kraftfunktionen \mathbf{f} , sondern nur solche die nicht explizit von der Zeit t abhängen, und die auf Differenzen der Positionen von Partikeln und ihren Verschiebungen beruhen.

Jede Kraftfunktion \mathbf{f} muss gewissen physikalischen Eigenschaften genügen (siehe z.B. [60]). So sollte einerseits das dritte NEWTONSche Axiom erfüllt sein (actio et reactio), andererseits auch der Drehimpuls erhalten bleiben. Aus der ersten Forderung folgt, dass der Kraft, die ein Partikel \mathbf{x} auf ein Partikel $\hat{\mathbf{x}}$ ausübt, eine gleich große Gegenkraft, ausgeübt vom Partikel $\hat{\mathbf{x}}$ auf das Partikel \mathbf{x} , entgegen steht. Für die Kraftfunktion bedeutet dies

$$\mathbf{f}(-\boldsymbol{\xi}, -\boldsymbol{\eta}) = -\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}).$$

Die zweite Forderung besagt, dass der aktuelle, relative Positionsvektor der Partikel \mathbf{x} und $\hat{\mathbf{x}}$, nämlich $\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}$, parallel zum Kraftvektor liegt. Mathematisch gesehen entspricht dies

$$(\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}) \times \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \mathbf{0} \quad \forall \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}.$$

Dabei sei \times das Kreuzprodukt zwischen zwei Vektoren.

Durch Forderung dieser Eigenschaften ist die Kraftfunktion nicht eindeutig festgelegt. Wir geben an dieser Stelle beispielhaft das einfachste nichtlineare Modell, das den Anforderungen genügt. Ein Modell wird dabei stets vollständig durch die in ihm verwendete Kraftfunktion charakterisiert.

Definition 4.1.1. Das *Bondstretch-Modell* [60] ist ein nichtlineares Modell dessen Kraftfunktion durch

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \begin{cases} c_{d,\delta} \frac{\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}}{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}|} s & \text{für } |\boldsymbol{\xi}| < \delta \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

gegeben ist, mit dem *Bondstretch* (der relativen Längenänderung eines Bonds)

$$s = \frac{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}| - |\boldsymbol{\xi}|}{|\boldsymbol{\xi}|}.$$

Die Kraftfunktion ist zwar linear im Bondstretch s , aber nichtlinear in den zu berechnenden Verschiebungen \mathbf{u} .

Die Konstante $c_{d,\delta}$ bestimmt sich durch einen Vergleich der elastischen Energie einer isotropen Expansion mit der aus der klassischen Theorie. Sie hängt von der Dimension $d \in \{1, 2, 3\}$ des gegebenen Problems und vom Radius des Horizontes ab. Dabei ist $c_{d,\delta}$ proportional zu $\delta^{-(d+1)}$. Man erhält (siehe z.B. [50])

$$c_{1,\delta} = \frac{18K}{5\delta^2}, \quad c_{2,\delta} = \frac{72K}{5\pi\delta^3}, \quad c_{3,\delta} = \frac{18K}{\pi\delta^4},$$

mit dem Elastizitätsmodul E , und dem Kompressionsmodul $K = \frac{2E}{3}$.

Betrachten wir nun eine Linearisierung des Bondstretch-Modells. Mit Hilfe einer Taylor-Entwicklung von \mathbf{f} um den Punkt $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}$,

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \approx \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{0}) + \mathbf{f}_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{0})\boldsymbol{\eta}$$

mit der Jacobi-Matrix $\mathbf{f}_{\boldsymbol{\eta}}$, erhält man durch Abbrechen nach der ersten Ableitung das *linearisierte Bondstretch-Modell* (oder auch *lineare Modell*) mit der Kraftfunktion

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \lambda(|\boldsymbol{\xi}|) \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\eta} \quad (4.1.3)$$

mit

$$\lambda(r) = \begin{cases} c_{d,\delta}/r^3 & \text{für } r < \delta, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Das dyadische Produkt zwischen zwei Vektoren \mathbf{x} und \mathbf{y} ist dabei definiert als $\mathbf{x} \otimes \mathbf{y} = \mathbf{x}\mathbf{y}^T$. Die Konstante $c_{d,\delta}$ bleibt erhalten. Mit

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{C}(\boldsymbol{\xi}) = \lambda(|\boldsymbol{\xi}|) \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} \quad (4.1.4)$$

bezeichnen wir den *Steifigkeitstensor*. Für ihn gilt

$$|\mathbf{C}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})| = |\lambda(|\boldsymbol{\xi}|)| |\boldsymbol{\xi}|^2,$$

wobei $|\cdot|$ für Matrizen die Spektralnorm und für Vektoren die euklidische Norm bezeichne. Diese Eigenschaft folgt aus der Eigenschaft $\mathbf{C}^T = \mathbf{C}$ und der Definition der Normen.

Für die numerischen Rechnungen, sowie für die mathematische Analyse nutzen wir modifizierte Modelle mit

$$\lambda_{\alpha}(r) = \begin{cases} c_{d,\delta} r^{\alpha} e^{-1/(1-r^2/\delta^2)} & \text{falls } r < \delta, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.1.5)$$

Ersetzen wir beim linearisierten Bondstretch-Modell (4.1.3) die Funktion λ durch λ_{-3} entspricht dies einer Multiplikation mit der in λ_{α} vorkommenden Exponentialfunktion.

Diese bewirkt ein Abklingen der Kraftfunktion zum Rand des Horizontes. Größere Potenzen von α entsprechen zusätzlich einer Multiplikation mit $|\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}|^{3+\alpha}$. Nach Veränderung des Modells muss die Konstante $c_{d,\delta}$ angepasst werden. Hier sei noch angemerkt, dass nur $\alpha = -3$ eine physikalische Interpretation, nämlich im Abklingen der Interaktion zum Rand des Horizontes, besitzt. Größere α wurden ausschließlich zur numerischen Konvergenzanalyse in Kapitel 6 gewählt. Das mit der Funktion λ_α modifizierte Bondstretch-Modell lässt sich nun formulieren als

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \lambda_\alpha(|\boldsymbol{\xi}|) |\boldsymbol{\xi}|^3 s \frac{\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}}{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}|}.$$

Zum Abschluss geben wir eine einfache Modifizierung der genannten Modelle, um Brüche in Materialien zu erlauben. Für den in Kapitel 6 gezeigten Bruchversuch wurde das im Folgenden kurz beschriebene Bruchmodell nach [60] benutzt. Ein Bruch wird auf der Ebene der Bonds eingeführt. Bonds können brechen, wenn sie über eine vordefinierte Grenze s_0 hinaus gedehnt werden. Nachdem ein Bond gebrochen ist, bleibt er dies für alle Zeiten. Das Modell ist somit zeitabhängig. Das Brechen eines Bonds wird durch Multiplikation mit der Funktion

$$g(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}, t) = \begin{cases} 1 & \text{falls } s(t') < s_0 \text{ für alle } 0 \leq t' \leq t \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

modelliert. Dabei ist $s(t) = s$ der Bondstretch. Dieser ist zeitabhängig aufgrund seiner Abhängigkeit von $\boldsymbol{\eta}$. Damit haben wir die wichtigsten Kraftfunktionen kennengelernt und werden uns nun im nächsten Abschnitt mit dem Prinzip der Energieerhaltung beschäftigen.

4.1.3 Energieerhaltung

Nach dem Energieerhaltungssatz ändert sich die Gesamtenergie eines geschlossenen Systems mit der Zeit nicht. Für die formale Beschreibung der in der Peridynamik auftretenden Energien führen wir folgende Definition im Sinne von SILLING [57] ein.

Definition 4.1.2. Ein Material heißt *mikroelastisch*, wenn ein skalares Potential w existiert, so dass

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \nabla_{\boldsymbol{\eta}} w(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta})$$

gilt, mit dem Gradienten $\nabla_{\boldsymbol{\eta}}$ bezüglich $\boldsymbol{\eta}$.

Beispiel 4.1.3. Das skalare Potential des linearisierten Bondstretch-Modells ist gegeben durch

$$w(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{C}(\boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\eta}.$$

Ableiten nach $\boldsymbol{\eta}$ liefert die Kraftfunktion \boldsymbol{f} . △

Damit können wir sowohl die kinetische und elastische Energiedichte als auch die Energiedichte aufgrund von externen Kräften definieren (siehe EMMRICH und WECKNER [50]).

Definition 4.1.4. Die *kinetische Energiedichte* ist definiert als

$$e_{\text{kin}} = \frac{\rho(\mathbf{x})}{2} |\partial_t \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|^2,$$

die *elastische Energiedichte* als

$$e_{\text{el}} = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} w(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \, d\hat{\mathbf{x}}$$

und die *Dichte aufgrund von externen Kräften* \mathbf{b} als

$$e_{\text{ext}} = -\mathbf{b}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t).$$

Mit Hilfe der Energiedichten können wir durch Integration über das gesamte Gebiet die eigentlichen Energien definieren.

Definition 4.1.5. Die *kinetische Energie* E_{kin} , die *elastische Energie* E_{el} und die *Energie aufgrund von externen Kräften* E_{ext} sind definiert als das Integral über ihre Energiedichte

$$E_i(t) = \int_{\mathcal{V}} e_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), t) \, d\mathbf{x},$$

wobei $i = \text{kin}, \text{el}$ oder ext .

Betrachten wir ein Beispiel im Eindimensionalen in dem die einzelnen Energien angegeben werden können.

Beispiel 4.1.6. Wir betrachten einen Stab der Länge eins. Sei $\Omega = (0, 1)$. Als Anfangsbedingungen wählen wir

$$u(x, 0) = 0 \text{ und } u_t(x, 0) = 10(0.5 - x).$$

Die Partikelinteraktion sei durch das linearisierte Bondstretch-Modell beschrieben. Dann ist die Kraftfunktion gegeben durch

$$f(x, \hat{x}, u(x, t), u(\hat{x}, t)) = \frac{c_{1,\delta}}{|\hat{x} - x|} (u(\hat{x}, t) - u(x, t)).$$

Das skalare Mikropotential hat die Form

$$w(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = w(x, \hat{x}, u(x, t), u(\hat{x}, t)) = \frac{c_{1,\delta}}{2} \frac{(u(\hat{x}, t) - u(x, t))^2}{|\hat{x} - x|}.$$

Damit berechnen sich elastische und kinetische Energiedichte zu

$$e_{\text{el}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} w(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \, d\hat{\mathbf{x}} = \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{c_{1,\delta}}{2} \frac{(u(\hat{x}, t) - u(x, t))^2}{|\hat{x} - x|} \, d\hat{x},$$

$$e_{\text{kin}} = \frac{\rho}{2} |u_t(x, t)|^2.$$

Im Beispiel tauchen keine externen Kräfte auf und somit ist $E_{\text{ext}} = 0$. Nach dem Energieerhaltungsprinzip gilt $E_{\text{kin}} + E_{\text{el}} = E_{\text{gesamt}}$. Aus der Anfangsbedingung $u(x, 0) = 0$ lässt sich folgern, dass die elastische Energie zum Zeitpunkt $t = 0$ Null ist: $E_{\text{el}}(0) = 0$. Und damit $E_{\text{kin}}(0) = E_{\text{gesamt}}$, die Gesamtenergie des Systems entspricht der kinetischen Energie zum Zeitpunkt 0. Die kinetische Energie zum Anfangszeitpunkt lässt sich aus den Anfangsbedingungen berechnen:

$$E_{\text{kin}}(0) = \int_0^1 \frac{\rho}{2} |u_t(x, 0)|^2 dx = \int_0^1 \frac{\rho}{2} |10(0.5 - x)|^2 dx = \frac{25\rho}{6}.$$

Damit ist auch die Gesamtenergie des Systems bekannt. In Abbildung 4.1.2 sieht man

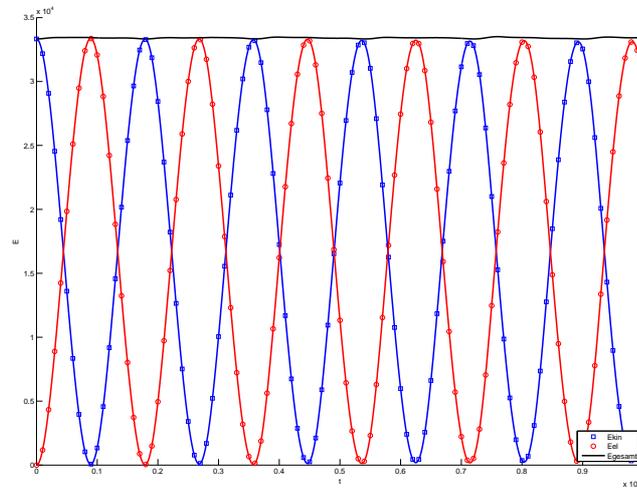


Abbildung 4.1.2: Kinetische, elastische und Gesamtenergie

die numerischen Ergebnisse für kinetische, elastische und Gesamtenergie aufgetragen über die Zeit. Die vollständige Umwandlung von kinetischer in elastische Energie im Laufe der Zeit ist gut zu erkennen. \triangle

Damit seien die Betrachtungen zur Kraftfunktion und einiger ihrer Eigenschaften abgeschlossen. Im anschließenden Abschnitt behandeln wir einen Spezialfall, in dem sich eine explizite Lösung der Gleichung der Peridynamik angeben lässt.

4.2 Lösung der Bewegungsgleichung für einen Spezialfall

Wir betrachten das lineare Modell im Eindimensionalen vervollständigt durch Anfangsbedingungen an die Verschiebungen und Geschwindigkeiten. Der Horizont δ sei so gewählt, dass alle Punkte miteinander interagieren. Das Gebiet sei ein Stab der Länge eins,

$\Omega = (0, 1)$, und das zugehörige Anfangswertproblem sei gegeben durch

$$\partial_t^2 u(x, t) = \int_0^1 \frac{c_{1,\delta}}{\rho |\hat{x} - x|} (u(\hat{x}, t) - u(x, t)) d\hat{x} \quad (4.2.1)$$

$$u(x, 0) = 0 \quad (4.2.2)$$

$$\partial_t u(x, 0) = 10(0.5 - x). \quad (4.2.3)$$

Wir wählen für die Lösung u einen Ansatz nach der Methode der *Trennung der Variablen*, d.h. wir nehmen an, dass die Lösung in den Variablen x und t *getrennt* ist: $u(x, t) = X(x)T(t)$. Aus 4.2.1 erhalten wir durch Einsetzen für u

$$\frac{T''(t)}{T(t)} = \int_0^1 \frac{c_{1,\delta}}{\rho |\hat{x} - x|} \frac{(X(\hat{x}) - X(x))}{X(x)} d\hat{x} = -c,$$

mit $c > 0$, da die linke Seite nur von t und die rechte Seite nur von x abhängt. Betrachten wir die Gleichung in t erhalten wir

$$T(t) = a_1 \sin(a_2 t) + b_1 \cos(b_2 t).$$

Wir benutzen die Anfangsbedingungen um die Konstanten zu bestimmen:

$$u(x, 0) = X(x)T(0) = 0, \quad (4.2.4)$$

$$\partial_t u(x, 0) = X(x)T'(0) = 10(0.5 - x). \quad (4.2.5)$$

Aus 4.2.4 erhalten wir $T(0) = 0$, da wir die triviale Lösung für X ausschließen wollen. Weiter nehmen wir an, dass $T'(0) = 1$. Damit erhalten wir als allgemeine Form für T

$$T(t) = \frac{1}{\sqrt{c}} \sin(\sqrt{c}t),$$

mit der noch zu bestimmenden Konstanten c . Aufgrund der Anfangsbedingungen gilt $X(x) = 10(0.5 - x)$, womit c jetzt durch Integration bestimmt werden kann. Einsetzen für X liefert

$$\int_0^1 \frac{c_{1,\delta}}{\rho |\hat{x} - x|} \frac{\hat{x} - x}{x - 0.5} d\hat{x} = - \int_0^x \frac{c_{1,\delta}}{\rho(x - 0.5)} d\hat{x} + \int_x^1 \frac{c_{1,\delta}}{\rho(x - 0.5)} d\hat{x} = \frac{-2c_{1,\delta}}{\rho}.$$

Als Lösung erhalten wir folglich

$$u(x, t) = 10(0.5 - x)(2c_{1,\delta}\rho^{-1})^{\frac{-1}{2}} \sin(\sqrt{2c_{1,\delta}\rho^{-1}}t).$$

Die Anfangsbedingungen sowie die Integro-Differentialgleichung sind erfüllt.

Wir benutzen diese Lösung zum Test verschiedener Zeitintegratoren. Eine numerische Lösung der Peridynamik beruht immer auf einer Diskretisierung in Ort und Zeit. Für den Spezialfall, dass alle Punkte interagieren, und bei der Wahl entsprechender Anfangsbedingungen, ist die Lösung im Ort ein Polynom. Dieses kann z.B. durch die Mittelpunkregel exakt integriert werden. Der entstehende Fehler hängt somit nur vom Zeitintegrator ab. Wir geben im nächsten Abschnitt drei Beispiele und berechnen die Fehlerordnung numerisch.

4.3 Numerische Zeitintegration

Bevor wir die Quadraturformelmethode in Abschnitt 5.3 behandeln, geben wir eine einfache Möglichkeit an die Gleichung der Peridynamik in der Zeit zu diskretisieren. Folgender Algorithmus berechnet die Geschwindigkeiten und Verschiebungen aus den Beschleunigungen:

1. Schritt: Berechne die Beschleunigungen $\mathbf{a}_i(t) = \ddot{\mathbf{u}}_i(t)$ aus dem Integralterm.
2. Schritt: Setze für die Geschwindigkeiten $\mathbf{v}_i(t + \delta t) \approx \mathbf{v}_i(t) + \delta t \cdot \mathbf{a}_i(t)$.
3. Schritt: Setze für die Verschiebungen $\mathbf{u}_i(t + \delta t) \approx \mathbf{u}_i(t) + \delta t \cdot \mathbf{v}_i(t + \delta t)$.

Algorithmus 4.3.1: Vorwärtige und rückwärtige Differenzen

Dabei werden die Geschwindigkeiten durch *vorwärtige Differenzen* aus den Beschleunigungen und die Verschiebungen durch *rückwärtige Differenzen* aus den Geschwindigkeiten berechnet. Insgesamt ergibt sich die *zentrale Differenz* in den Verschiebungen.

Definition 4.3.1. Die *vorwärts genommene dividierte Differenz* mit Schrittweite $\delta t > 0$ einer Funktion u zum Zeitpunkt t ist definiert als

$$\frac{\delta^+ u(t)}{\delta t} := \frac{u(t + \delta t) - u(t)}{\delta t}.$$

Analog definieren wir die *rückwärts genommene dividierte Differenz* mit Schrittweite $\delta t > 0$ einer Funktion u zum Zeitpunkt t als

$$\frac{\delta^- u(t)}{\delta t} := \frac{u(t) - u(t - \delta t)}{\delta t}.$$

Als *zentrale Differenz* mit Schrittweite $\delta t > 0$ definieren wir

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 u(t)}{\delta t^2} &:= \frac{\delta^+}{\delta t} \left(\frac{\delta^- u(t)}{\delta t} \right) = \frac{\frac{u(t+\delta t) - u(t)}{\delta t} - \frac{u(t) - u(t-\delta t)}{\delta t}}{\delta t} \\ &= \frac{u(t + \delta t) - 2u(t) + u(t - \delta t)}{\delta t^2} \end{aligned}$$

Satz 4.3.2. Sei die Funktion u hinreichend glatt. Dann liefern die vorwärtigen und rückwärtigen Differenzen eine Approximation an die erste Ableitung mit einem Fehler von $\mathcal{O}(\delta t)$. Die zentralen Differenzen liefern eine Approximation an die zweite Ableitung mit einer Fehlerordnung von $\mathcal{O}(\delta t^2)$.

Beweis. Der Beweis beruht auf einer Taylorreihenentwicklung von u .

$$u(t + \delta t) = u(t) + \delta t u'(t) + \frac{\delta t^2}{2} u''(t) + \frac{\delta t^3}{6} u'''(t) + \mathcal{O}(\delta t^4).$$

Dies ist äquivalent zu

$$\frac{u(t + \delta t) - u(t)}{\delta t} = u'(t) + \mathcal{O}(\delta t).$$

Analog erhält man nach einer Taylorreihenentwicklung von $u(t - \delta t)$

$$\frac{u(t) - u(t - \delta t)}{\delta t} = u'(t) + \mathcal{O}(\delta t).$$

Eine Kombination der beiden Taylorreihen um $u(t + \delta t)$ sowie um $u(t - \delta t)$ führt auf

$$u(t + \delta t) + u(t - \delta t) = 2u(t) + \delta t^2 u''(t) + \frac{\delta t^4}{12} u^{(4)}(t).$$

Dies entspricht der Behauptung. □

Nehmen wir an die Beschleunigungen lassen sich exakt aus dem Integralterm berechnen. Dann ist der Fehler in der Zeitintegration bei Algorithmus 4.3.1 in den Geschwindigkeiten von der Ordnung $\mathcal{O}(\delta t)$ und in den Verschiebungen von der Ordnung $\mathcal{O}(\delta t^2)$.

4.3.1 Vergleich verschiedener Zeitintegratoren

Eine Möglichkeit eine höhere Ordnung in den Geschwindigkeiten zu erreichen ist die Integration nach STÖRMER und VERLET. In der Astronomie wird sie häufig unter dem Namen STÖRMER-Methode verwendet, in der Molekulardynamik spricht man von der VERLET-Methode (siehe z.B. [15]). Der Algorithmus lässt sich folgendermaßen schreiben:

1. Schritt: Berechne die Beschleunigungen $\mathbf{a}_i(t) = \ddot{\mathbf{u}}_i(t)$ aus dem Integralterm.
2. Schritt: Berechne $\mathbf{u}_i(t + \delta t) \approx \mathbf{u}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}_i(t)\delta t^2$.
3. Schritt: Berechne die Beschleunigungen $\mathbf{a}_i(t + \delta t)$ zum Zeitpunkt $t + \delta t$ aus dem Integralterm.
4. Schritt: Berechne $\mathbf{v}_i(t + \delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \delta t))\delta t$.

Algorithmus 4.3.2: Integration nach STÖRMER und VERLET

Wir vergleichen Algorithmus 4.3.1 und 4.3.2 numerisch mit dem klassischen RUNGE-KUTTA-Verfahren (siehe z.B. [20] oder [15] für eine Definition des Verfahrens). Als Beispiel wählen wir das Anfangswertproblem aus Abschnitt 4.2. Wie schon gesehen ist die Lösung u zu jedem Zeitpunkt t ein Polynom ersten Grades. Das dazugehörige f ist die mit einer Konstanten multiplizierte Signum-Funktion mit Sprung an der Stelle x . Die Mittelpunktregel integriert solche Funktionen exakt. Interagieren alle Punkte miteinander so ist die numerische Methode zur Ortsdiskretisierung exakt. Der Fehler entsteht nur durch die Zeitintegration. (Wählt man an dieser Stelle den Horizont kleiner, ist die Interaktion örtlich begrenzt, wodurch der Fehler der durch die Approximation der einzelnen Horizonte entsteht hinzukommt. Die Lösung u ist außerdem eine andere, nicht

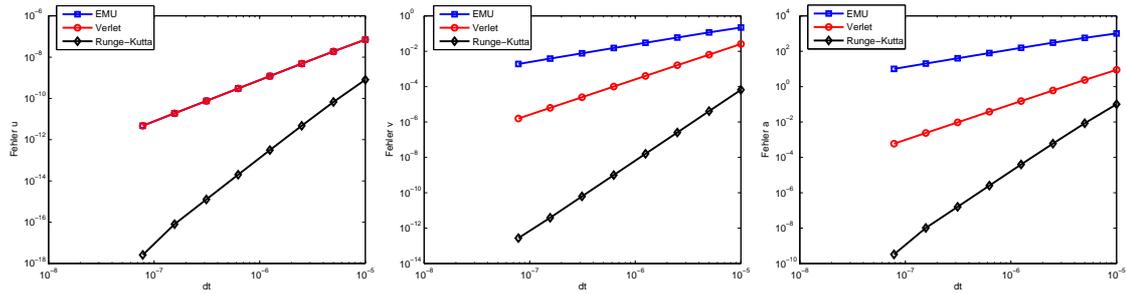


Abbildung 4.3.3: Verschiebung, Geschwindigkeit, Beschleunigung

notwendigerweise ein Polynom, weswegen f nicht exakt integrierbar sein muss.) Somit ist dieses Beispiel gut geeignet den Fehler der einzelnen Zeitintegratoren zu erkennen.

Das auch in EMU so implementierte Verfahren 4.3.1 liefert einen Fehler von $\mathcal{O}(\delta t^2)$ in u und von $\mathcal{O}(\delta t)$ in v und in a . Das Verfahren nach STÖRMER und VERLET ergibt hingegen einen Fehler von $\mathcal{O}(\delta t^2)$ in u , v und a . Einen Fehler der Ordnung vier in u , v und a liefert das klassische RUNGE-KUTTA-Verfahren. In Tabelle 4.3.1 ist die numerisch, mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate, berechnete Konvergenzordnung, und die jeweils optimale, angegeben. Der absolute Fehler über der Zeitschrittweite ist in Abbildung 4.3.3 doppelt logarithmisch aufgetragen. Gut zu erkennen sind die unterschiedlichen Konvergenzordnungen an den unterschiedlichen Steigungen der Geraden. Im Gegensatz zu den ersten beiden Verfahren, die das Integral der rechten Seite pro Zeitschritt nur einmal auswerten müssen, benötigt das RUNGE-KUTTA-Verfahren vier Integralauswertungen pro Zeitschritt. Dies führt zu einem höheren Aufwand, bei allerdings einer wesentlich höheren Genauigkeit.

Zeitintegrator	Fehler u	Fehler v	Fehler a
EMU	1.99 (δt^2)	0.98 (δt)	0.96 (δt)
STÖRMER-VERLET	1.99 (δt^2)	2.00 (δt^2)	1.99 (δt^2)
RUNGE-KUTTA	3.99 (δt^4)	3.99 (δt^4)	3.99 (δt^4)

Tabelle 4.3.1: Fehlerordnung der drei Zeitintegratoren

5 Fehlerabschätzung in der Peridynamik

5.1 Regularität des Integranden

Für die Quadraturfehlerabschätzungen aus Abschnitt 3.3 muss die zu integrierende Funktion gewissen Glattheitsbedingungen genügen. Wir hatten gesehen, dass die in der Peridynamik zu integrierende Kraftfunktion \mathbf{f} von der Lösung \mathbf{u} abhängt. Daher untersuchen wir die Glattheit der Kraftfunktion in Abhängigkeit von der Glattheit der Lösung. Indem wir die Abhängigkeit von der Zeit vorerst nicht betrachten, definieren wir den *Nemyzkii*-Operator \mathcal{F} . Dazu sei im Folgenden $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$, $d \in \{1, 2, 3\}$, ein beschränktes, glatt berandetes Gebiet.

Definition 5.1.1. Für Funktionen $\mathbf{u} : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}^d$ sei der *Nemyzkii*-Operator \mathcal{F} definiert als

$$(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}(\mathbf{x}), \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}})), \quad \forall \mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}.$$

Wir untersuchen nun die Abbildungseigenschaften dieses Operators für bestimmte Klassen von Funktionen \mathbf{u} , dabei betrachten wir das linearisierte Bondstretch-Modell (4.1.3).

5.1.1 Unstetigkeit der Kraftfunktion

Satz 5.1.2. Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}$ und $u \in C^1(\overline{\mathcal{V}})$. Dann ist die Funktion $\mathcal{F}u$ unstetig für fast alle $(x, \hat{x}) \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}$ mit $x = \hat{x}$.

Beweis. Sei $x \in \mathcal{V}$ fest gewählt. Entwickeln wir nun u um x in seine Taylorreihe, dann gilt

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}u)(x, \hat{x}) &= \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{x} - x|} (u(\hat{x}) - u(x)) \\ &= \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{x} - x|} \left((\hat{x} - x)u'(x) + \mathcal{O}(|\hat{x} - x|^2) \right) \\ &= c_{d,\delta} (\operatorname{sgn}(\hat{x} - x)u'(x)) + \mathcal{O}(|\hat{x} - x|). \end{aligned}$$

Als nächstes betrachten wir den linksseitigen und rechtsseitigen Grenzwert von $(\mathcal{F}u)(x, \cdot)$ für \hat{x} gegen x :

$$\begin{aligned} \lim_{\hat{x} \uparrow x} (\mathcal{F}u)(x, \hat{x}) &= -c_{d,\delta}u'(x), \\ \lim_{\hat{x} \downarrow x} (\mathcal{F}u)(x, \hat{x}) &= +c_{d,\delta}u'(x). \end{aligned}$$

Den Fall des konstanten Verschiebungsfeldes u schließen wir als trivialen Fall aus. Damit ist die Funktion $\hat{x} \mapsto (\mathcal{F}u)(x, \hat{x})$ unstetig im Punkt $\hat{x} = x$. Da der Punkt $x \in \mathcal{V}$ beliebig gewählt war, gilt die Behauptung. \square

Bemerkung. Selbst für Funktionen $u \in C^\infty(\bar{\mathcal{V}})$ bleibt $\mathcal{F}u$ unstetig.

Analog können wir die Aussage in höheren Dimensionen führen. Wir zeigen exemplarisch noch den Fall $d = 2$.

Satz 5.1.3. *Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$ mit $d = 2$ und $\mathbf{u} \in C^1(\bar{\mathcal{V}})^d$. Dann ist die Funktion $\mathcal{F}\mathbf{u}$ unstetig für alle $(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}$ mit $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}$.*

Bemerkung. Aus dem Satz folgt sofort, dass $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ für fast alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ nicht in $W^{k,p}(\mathcal{V})^d$ mit $kp > d$ liegt, da dieser SOBOLEW-Raum in die stetigen Funktionen eingebettet werden kann. Aber $\hat{\mathbf{x}} \mapsto (\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})$, $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$, ist unstetig für beliebig glatte \mathbf{u} .

Beweis von Satz 5.1.3. Zum Beweis benutzen wir die Taylorentwicklung von \mathbf{u} in den einzelnen Komponenten im Mehrdimensionalen. Es sei $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (u_1(\mathbf{x}), u_2(\mathbf{x}))^T$. Betrachte

$$(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})).$$

Dann ist die erste Komponente mit $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ gegeben durch

$$(\mathcal{F}\mathbf{u})_1(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} ((\hat{x}_1 - x_1)^2 (u_1(\hat{\mathbf{x}}) - u_1(\mathbf{x})) + (\hat{x}_1 - x_1)(\hat{x}_2 - x_2)(u_2(\hat{\mathbf{x}}) - u_2(\mathbf{x}))).$$

Mit Hilfe der Taylorentwicklung von u_1 und u_2 folgt

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}\mathbf{u})_1(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} & \left((\hat{x}_1 - x_1)^3 u_1^{(1,0)}(\mathbf{x}) + (\hat{x}_1 - x_1)^2 (\hat{x}_2 - x_2) (u_1^{(0,1)}(\mathbf{x}) + u_2^{(1,0)}(\mathbf{x})) \right. \\ & \left. + (\hat{x}_1 - x_1)(\hat{x}_2 - x_2)^2 u_2^{(0,1)}(\mathbf{x}) \right) + \mathcal{O}(|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|). \end{aligned}$$

Sei jetzt $\hat{x}_2 = x_2$ und betrachte wie zuvor $\hat{x}_1 \rightarrow x$. Die beiden Grenzwerte bestimmen sich zu

$$\begin{aligned} \lim_{\hat{x}_1 \uparrow x_1} (\mathcal{F}\mathbf{u})_1(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) &= -c_{d,\delta} u_1^{(1,0)}(\mathbf{x}), \\ \lim_{\hat{x}_1 \downarrow x_1} (\mathcal{F}\mathbf{u})_1(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) &= +c_{d,\delta} u_1^{(1,0)}(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Das Vorgehen für die zweite Komponente von $\mathcal{F}\mathbf{u}$ ist analog. Damit ist $\hat{\mathbf{x}} \mapsto (\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})$ unstetig. \square

Im Dreidimensionalen lässt sich die Unstetigkeit von $\mathcal{F}\mathbf{u} : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}^3$ für genügend glatte \mathbf{u} mit dem gleichen Vorgehen beweisen. Somit liegt das Bild des Operators \mathcal{F} nicht in den stetigen Funktionen. Diese Aussage ist unabhängig von der Glattheit des betrachteten Verschiebungsfeldes, wie wir im folgenden Beispiel sehen.

Beispiel 5.1.4. In der Regel ist der Integrand, die Kraftfunktion der Peridynamik, nicht glatt, auch wenn das Verschiebungsfeld glatt ist. Betrachten wir dazu das lineare Modell (4.1.3) im Zweidimensionalen. Die Verschiebung sei gegeben durch

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (x, 0)^T$$

mit der Schreibweise $\mathbf{x} = (x, y)^T$. Diese Funktion ist beliebig oft stetig differenzierbar. Für den Integranden erhalten wir in $B_\delta(\mathbf{0})$

$$(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{0}, \hat{\mathbf{x}}) = c_{2,\delta} \frac{(\hat{x}^3, \hat{x}^2\hat{y})^T}{(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)^{3/2}}.$$

Die Unstetigkeit im Punkt Null ist auch hier zu sehen. Damit gilt für die Ableitung der ersten Komponente $(\mathcal{F}\mathbf{u})_1$ von $\mathcal{F}\mathbf{u}$ in \hat{x} -Richtung

$$\frac{\partial(\mathcal{F}\mathbf{u})_1}{\partial\hat{x}} = c_{2,\delta} \frac{3\hat{x}^2\hat{y}^2}{(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)^{5/2}}.$$

Diese ist unbeschränkt in $(0, 0)^T$. Es gilt allerdings, dass diese Ableitung immer noch integrierbar ist. Betrachtet man hingegen die zweite Ableitung in \hat{x} -Richtung so ist diese unbeschränkt und nicht mehr absolut integrierbar. (Die geraden Ableitungen nach \hat{x} integrieren zu Null, die ungeraden sind nicht integrierbar.) An diesem einfachen Beispiel sieht man schon, dass die Ableitungen der Kraftfunktion unbeschränkt sind, selbst wenn \mathbf{u} beliebig oft stetig differenzierbar ist. \triangle

5.1.2 Beschränktheit der Kraftfunktion

Als erstes betrachten wir in welchen Raum \mathcal{F} stetig differenzierbare Funktionen abbildet.

Satz 5.1.5. Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$ mit $d \in \{2, 3\}$ und $\mathbf{u} \in C^1(\overline{\mathcal{V}})^d$. Dann existiert eine Konstante $c > 0$, so dass

$$\|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty} \leq c \|\mathbf{u}\|_{1,\infty}, \quad \text{für fast alle } \mathbf{x} \in \mathcal{V}.$$

Beweis. Sei $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ fest gewählt. Dann erhalten wir

$$\begin{aligned} \|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty} &= \operatorname{ess\,sup}_{\hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}} \left| c_{d,\delta} \frac{(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right| \\ &\leq c_{d,\delta} \operatorname{ess\,sup}_{\hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}} \frac{|\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})|}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} \\ &\leq c \|\mathbf{u}\|_{1,\infty}. \end{aligned}$$

□

Die Beschränktheit erhält man auch im Eindimensionalen.

Satz 5.1.6. Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}$ und sei $u \in C^1(\overline{\mathcal{V}})$. Dann existiert eine Konstante $c > 0$, so dass

$$\|(\mathcal{F}u)(x, \cdot)\|_{0,\infty} \leq c \|u'\|_{0,\infty}.$$

Wir fordern nun schwächere Voraussetzungen an das Verschiebungsfeld \mathbf{u} . So sei \mathbf{u} z.B. wesentlich beschränkt oder aus speziellen SOBOLEW-Räumen. Im nächsten Abschnitt wollen wir dann die Norm von $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$, $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ in bestimmten LEBESGUE-Räumen betrachten.

5.1.3 Abschätzungen in L^p -Räumen

Satz 5.1.7. Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$ und das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} \in L^\infty(\mathcal{V})^d$. Dann liegt die Funktion $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ im LEBESGUE-Raum $L^{1+\sigma}(\mathcal{V})^d$ für fast alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ mit $0 \leq \sigma < d - 1$.

Beweis. Es ist die Beschränktheit von $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ in der $L^{1+\sigma}$ -Norm zu zeigen.

$$\begin{aligned} \|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,1+\sigma,\mathcal{V}} &= \left(\int_{\mathcal{V}} \left| \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right|^{1+\sigma} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{1}{1+\sigma}} \\ &\leq \left(\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} |\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})| \right)^{1+\sigma} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{1}{1+\sigma}} \\ &\leq 2 \|\mathbf{u}\|_{0,\infty,\mathcal{V}} \left(\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} \right)^{1+\sigma} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{1}{1+\sigma}} \leq \text{const} \|\mathbf{u}\|_{0,\infty,\mathcal{V}}. \end{aligned}$$

Dabei wurde bei der ersten Umformung verwendet, dass die Spektralnorm des dyadischen Produktes gleich $|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^2$ ist. Die letzte Ungleichung ergibt sich aus der Integrierbarkeit von $1/|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{d-\varepsilon}$, für $\varepsilon > 0$ in der Nähe von \mathbf{x} in \mathbb{R}^d . \square

Satz 5.1.8. Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$ und das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} \in L^p(\mathcal{V})^d$, $p \in (1, \infty)$. Dann ist die Funktion $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot) \in L^q(\mathcal{V})^d$ für fast alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ mit $q < p$ und $q < \frac{dp}{p+d}$.

Beweis. Wir schätzen $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ in der L^q -Norm ab

$$\|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,q,\mathcal{V}} \leq \left(\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} |\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})| \right)^q d\hat{\mathbf{x}} \right)^{1/q}.$$

Auf diesen Term wenden wir die HÖLDER-Ungleichung mit $\frac{1}{l} + \frac{1}{k} = 1$ an, wobei $k = \frac{p}{q}$ und $l = \frac{p}{p-q}$. Da $p > q$ gilt, liegen alle HÖLDER-Exponenten im Intervall $(1, \infty)$ und somit gilt

$$\begin{aligned} \|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,q,\mathcal{V}} &\leq \left(\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} \right)^{\frac{pq}{p-q}} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{p-q}{pq}} \left(\int_{\mathcal{V}} |\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})|^p d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{1}{p}} \\ &\leq c \|\mathbf{u}\|_{0,p,\mathcal{V}}. \end{aligned}$$

Das zweite Integral ist beschränkt, da $\mathbf{u} \in L^p(\mathcal{V})^d$. Und das erste Integral ist beschränkt, falls $\frac{pq}{p-q} < d$, was nach Voraussetzung erfüllt ist. \square

In vielen Abschätzungen benutzen wir eine Einbettung der SOBOLEW-Räume $W^{1,p}(\Omega)$ in Räume HÖLDER-stetiger Funktionen $C^{0,\lambda}(\overline{\Omega})$.

Satz 5.1.9. *Sei $\Omega \subsetneq \mathbb{R}^d$ ein beschränktes, glatt berandetes Gebiet. Liegt u im SOBOLEW-Raum $W^{1,p}(\Omega)$ mit $d < p \leq \infty$ und gilt $0 \leq \lambda \leq 1 - \frac{d}{p}$, dann ist*

$$\sup_{\substack{x,y \in \Omega \\ x \neq y}} \frac{|u(x) - u(y)|}{|x - y|^\lambda} \leq c \|u\|_{1,p,\Omega},$$

d.h.

$$W^{1,p}(\Omega) \hookrightarrow C^{0,\lambda}(\overline{\Omega}).$$

Beweis. Siehe ADAMS und FOURNIER [1, S. 99 ff.]. \square

Satz 5.1.10. *Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$ und das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} \in W^{1,p}(\mathcal{V})^d$ mit $d < p \leq \infty$. Dann liegt die Funktion $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ im Lebesgue-Raum $L^q(\mathcal{V})^d$ für fast alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$, falls $q < p$.*

Beweis. Laut Voraussetzung ist $\mathbf{u} \in W^{1,p}(\mathcal{V})^d$. Dann existiert nach Satz 5.1.9 eine Abschätzung mit $0 \leq \lambda \leq 1 - \frac{d}{p}$, so dass

$$|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}(\mathbf{y})| \leq c \|\mathbf{u}\|_{1,p,\mathcal{V}} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^\lambda \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{V}.$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,q,\mathcal{V}} &\leq \left(\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} \|\mathbf{u}\|_{1,p,\mathcal{V}} |\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{1-\frac{d}{p}} \right)^q d\hat{\mathbf{x}} \right)^{1/q} \\ &\leq c \left(\int_{\mathcal{V}} |\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{-\frac{dq}{p}} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{1/q} \|\mathbf{u}\|_{1,p,\mathcal{V}} \leq c \|\mathbf{u}\|_{1,p,\mathcal{V}}. \end{aligned}$$

Letzte Ungleichung gilt, wenn $-\frac{dq}{p} > -d$ und somit $q < p$ ist. Dies ist nach Voraussetzung erfüllt. \square

Bemerkung. Im Fall $p = \infty$ kann q frei gewählt werden ($q = \infty$ ist möglich), da \mathbf{u} in diesem Fall Lipschitz-stetig ist (siehe das anschließende Lemma 5.1.11).

Lemma 5.1.11. *Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$ und sei $\mathbf{u} \in W^{1,\infty}(\mathcal{V})^d$. Dann existiert eine Konstante $c > 0$, so dass*

$$\|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,\mathcal{V}} \leq c \|\mathbf{u}\|_{1,\infty,\mathcal{V}} \quad \text{für fast alle } \mathbf{x} \in \mathcal{V}.$$

Beweis.

$$\begin{aligned} \|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,\mathcal{V}} &= \operatorname{ess\,sup}_{\hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}} \left| \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right| \\ &\leq c_{d,\delta} \operatorname{ess\,sup}_{\hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}} \frac{|\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})|}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} \\ &\leq c \|\mathbf{u}\|_{1,\infty,\mathcal{V}}. \end{aligned}$$

In der letzten Ungleichung verwenden wir die Einbettung des SOBOLEW-Raumes $W^{1,\infty}(\mathcal{V})$ in den Raum der Lipschitz-stetigen Funktionen $C^{0,1}(\overline{\mathcal{V}})$ (siehe Satz 5.1.9). \square

5.1.4 Abschätzungen in Sobolew-Normen

In den folgenden Sätzen betrachten wir SOBOLEW-Normen von $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$. Zur Berechnung der Ableitungen benötigen wir einige Hilfssätze. Als erstes beweisen wir die LEIBNIZ-Formel für Matrix-wertige Funktionen.

Lemma 5.1.12. *Sei α ein Multiindex und die Funktionen $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ und $A : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ seien $|\alpha|$ -mal stetig differenzierbar. Dann gilt die LEIBNIZ-Formel auch für diese Matrix-wertigen Funktionen*

$$\partial^\alpha (A(x)u(x)) = \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \partial^\beta A(x) \partial^{\alpha-\beta} u(x).$$

Beweis. Wir schreiben die Formel elementweise und wenden die LEIBNIZ-Formel auf jedes Element an. Mit $(A(x))_{ij} = a_{ij}(x)$ und $(u(x))_i = u_i(x)$ gilt

$$\begin{aligned} & \left(\partial^\alpha (A(x)u(x)) \right)_i = \partial^\alpha \left((A(x)u(x))_i \right) \\ &= \partial^\alpha \left(\sum_{j=1}^d a_{ij}(x)u_j(x) \right) = \sum_{j=1}^d \partial^\alpha \left(a_{ij}(x)u_j(x) \right) \\ &= \sum_{j=1}^d \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \partial^\beta a_{ij}(x) \partial^{\alpha-\beta} u_j(x) = \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \sum_{j=1}^d \partial^\beta a_{ij}(x) \partial^{\alpha-\beta} u_j(x) \\ &= \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \left((\partial^\beta A(x) \partial^{\alpha-\beta} u(x))_i \right) = \left(\sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \partial^\beta A(x) \partial^{\alpha-\beta} u(x) \right)_i. \end{aligned}$$

Versteht man die obige Formel nun elementweise, so ist die Aussage gezeigt. \square

Die Kraftfunktion \mathbf{f} der Peridynamik enthält beim linearisierten Bondstretch-Modell insbesondere den Faktor $\frac{1}{|\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{x}|^3}$. Im nächsten Lemma geben wir eine Darstellung der partiellen Ableitungen dieser Komponente im Zweidimensionalen für $\mathbf{x} = (0, 0)^T$ an.

Lemma 5.1.13. *Die partiellen Ableitungen der Funktion $\mathbf{x} = (x, y) \mapsto \frac{1}{|\mathbf{x}|^3}, \mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\} \rightarrow \mathbb{R}$ sind gegeben durch*

$$\frac{\partial^k}{\partial x^k} \left(\frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right) = \sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} \frac{x^{k-i} y^i}{(x^2 + y^2)^{k+3/2}}, \quad (5.1.1)$$

wobei die Werte $\alpha_{i,k}$ bestimmt werden durch die Rekursionsformel

$$\alpha_{i,k+1} = \alpha_{i-2,k}(k+2-i) - \alpha_{i,k}(k+3+i)$$

und den Anfangsbedingungen

$$\alpha_{i,0} = \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq 0 \\ 1 & \text{für } i = 0 \end{cases}, \quad i \in \mathbb{Z}.$$

Für die Ableitungen in y -Richtung gilt

$$\frac{\partial^\ell}{\partial y^\ell} \left(\frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right) = \sum_{i=0}^{\ell} \beta_{i,\ell} \frac{x^{\ell-i} y^i}{(x^2 + y^2)^{\ell+3/2}} \quad (5.1.2)$$

mit der zugehörigen Rekursionsformel

$$\beta_{i,\ell+1} = \beta_{i-1,\ell}(i - 2\ell - 4) + \beta_{i+1,\ell}(i + 1)$$

und Anfangsbedingung

$$\beta_{i,0} = \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq 0 \\ 1 & \text{für } i = 0 \end{cases}, \quad i \in \mathbb{Z}.$$

Für die gemischten Ableitung sowohl nach x als auch nach y mit $n = k + \ell$ erhalten wir

$$\frac{\partial^n}{\partial x^k \partial y^\ell} \left(\frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right) = \sum_{i=0}^n \gamma_{i,k,\ell} \frac{x^{n-i} y^i}{(x^2 + y^2)^{n+3/2}}, \quad (5.1.3)$$

wobei die Koeffizienten die Rekursionsformel

$$\gamma_{i,k+1,\ell} = \gamma_{i-2,k,\ell}(n + 2 - i) - \gamma_{i,k,\ell}(n + 3 + i)$$

und

$$\gamma_{i,k,\ell+1} = \gamma_{i-1,k,\ell}(i - 2n - 4) + \gamma_{i+1,k,\ell}(i + 1)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\gamma_{i,0,0} = \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq 0 \\ 1 & \text{für } i = 0 \end{cases}, \quad i \in \mathbb{Z} \text{ erfüllen.}$$

Beweis. Den Beweis für die Ableitungen nach x führen wir per Induktion über k . Aus Symmetriegründen erhalten wir damit auch die Ableitungen nach y . Für die gemischten Ableitungen greifen wir dann auf diese Ergebnisse zurück und führen die Induktion über k oder ℓ .

Induktionsanfang: Für $k = 0$ ist die Behauptung richtig.

Induktionsvoraussetzung: Die Aussage sei für ein beliebiges $k \in \mathbb{N}$ richtig.

Induktionsschritt: Wir benutzen die Induktionsvoraussetzung und zeigen, dass die Aus-

sage auch für $k + 1$ gilt

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^{k+1}}{\partial x^{k+1}} \left(\frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right) \stackrel{\text{I.V.}}{=} \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} \frac{x^{k-i} y^i}{(x^2 + y^2)^{k+3/2}} \right) \\
&= \frac{1}{(x^2 + y^2)^{2k+3}} \left[\left(\sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} (k-i) x^{k-i-1} y^i \right) (x^2 + y^2)^{k+3/2} \right. \\
&\quad \left. - \left(\sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} (2k+3) x^{k-i} y^i \right) x (x^2 + y^2)^{k+1/2} \right] \\
&= \frac{1}{(x^2 + y^2)^{(k+1)+3/2}} \left[\sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} (k-i) x^{k-i+1} y^i + \sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} (k-i) x^{k-i-1} y^{i+2} \right. \\
&\quad \left. - \sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} (2k+3) x^{k-i+1} y^i \right].
\end{aligned}$$

Damit haben wir schon den gewünschten Nenner und erhalten weiter für den Zähler

$$\begin{aligned}
& - \sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} (k+3+i) x^{k-i+1} y^i + \sum_{i=2}^{k+2} \alpha_{i-2,k} (k+2-i) x^{k-i+1} y^i \\
&= - \sum_{i=0}^k \alpha_{i,k} (k+3+i) x^{k-i+1} y^i + \sum_{i=2}^{k+1} \alpha_{i-2,k} (k+2-i) x^{k-i+1} y^i \\
&= \sum_{i=0}^{k+1} (\alpha_{i-2,k} (k+2-i) - \alpha_{i,k} (k+3+i)) x^{k+1-i} y^i \\
&= \sum_{i=0}^{k+1} \alpha_{i,k+1} x^{k+1-i} y^i.
\end{aligned}$$

Dabei wurde in der vorletzten Gleichung benutzt, dass $\alpha_{-1,k} = \alpha_{-2,k} = \alpha_{k+1,k} = 0$ gilt. Für die Ableitungen nach y erhalten wir aus Symmetriegründen

$$\frac{\partial^\ell}{\partial y^\ell} \left(\frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right) = \sum_{i=0}^{\ell} \alpha_{i,\ell} \frac{y^{\ell-i} x^i}{(x^2 + y^2)^{\ell+3/2}} = \sum_{i=0}^{\ell} \alpha_{\ell-i,\ell} \frac{x^{\ell-i} y^i}{(x^2 + y^2)^{\ell+3/2}}$$

Damit gilt für diese Koeffizienten

$$\begin{aligned}
\beta_{i,\ell+1} &= \alpha_{\ell+1-i,\ell+1} = \alpha_{\ell+1-i,\ell} (i - 2\ell - 4) + \alpha_{\ell-i-1,\ell} (i + 1) \\
&= \beta_{i-1,\ell} (i - 2\ell - 4) + \beta_{i+1,\ell} (i + 1).
\end{aligned}$$

Für die gemischten Ableitungen nach x und y sei als erstes ℓ fest.

Induktionsanfang: Sei $k = 0$. Nach Gleichung (5.1.2) gilt die Formel für beliebige ℓ .

Induktionsvoraussetzung: Die Formel gelte für beliebige k und ℓ .

Induktionsschritt: Wir zeigen die Gültigkeit der Formel für $k + 1$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{k+1} \partial y^\ell} \left(\frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right) \stackrel{\text{I.V.}}{=} \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{i=0}^n \gamma_{i,k,l} \frac{x^{n-i} y^i}{(x^2 + y^2)^{n+3/2}} \right) \\
&= \frac{1}{(x^2 + y^2)^{2n+3}} \left[\left(\sum_{i=0}^n \gamma_{i,k,l} (n-i) x^{n-i-1} y^i \right) (x^2 + y^2)^{n+3/2} \right. \\
&\quad \left. - \left(\sum_{i=0}^n \gamma_{i,k,l} (2n+3) x^{n-i} y^i \right) x (x^2 + y^2)^{n+1/2} \right] \\
&= \frac{1}{(x^2 + y^2)^{(n+1)+3/2}} \left[\sum_{i=0}^n \gamma_{i,k,l} (n-i) x^{n-i+1} y^i + \sum_{i=0}^n \gamma_{i,k,l} (n-i) x^{n-i-1} y^{i+2} \right. \\
&\quad \left. - \sum_{i=0}^n \gamma_{i,k,l} (2n+3) x^{n-i+1} y^i \right].
\end{aligned}$$

Damit ist der Nenner richtig und wir betrachten nur noch den Zähler für den wir

$$\begin{aligned}
& - \sum_{i=0}^n \gamma_{i,k,l} (n+3+i) x^{n-i+1} y^i + \sum_{i=2}^{n+2} \gamma_{i-2,k,l} (n+2-i) x^{n-i+1} y^i \\
&= \sum_{i=0}^{n+1} (\gamma_{i-2,k,l} (n+2-i) - \gamma_{i,k,l} (n+3+i)) x^{n-i+1} y^i \\
&= \sum_{i=0}^{n+1} \gamma_{i,k+1,l} x^{n-i+1} y^i
\end{aligned}$$

erhalten. Wir benutzen in der vorletzten Gleichung, dass $\gamma_{-2,k,l} = \gamma_{-1,k,l} = \gamma_{n+1,k,l} = 0$ gilt. Führt man die Induktion auch noch über ℓ durch, so erhält man die zweite Rekursionsformel. Analog zu dem Vorgehen bei den Ableitungen nach y können wir auch wieder über die Symmetrie argumentieren. \square

Mit Hilfe der partiellen Ableitungen von $\mathbf{x} \mapsto \frac{1}{|\mathbf{x}|^3}$ können wir eine Abschätzung für die Ableitungen des Steifigkeitstensors \mathbf{C} geben.

Lemma 5.1.14. *Sei $\mathbf{x} \in B_\delta(\mathbf{0})$ und α ein Multiindex. Dann erhalten wir die folgende Abschätzung*

$$\left| \partial^\alpha \left(\frac{\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}}{|\mathbf{x}|^3} \right) \right| \leq \frac{c}{|\mathbf{x}|^{|\alpha|+1}}.$$

Beweis. Wir beschränken uns im Beweis auf den zweidimensionalen Fall. Für höhere Dimensionen ist das Vorgehen analog. Der Ableitungsoperator wirkt elementweise auf die Matrix aus dem dyadischen Produkt. Wir wenden die Produktregel aus Lemma 5.1.12

sowie die Darstellung der Ableitung aus Lemma 5.1.13 an

$$\begin{aligned}
\left| \partial^\alpha \left(\frac{\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right) \right| &\leq \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \left| \partial^\beta (\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}) \right| \left| \partial^{\alpha-\beta} \left(\frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right) \right| \\
&= \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \left| \partial^\beta (\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}) \right| \left| \sum_{i=0}^{|\alpha-\beta|} \gamma_{i,k,l} \frac{x^{|\alpha-\beta|-i} y^i}{(x^2 + y^2)^{|\alpha-\beta|+3/2}} \right| \\
&\leq \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \left| \partial^\beta (\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}) \right| \sum_{i=0}^{|\alpha-\beta|} |\gamma_{i,k,l}| \frac{|\mathbf{x}|^{|\alpha-\beta|-i} |\mathbf{x}|^i}{|\mathbf{x}|^{2|\alpha-\beta|+3}} \\
&\leq \sum_{\beta \leq \alpha} \frac{c}{|\mathbf{x}|^{|\alpha-\beta|+3}} \left| \partial^\beta (\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}) \right|.
\end{aligned}$$

Es bleibt noch die elementweise Ableitung des dyadischen Produkts

$$\mathbf{x} \otimes \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x^2 & xy \\ xy & y^2 \end{bmatrix}$$

zu berechnen. Für $|\beta| \geq 3$ sind die Ableitungen sämtlich Null. Sei $|\beta| \leq 2$. Wir berechnen für alle möglichen β die Ableitungen des dyadischen Produkts und die Zeilensummennorm der Matrix.

$$(i) \text{ Für } \beta = (0, 0)^T \text{ ist } \left| \begin{array}{cc} x^2 & xy \\ xy & y^2 \end{array} \right|_\infty \leq 2 |\mathbf{x}|^2.$$

$$(ii) \text{ Für } \beta = (1, 0)^T \text{ ist } \left| \begin{array}{cc} 2x & y \\ y & 0 \end{array} \right|_\infty = 2|x| + |y| \leq 3|\mathbf{x}|.$$

$$(iii) \text{ Für } \beta = (0, 1)^T \text{ ist } \left| \begin{array}{cc} 0 & x \\ x & 2y \end{array} \right|_\infty = |x| + 2|y| \leq 3|\mathbf{x}|.$$

$$(iv) \text{ Für } \beta = (1, 1)^T \text{ ist } \left| \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right|_\infty = 1.$$

$$(v) \text{ Für } \beta = (2, 0)^T \text{ ist } \left| \begin{array}{cc} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right|_\infty = 2.$$

$$(vi) \text{ Für } \beta = (0, 2)^T \text{ ist } \left| \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{array} \right|_\infty = 2.$$

Mit $|\alpha - \beta| + 3 - (2 - |\beta|) = |\alpha| + 1$ folgt die Behauptung. \square

Mit diesen Aussagen können wir nun eine erste Abschätzung in einer SOBOLEW-Norm geben.

Satz 5.1.15. *Sei $\mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$ und das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} \in W^{1,p}(\mathcal{V})^d$ mit $d < p \leq \infty$. Dann liegt die Funktion $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot) \in W^{1,q}(\mathcal{V})^d$ für fast alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ mit $q < p$ und $q < \frac{dp}{p+d}$.*

Beweis. Sei $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ fest gewählt. Wir betrachten die $W^{1,q}$ -Norm von $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$

$$\|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{1,q,\mathcal{V}} = \left(\|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,q,\mathcal{V}}^q + \sum_{|\alpha|=1} \|\partial^\alpha (\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,q,\mathcal{V}}^q \right)^{\frac{1}{q}}.$$

Nach Satz 5.1.8 ist $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot) \in L^q(\mathcal{V})^d$ und somit $\|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,q,\mathcal{V}}$ endlich. Betrachte die ersten Ableitungen. In der ersten Ungleichung verwenden wir Lemma 5.1.12 und 5.1.14

$$\begin{aligned} \|\partial^\alpha (\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,q,\mathcal{V}}^q &= \int_{\mathcal{V}} \left| \partial^\alpha \left[\frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right] \right|^q d\hat{\mathbf{x}} \\ &\leq \int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^2} |\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})| + \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} |\partial^\alpha \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}})| \right)^q d\hat{\mathbf{x}} \\ &\leq \left(\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c_1}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^2} |\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})| \right)^q d\hat{\mathbf{x}} \right. \\ &\quad \left. + \int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c_2}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} |\partial^\alpha \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}})| \right)^q d\hat{\mathbf{x}} \right). \end{aligned}$$

Auf das zweite Integral wenden wir die HÖLDER-Ungleichung wie in Satz 5.1.8 an. Für das erste Integral gilt nach Satz 5.1.9

$$|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}(\mathbf{y})| \leq c \|\mathbf{u}\|_{1,p,\mathcal{V}} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{1-\frac{d}{p}}, \quad \text{für fast alle } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{V}.$$

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} \|\partial^\alpha (\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,q,\mathcal{V}}^q &\leq \|\mathbf{u}\|_{1,p,\mathcal{V}}^q \left[\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c_1}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^2} |\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{1-\frac{d}{p}} \right)^q d\hat{\mathbf{x}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{c_2}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|} \right)^{\frac{pq}{p-q}} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{p-q}{p}} \left(\int_{\mathcal{V}} |\partial^\alpha \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}})|^p d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{q}{p}} \right] \\ &\leq c \|\mathbf{u}\|_{1,p,\mathcal{V}}^q. \end{aligned}$$

Das erste Integral ist für $\frac{(p+d)q}{p} < d$ beschränkt und das zweite Integral für $\frac{pq}{p-q} < d$. Beides ist nach Voraussetzung erfüllt. Weiter ist $\mathbf{u} \in W^{1,p}(\mathcal{V})^d$ und somit auch das letzte Integral beschränkt. \square

In Abschnitt 3.3 benötigen wir zur Bestimmung des Quadraturfehlers eine Abschätzung der zu integrierenden Funktion in der k - p -Halbnorm. Im nächsten Satz zeigen wir eine solche Abschätzung für die Kraftfunktion der Peridynamik.

Satz 5.1.16. *Sei $\mathbf{x} \in \mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$, $\Omega := B_\delta(\mathbf{x})$ und für $0 < \varepsilon < \min(\delta, 1)$ sei $\Omega_\varepsilon := B_\delta(\mathbf{x}) \setminus B_\varepsilon(\mathbf{x})$. Weiter sei $\mathbf{u} \in W^{k,q}(\Omega)^d$ für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ mit $k \geq 1$ (insbesondere gilt $\mathbf{u} \in W^{1,q}(\Omega)^d$), $kp > d$, $d < q \leq \infty$ und $p \leq q$. Dann existiert ein $c > 0$, so dass für fast alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ gilt*

$$|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|_{k,p,\Omega_\varepsilon} \leq c \varepsilon^{d/p-d/q-k} \|\mathbf{u}\|_{k,q,\Omega}.$$

Bemerkung. Für $\varepsilon \rightarrow 0$ geht Ω_ε gegen Ω und die rechte Seite der Ungleichung ist unbeschränkt. Dies ist einsichtig, da $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ unstetig ist auf $B_\delta(\mathbf{x})$ (nämlich im Punkt \mathbf{x}). Weiterhin gilt die folgende Einbettungsaussage:

$$W^{k,p}(\Omega) \hookrightarrow C(\bar{\Omega}) \text{ für } kp > d.$$

Wäre $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ beschränkt in $\|\cdot\|_{k,p}$ auf Ω mit $kp > d$, so müsste es auf ganz $\bar{\Omega}$ stetig sein.

Beweis. Nach Definition ist die k - p -Halbnorm

$$|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|_{k,p,\Omega_\varepsilon} = \left(\sum_{|\alpha|=k} \int_{\Omega_\varepsilon} |\partial^\alpha (\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})|^p d\hat{\mathbf{x}} \right)^{1/p} \quad \mathbf{x} \in \mathcal{V}.$$

Betrachten wir als erstes die euklidische Norm der partiellen Ableitungen von $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$. Sei dazu $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ fest gewählt. Dann gilt

$$\begin{aligned} |\partial^\alpha (\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)| &= \left| \partial^\alpha \left[c_{d,\delta} \frac{(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right] \right| \\ &= \left| \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \partial^\beta \left[c_{d,\delta} \frac{(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} \right] \partial^{\alpha-\beta} (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right|. \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Produktregel in Form von Lemma 5.1.12 benutzt. Im Folgenden Schritt wenden wir Lemma 5.1.14 an und erhalten

$$\begin{aligned} &\sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{|\beta|+1}} \left| \partial^{\alpha-\beta} (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right| \\ &= \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{k+1}} |\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})| + \sum_{\beta < \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{|\beta|+1}} \left| \partial^{\alpha-\beta} (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right| \\ &\leq \frac{c_1}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{k+d/q}} \|\mathbf{u}\|_{1,q,\Omega} + \sum_{\beta < \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \frac{c_2}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{|\beta|+1}} \left| \partial^{\alpha-\beta} (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right|. \end{aligned}$$

Dabei haben wir in der letzten Ungleichung die Einbettung aus Lemma 5.1.9 benutzt. Betrachten wir jetzt das Integral über die p -te Potenz von $\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ und wenden die diskrete HÖLDER-Ungleichung an. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\varepsilon} |\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|^p d\hat{\mathbf{x}} &\leq \int_{\Omega_\varepsilon} \frac{c_1}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{pk+pd/q}} d\hat{\mathbf{x}} \|\mathbf{u}\|_{1,q,\Omega}^p \\ &\quad + \sum_{\beta < \alpha} \binom{\alpha}{\beta}^p \int_{\Omega_\varepsilon} \left(\frac{c_2}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{|\beta|+1}} \left| \partial^{\alpha-\beta} \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) \right| \right)^p d\hat{\mathbf{x}}. \end{aligned}$$

Ziel ist es, die Integrale gegen eine Potenz von ε abzuschätzen. Dazu berechnen wir das erste Integral und wenden auf das zweite die HÖLDER-Ungleichung an. Integrieren wir zunächst, erhalten wir

$$\int_{B_\delta(\mathbf{x}) \setminus B_\varepsilon(\mathbf{x})} \frac{c_1}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{pk+pd/q}} d\hat{\mathbf{x}} \leq c_1 \int_\varepsilon^\delta r^{d-1-pk-pd/q} dr \leq c_1 \varepsilon^{d-pk-pd/q}.$$

Die Ungleichungen gelten wegen $d - pk - pd/q < 0$ und $0 < \varepsilon < \min(\delta, 1)$. Wenden wir nun die HÖLDER-Ungleichung mit den zueinander konjugierten Exponenten γ und γ^* , d.h. $1/\gamma + 1/\gamma^* = 1$, an. Wir wählen $\gamma^* = q/p$ und erhalten somit für $\gamma = q/(q-p)$. Nach Voraussetzung ist $p \leq q$ und somit liegen die HÖLDER-Exponenten im Intervall $[1, \infty)$. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_\varepsilon} \frac{c_2}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{p(|\beta|+1)}} \left| \partial^{\alpha-\beta} \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) \right|^p d\hat{\mathbf{x}} \\ &\leq \left(\int_{\Omega_\varepsilon} \left(\frac{c_2}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{p(|\beta|+1)}} \right)^{\frac{q}{q-p}} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{q-p}{q}} \left(\int_{\Omega_\varepsilon} \left| \partial^{\alpha-\beta} \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) \right|^q d\hat{\mathbf{x}} \right)^{p/q}. \end{aligned}$$

Nach Integration erhalten wir

$$\int_{\Omega_\varepsilon} \frac{c_2}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{\frac{pq}{q-p}(|\beta|+1)}} d\hat{\mathbf{x}} \leq c_2 \int_\varepsilon^\delta r^{d-1-\frac{pq}{q-p}(|\beta|+1)} dr \leq c_2 \varepsilon^{d-\frac{pq}{q-p}k}.$$

Dabei schätzen wir $\varepsilon^{-(|\beta|+1)}$ durch ε^{-k} ab und nutzen $0 < \varepsilon < \min(\delta, 1)$. Die Konstante c_2 hängt von δ ab. Wir erhalten

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_\varepsilon} |\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|^p d\hat{\mathbf{x}} \\ &\leq c_1 \varepsilon^{d-\frac{pd}{q}-pk} \|\mathbf{u}\|_{1,q,\Omega}^p + \sum_{\beta < \alpha} \binom{\alpha}{\beta}^p \left(\frac{c_2}{\varepsilon^{\frac{pq}{q-p}k-d}} \right)^{\frac{q-p}{q}} \left(\int_{\Omega_\varepsilon} \left| \partial^{\alpha-\beta} \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) \right|^q d\hat{\mathbf{x}} \right)^{\frac{p}{q}} \\ &\leq c \varepsilon^{d-\frac{pd}{q}-pk} \left(\|\mathbf{u}\|_{1,q,\Omega}^p + \|\mathbf{u}\|_{k,q,\Omega}^p \right). \end{aligned}$$

Nach Aufsummieren und Wurzelziehen erhalten wir

$$\|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{k,p,\Omega_\varepsilon} \leq c \varepsilon^{\frac{d}{p}-\frac{d}{q}-k} \|\mathbf{u}\|_{k,q,\Omega}.$$

□

Wir formulieren ein Korollar, das die optimale (der Exponent von ε sollte möglichst klein sein) Abschätzung angibt.

Korollar 5.1.17. *Sei $\mathbf{x} \in \mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$ und $\Omega := B_\delta(\mathbf{x})$ und für $0 < \varepsilon < \min(\delta, 1)$ sei $\Omega_\varepsilon := B_\delta(\mathbf{x}) \setminus B_\varepsilon(\mathbf{x})$. Weiter sei $\mathbf{u} \in W^{k,\infty}(\Omega)^d$, $kp > d$. Dann gilt für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$*

$$|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|_{k,p,\Omega_\varepsilon} \leq c\varepsilon^{\frac{d}{p}-k} \|\mathbf{u}\|_{k,\infty,\Omega}.$$

Die Forderungen der wesentlichen Beschränktheit aller schwachen Ableitungen von \mathbf{u} ist sehr stark. Bevor wir eine weitere Abschätzung vorstellen, bei der diese Forderung abgeschwächt wird, benötigen wir ein weiteres Einbettungsergebnis.

Satz 5.1.18 (SOBOLEW-Einbettungen). *Sei $\Omega \subsetneq \mathbb{R}^d$ ein beschränktes, glatt berandetes Gebiet und seien $k \geq 1$, $l \geq 0$ ganze Zahlen, wobei $k \geq l$ gelte. Weiter sei $1 \leq p < \infty$. Dann gilt im Fall $(k-l)p > d$*

$$W^{k,p}(\Omega) \hookrightarrow W^{l,q}(\Omega) \quad \text{für } p \leq q \leq \infty$$

und im Fall $(k-l)p < d$

$$W^{k,p}(\Omega) \hookrightarrow W^{l,q}(\Omega) \quad \text{für } p \leq q \leq \frac{dp}{d - (k-l)p}.$$

Beweis. Für einen Beweis siehe ADAMS und FOURNIER [1]. □

Satz 5.1.19. *Sei $\mathbf{x} \in \mathcal{V} \subsetneq \mathbb{R}^d$, $\Omega := B_\delta(\mathbf{x})$ und für $0 < \varepsilon < \min(\delta, 1)$ sei $\Omega_\varepsilon := B_\delta(\mathbf{x}) \setminus B_\varepsilon(\mathbf{x})$. Weiter sei $\mathbf{u} \in W^{l,q}(\Omega)^d$ mit $l \geq k \geq 1$ und $p \leq \frac{dq}{d-q(l-k)}$ im Fall $q(l-k) < d$ und $p \leq \infty$ beliebig im Fall $q(l-k) > d$. Dann gilt für fast alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ und $kp > d$*

$$|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|_{k,p,\Omega_\varepsilon} \leq c\varepsilon^{\min(d/p-k-d/q+l-1, d/p-k)} \|\mathbf{u}\|_{l,q,\Omega}.$$

Beweis. Sei $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ fest gewählt. Wir argumentieren wie in Satz 5.1.16 und erhalten

$$|\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)| = \left| \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \partial^\beta \left[c_{d,\delta} \frac{(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} \right] \partial^{\alpha-\beta}(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right|.$$

Im nächsten Schritt wenden wir wieder Lemma 5.1.14 an, betrachten aber alle Summanden zusammen. Daraus ergibt sich

$$|\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)| \leq \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{|\beta|+1}} \left| \partial^{\alpha-\beta}(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right|.$$

Auf

$$\int_{\Omega_\varepsilon} |\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|^p d\hat{\mathbf{x}} \leq \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta}^p \int_{\Omega_\varepsilon} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{p(|\beta|+1)}} \left| \partial^{\alpha-\beta}(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \right|^p d\hat{\mathbf{x}}$$

wollen wir für jeden Summanden geschickt die HÖLDER-Ungleichung anwenden. Dazu bestimmen wir den größten Lebesgue-Exponenten $r(\beta)$ in Abhängigkeit von den festen Größen l, q, α, d und der variablen Größe β , so dass gilt

$$W^{l,q}(\Omega_\varepsilon)^d \hookrightarrow W^{|\alpha-\beta|,r}(\Omega_\varepsilon)^d.$$

Betrachten wir zuerst den Fall $ql < d$. Damit ist auch $q(l - |\alpha - \beta|) < d$ und wir erhalten das maximale r mit

$$r(\beta) = \frac{dq}{d - q(l - |\alpha - \beta|)}.$$

Somit bestimmen sich die zueinander konjugierten HÖLDER-Exponenten zu

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{r(\beta)}{p} = \frac{dq}{p(d - q(l - |\alpha - \beta|))} \quad \text{und} \\ \gamma^* &= \frac{\gamma}{\gamma - 1} = \frac{dq}{dq - p(d - q(l - |\alpha - \beta|))}. \end{aligned}$$

Aufgrund der Forderung $p \leq \frac{dq}{d - q(l - k)}$ liegt der HÖLDER-Exponent γ im Intervall $[1, \infty]$ für alle β . Wenden wir nun die HÖLDER-Ungleichung an und integrieren mit Polarkoordinaten so ergibt sich

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_\varepsilon} |\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|^p d\hat{\mathbf{x}} \\ & \leq \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta}^p \left(\int_{\Omega_\varepsilon} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{p(|\beta|+1)\gamma^*}} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{1/\gamma^*} \left(\int_{\Omega_\varepsilon} |\partial^{\alpha-\beta}(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x}))|^{r(\beta)} d\hat{\mathbf{x}} \right)^{1/\gamma} \\ & \leq c \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta}^p \varepsilon^{d/\gamma^* - p(|\beta|+1)} \|\mathbf{u}\|_{l,q}^{r(\beta)/\gamma} \\ & \leq c \varepsilon^{d - pd/q + p(l-1) - p|\alpha|} \|\mathbf{u}\|_{l,q}^p, \end{aligned}$$

wobei wir in der letzten Ungleichung die Unabhängigkeit der Exponenten von β ausgenutzt haben. Summieren wir nun über alle $|\alpha| = k$ und ziehen die p -te Wurzel so folgt

$$|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|_{k,p,\Omega_\varepsilon} \leq c \varepsilon^{d/p - k - d/q + l - 1} \|\mathbf{u}\|_{l,q,\Omega}.$$

Betrachten wir nun noch den Fall $q(l - 1) > d$. Aufgrund der SOBOLEWSchen Einbettungssätze erhalten wir

$$W^{l,q}(\Omega_\varepsilon)^d \hookrightarrow W^{1,\infty}(\Omega_\varepsilon)^d \hookrightarrow C^{0,1}(\bar{\Omega}_\varepsilon)^d.$$

Wie zuvor schätzen wir $|\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|$ ab, betrachten aber $|\beta| = k$ gesondert. Wir erhalten

$$\begin{aligned} |\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)| & \leq \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{k+1}} |(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x}))| + \sum_{\beta < \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{|\beta|+1}} |\partial^{\alpha-\beta}(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x}))| \\ & \leq \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^k} \|\mathbf{u}\|_{1,\infty,\Omega} + \sum_{\beta < \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{|\beta|+1}} |\partial^{\alpha-\beta}(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x}))|. \end{aligned}$$

Dabei haben wir in der letzten Ungleichung die Einbettung aus Lemma 5.1.9 benutzt. Betrachten wir jetzt das Integral über die p -te Potenz von $\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ und wenden die diskrete HÖLDER-Ungleichung an. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\varepsilon} |\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|^p d\hat{\mathbf{x}} &\leq \int_{\Omega_\varepsilon} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{pk}} d\hat{\mathbf{x}} \|\mathbf{u}\|_{1,\infty,\Omega_\varepsilon}^p \\ &\quad + \sum_{\beta < \alpha} \binom{\alpha}{\beta}^p \int_{\Omega_\varepsilon} \left(\frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{|\beta|+1}} \left| \partial^{\alpha-\beta} \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) \right| \right)^p d\hat{\mathbf{x}}, \end{aligned}$$

wobei wir $\partial^{\alpha-\beta}(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) = \partial^{\alpha-\beta} \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}})$ für $\beta < \alpha$ ausnutzen. Ziel ist es, die Integrale gegen eine Potenz von ε abzuschätzen. Dazu berechnen wir das erste Integral und wenden auf das zweite die HÖLDER-Ungleichung an. Integrieren wir zuerst, so erhalten wir

$$\int_{B_\delta(\mathbf{x}) \setminus B_\varepsilon(\mathbf{x})} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^{pk}} d\hat{\mathbf{x}} \leq c \int_\varepsilon^\delta r^{d-1-pk} dr \leq c \varepsilon^{d-pk}.$$

Die ersten partiellen Ableitungen von \mathbf{u} sind wesentlich beschränkt. Wir können die Abschätzung mit der HÖLDER-Ungleichung wie zuvor führen. Insgesamt erhalten wir

$$\int_{\Omega_\varepsilon} |\partial^\alpha(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|^p d\hat{\mathbf{x}} \leq c(\varepsilon^{d-pk} + \varepsilon^{d-pk-pd/q+p(l-1)}) \|\mathbf{u}\|_{l,q}^p.$$

Aufgrund der Annahme $(l-1)q > d$ dominiert der erste ε -Term. Aufsummieren über alle $|\alpha| = k$ und Ziehen der p -ten Wurzel liefert

$$|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|_{k,p,\Omega_\varepsilon} \leq c \varepsilon^{d/p-k} \|\mathbf{u}\|_{l,q}.$$

Wir haben die Fälle $ql < d$ und $q(l-1) > d$ betrachtet. In den Fällen wo $ql > d$, aber $q(l-1) < d$ ist, können wir argumentieren wie im ersten Teil des Beweises. Die Einbettungen behalten ihre Gültigkeit. Alternativ können wir ähnlich wie im zweiten Teil des Beweises in einen Raum HÖLDER-stetiger Funktionen $C^{0,\lambda}(\overline{\Omega_\varepsilon})^d$ mit $\lambda < 1$ einbetten und abschätzen. □

Auch für diesen Satz geben wir ein Korollar an, dass die optimalen Bedingungen widerspiegelt.

Korollar 5.1.20. *Seien \mathcal{V} , Ω , Ω_ε wie in Satz 5.1.19 definiert und sei $\mathbf{u} \in W^{l,q}(\Omega)^d$ mit $q(l-1) > d$. Sei weiter $l \geq k \geq 1$ und $kp > d$, wobei $p \leq \frac{dq}{d-q(l-k)}$ im Fall $q(l-k) < d$ und $p \leq \infty$ beliebig im Fall $q(l-k) > d$. Dann gilt für fast alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$*

$$|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)|_{k,p,\Omega_\varepsilon} \leq c \varepsilon^{d/p-k} \|\mathbf{u}\|_{l,q,\Omega}.$$

Bemerkung. Die Bedingung $q(l-1) > d$ sichert die Lipschitz-Stetigkeit von \mathbf{u} .

Mit Hilfe der Abschätzungen aus Korollar 5.1.17 und 5.1.20 werden wir im nächsten Abschnitt den Quadraturfehler in der Peridynamik bestimmen.

5.2 Fehlerabschätzung im Falle einer Singularität

Im Abschnitt 5.1 haben wir die Funktion $(\mathcal{F}u)(\mathbf{x}, \cdot)$ in unterschiedlichen Normen abgeschätzt. Entscheidend dabei war die Abschätzung in der k - p -Halbnorm, mit der wir das Wachstumsverhalten der schwachen Ableitungen angeben. Diese Aussagen wenden wir zusammen mit den Abschätzungen aus Kapitel 3.3 an, um eine Abschätzung des Quadraturfehlers in der Peridynamik zu erhalten. Wir beschränken uns auf den Fall $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ mit dem zu betrachtenden Integrationsgebiet $\Omega = B_\delta(\mathbf{0})$. Im folgenden stellen wir eine Fehlerabschätzung im Falle einer Singularität bei gegebenem Wachstumsverhalten und einer quasi-uniformen Folge von Zerlegungen des Gebietes Ω vor.

Dazu definieren wir als erstes die Eigenschaften *regulär* und *quasi-uniform* einer Folge von Zerlegungen. Wir verweisen auf Definition 3.3.3 für die Begriffe $\rho(T)$ und $\text{diam}(T)$.

Definition 5.2.1 (regulär). Eine Folge \mathcal{F} von Zerlegungen \mathcal{Z}_h heißt *regulär*, falls eine nur von der Folge \mathcal{F} abhängige Konstante $\beta_1 > 0$ existiert, so dass für alle Zerlegungen \mathcal{Z}_h und alle Elemente $T \in \mathcal{Z}_h$ gilt

$$\text{diam}(T) \leq \beta_1 \rho(T).$$

Das Verhältnis $\text{diam}(T)/\rho(T)$ beschreibt wie entartet ein Element T ist.

Definition 5.2.2 (quasi-uniform). Eine Folge \mathcal{F} von Zerlegungen \mathcal{Z}_h heißt *quasi-uniform*, wenn sie regulär ist und eine nur von der Folge \mathcal{F} abhängige Konstante $\beta_2 > 0$ existiert, so dass

$$h_{\max} := \max_{T \in \mathcal{Z}_h} \text{diam}(T) \leq \beta_2 \rho(T) \quad \forall \mathcal{Z}_h, \forall T \in \mathcal{Z}_h.$$

Damit gilt für eine quasi-uniforme Folge von Zerlegungen die Abschätzung

$$h_{\max} \leq \beta_2 \rho(T) \leq \beta_2 \beta_1 \rho(T) \quad \forall \mathcal{Z}_h, \forall T \in \mathcal{Z}_h$$

und somit $h_{\max} \leq \beta_1 \beta_2 \rho_{\min}$ mit $\rho_{\min} := \min_{T \in \mathcal{Z}_h} \rho(T)$. Diese Ungleichung werden wir in der Form $1/\rho_{\min} \leq \beta_1 \beta_2 / h_{\max}$ häufiger verwenden.

Satz 5.2.3. Sei $\phi = \phi(\mathbf{x})$ eine integrierbare Funktion mit beschränkten Ableitungen bis zur Ordnung $n - 1$. An der Stelle $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ besitze ϕ unbeschränkte n -te Ableitungen, so dass gilt

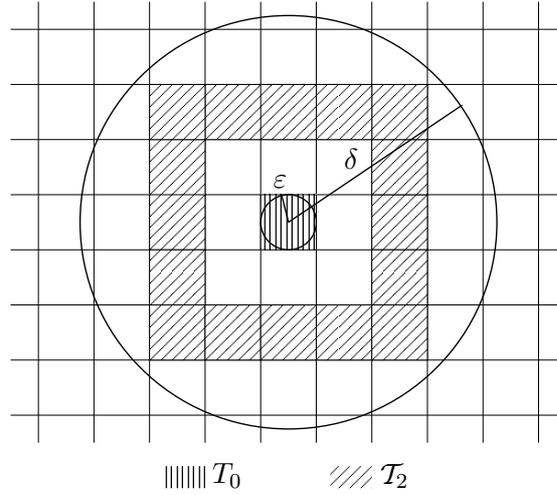
$$\sum_{|\alpha|=n} |\partial^\alpha \phi(\mathbf{x})| \leq c |\mathbf{x}|^{-\beta}, \quad (5.2.1)$$

mit einer Konstanten c , die von ϕ abhängt und einem $\beta > 0$, $\beta \neq d$. Betrachten wir eine Quadraturformel, die exakt ist auf $\Omega = B_\delta(\mathbf{0})$ für Polynome vom Grad $n - 1$, dann kann der Quadraturfehler beschränkt werden durch

$$|E_\Omega[\phi]| \leq |E_{T_0}[\phi]| + c h_{\max}^{\min(d+n-\beta, n)}, \quad (5.2.2)$$

mit einem Element T_0 , das die Null enthält. Im Fall $\beta = d$ ergibt sich

$$|E_\Omega[\phi]| \leq |E_{T_0}[\phi]| + c h_{\max}^n \log(1/h_{\max}).$$

Abbildung 5.2.1: Der Kreisring \mathcal{T}_2

Beispiel 5.2.4. Betrachten wir Beispiel 5.1.4. Die erste Ableitung ist hier schon unbeschränkt. Es lässt sich für diese eine Abschätzung mit $\beta = 1$ angeben. \triangle

Beweis von Satz 5.2.3. Auf dem Element T_0 mit $\mathbf{0} \in T_0$ können wir eine Quadratur anwenden, die exakt ist für Polynome vom Grad $n - 2$. Somit erhalten wir eine Fehlerabschätzung der Gestalt

$$|E_{T_0}[\phi]| \leq c |T_0| (\text{diam } T_0)^{n-1} |\phi|_{n-1, \infty, T_0}.$$

Gilt $n = 1$ wie in unserem Beispiel, so können wir das Element T_0 in der Integration ignorieren und machen somit einen Fehler von

$$|E_{T_0}[\phi]| \leq c |T_0| \|\phi\|_{0, \infty, T_0}.$$

Wir betrachten Ringe \mathcal{T}_j von Elementen T_ℓ um den Ursprung mit $1 \leq j \leq \delta/\rho_{\min}$ (siehe Abb. 5.2.1). Die Einteilung der Ringe erfolgt über die Maximumnorm:

$$j\rho_{\min} \leq |\mathbf{x}|_\infty < (j+1)\rho_{\min} \quad \mathbf{x} \in T_\ell \in \mathcal{T}_j.$$

Hierbei sei $\rho_{\min} = \min_{T_\ell} \rho(T_\ell)$. Die Vereinigung von T_0 und allen Ringen \mathcal{T}_j enthält alle Elemente der Zerlegung. Die Anzahl der Elemente m_j pro Schicht lässt sich (im äquidistanten Fall) mit

$$\begin{aligned} m_j &= 8j \leq cj & \text{für } d = 2, \\ m_j &\leq cj^2 & \text{für } d = 3, \end{aligned}$$

oder allgemein mit $m_j \leq cj^{d-1}$ abschätzen. Lassen wir T_0 für einen Moment außer

Betracht, so können wir den Gesamtfehler durch Aufsummieren über die einzelnen Elemente T_l und alle Ringe \mathcal{T}_j darstellen. Wir benutzen die Fehlerabschätzung (3.3.5) für ein einzelnes Element aus Satz 3.3.7 und fordern $\beta \neq d$:

$$\begin{aligned} |E_{\Omega \setminus T_0}[\phi]| &\leq \sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{l=1}^{m_j} |T_l| (\text{diam } T_l)^n \sup_{\mathbf{x} \in T_l} |\mathbf{x}|^{-\beta} \leq c \sum_{j=1}^{\delta/h_{\max}} j^{d-1} h_{\max}^{d+n} (j\rho_{\min})^{-\beta} \\ &\leq c h_{\max}^{d+n-\beta} \sum_{j=1}^{\delta/h_{\max}} j^{d-1-\beta} \leq c h_{\max}^{d+n-\beta} h_{\max}^{-\max(0, d-\beta)} = c h_{\max}^{\min(d+n-\beta, n)}. \end{aligned}$$

Dabei enthält c die Konstante aus der Abschätzung für die n -te Ableitung. Bei der zweiten und dritten Ungleichung haben wir die Quasi-Uniformität der Zerlegung benutzt. Im Fall $\beta = d$ ist die letzte Ungleichung anzupassen. \square

Wir wenden jetzt Satz 5.2.3 auf die Kraftfunktion der Peridynamik an. Dazu sei $\phi(\hat{\mathbf{x}}) = (\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{0}, \hat{\mathbf{x}})$.

Satz 5.2.5. *Sei das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} \in W^{n,\infty}(\Omega)^d$ und wir betrachten eine Quadraturformel, die exakt ist für Polynome vom Grad $n-1$. Dann lässt sich der Quadraturfehler auf $\Omega = B_\delta(\mathbf{0})$ abschätzen durch*

$$|E_\Omega[\phi]| \leq c h_{\max}^{\min(n,d)} \|\mathbf{u}\|_{n,\infty},$$

im Fall $n \neq d$ und durch

$$|E_\Omega[\phi]| \leq c h_{\max}^d \log(1/h_{\max}) \|\mathbf{u}\|_{n,\infty},$$

im Fall $n = d$.

Beweis. Aus Korollar 5.1.17 erhalten wir unter der Voraussetzung $\mathbf{u} \in W^{n,\infty}(\Omega)$ die Abschätzung

$$|\phi|_{n,\infty,\Omega \setminus T_0} \leq \sup_{\hat{\mathbf{x}} \in \Omega \setminus T_0} c |\hat{\mathbf{x}}|^{-n} \|\mathbf{u}\|_{n,\infty,\Omega}.$$

Auf dem Element T_0 schätzen wir den Fehler durch

$$|E_{T_0}[\phi]| \leq c h_{\max}^d \|\phi\|_{0,\infty} \leq c h_{\max}^d \|\mathbf{u}\|_{1,\infty}$$

nach Lemma 5.1.11 ab. In dem Fall der Peridynamik ist $\beta = n$ und nach Satz 5.2.3 erhalten wir eine Fehlerordnung von $\mathcal{O}(h_{\max}^{\min(n,d)})$, im Fall $n \neq d$ und von $\mathcal{O}(h_{\max}^d \log(1/h_{\max}))$ im Fall $n = d$. Falls $n > d$ gilt, erhalten wir eine Fehlerabschätzung der Ordnung $\mathcal{O}(h_{\max}^d)$. \square

Wir schwächen jetzt die Voraussetzung an das Verschiebungsfeld ab und geben eine weitere Fehlerabschätzung.

Satz 5.2.6. Sei das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} \in W^{l,q}(\Omega)^d$ mit $q(l-1) > d$ und $l \geq n \geq 1$ und seien die Voraussetzungen an p aus Korollar 5.1.20 gegeben. Weiter betrachten wir eine Quadraturformel, die exakt ist für Polynome vom Grad $n-1$, und es gelte $np > d$. Dann lässt sich der Quadraturfehler auf $\Omega = B_\delta(\mathbf{0})$ abschätzen durch

$$|E_\Omega[\phi]| \leq c h_{\max}^{\min(n-d/p,d)} \|\mathbf{u}\|_{l,q}$$

für $n \neq d + d/p$ und durch

$$|E_\Omega[\phi]| \leq c h_{\max}^d \log(1/h_{\max}) \|\mathbf{u}\|_{l,q}$$

für $n = d + d/p$.

Beweis. Für das Element T_0 ergibt sich dieselbe Abschätzung wie im Satz zuvor, da die Einbettung $W^{l,q}(\Omega)^d \hookrightarrow W^{1,\infty}(\Omega)^d$ besteht. Statt der Fehlerabschätzung (3.3.5) aus Satz 3.3.7 können wir auch Abschätzung (3.3.4) aus Satz 3.3.6 nutzen. Nach dem Aufsummieren über alle Elemente der Zerlegung erhalten wir ebenso eine Abschätzung für den Quadraturfehler auf $B_\delta(\mathbf{0})$. Wir benutzen Korollar 5.1.20 zur Abschätzung von $|\phi|_{n,p}$. Schon unter den gegebenen Voraussetzungen an das Verschiebungsfeld \mathbf{u} erhalten wir dann unter gewissen Einschränkungen an p :

$$|\phi|_{n,p,\Omega \setminus T_0} \leq \sup_{\hat{\mathbf{x}} \in \Omega \setminus T_0} c |\hat{\mathbf{x}}|^{d/p-n} \|\mathbf{u}\|_{l,q,\Omega}.$$

Unter Zuhilfenahme dieser Abschätzung bestimmen wir nun den Quadraturfehler. Der Übersicht halber verzichten wir in den Abschätzungen auf $\|\mathbf{u}\|_{l,q,\Omega}$:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} |T_\ell|^{1-1/p} (\text{diam } T_\ell)^n |\phi|_{n,p,T_\ell} \leq \sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} |T_\ell|^{1-1/p} (\text{diam } T_\ell)^n \sup_{\hat{\mathbf{x}} \in T_\ell} \frac{c}{|\hat{\mathbf{x}}|^{n-d/p}} \\ & \leq c \sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} |T_\ell|^{1-1/p} (\text{diam } T_\ell)^n (j\rho_{\min})^{d/p-n} \leq c h_{\max}^d \sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} j^{d-1} j^{d/p-n} \\ & \leq c h_{\max}^d \sum_{j=1}^{\delta/h_{\max}} j^{d/p-n+d-1} \leq c h_{\max}^d (\delta/h_{\max})^{\max(d/p+d-n,0)} \leq c h_{\max}^{\min(n-d/p,d)}. \end{aligned}$$

Für den Fall $n = d + d/p$ ist die vorletzte Ungleichung anzupassen. \square

Ist $n > d + d/p$, so erhalten wir eine Fehlerordnung von $\mathcal{O}(h_{\max}^d)$ für ein p , eingeschränkt durch die Bedingungen von Korollar 5.1.20. Um unter der Voraussetzung $n > d$ stets die Fehlerordnung $\mathcal{O}(h_{\max}^d)$ für beliebiges p zu erhalten benutzen wir sogenannte interpolatorische Ungleichungen (siehe Lemma 5.2.8).

Satz 5.2.7. Sei $\mathbf{u} \in W^{n,\infty}(\Omega)^d$ und wir betrachten eine Quadraturformel, die exakt ist für Polynome vom Grad $n-1$. Dann lässt sich der Quadraturfehler auf $\Omega = B_\delta(\mathbf{0})$ abschätzen durch

$$|E_\Omega[\phi]| \leq c h_{\max}^d \|\mathbf{u}\|_{n,\infty}$$

im Fall $n > d$ und

$$|E_\Omega[\phi]| \leq c h_{\max}^d \log(1/h_{\max}) \|\mathbf{u}\|_{n,\infty}$$

im Fall $n = d$.

Beweis. Für das Element T_0 ist vorzugehen wie in den beiden Sätzen zuvor. Wir nutzen Abschätzung (3.3.4) aus Satz 3.3.6 und summieren über alle Kreisringe und alle Elemente aus den einzelnen Kreisringen. Zur Abschätzung von $|\phi|_{n,p}$ mit $np > d$ nutzen wir Lemma 5.2.8. Betrachten wir den Fall $n > d$:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} |T_\ell|^{1-1/p} (\text{diam } T_\ell)^n |\phi|_{n,p,T_\ell} \leq h_{\max}^n \sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} |T_\ell|^{1-1/p} |\phi|_{n,\infty,T_\ell}^{1-1/p} |\phi|_{n,1,T_\ell}^{1/p} \\ & \leq h_{\max}^n \left(\sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} |\phi|_{n,1,T_\ell} \right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} |T_\ell| |\phi|_{n,\infty,T_\ell} \right)^{\frac{p-1}{p}} \\ & \leq c h_{\max}^n |\phi|_{n,1,\Omega}^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} h_{\max}^d \sup_{\mathbf{x} \in T_\ell} \frac{1}{|\mathbf{x}|^n} \right)^{\frac{p-1}{p}} \\ & \leq c h_{\max}^n |\phi|_{n,1,\Omega}^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} \sum_{\ell=1}^{m_j} h_{\max}^d (j\rho_{\min})^{-n} \right)^{\frac{p-1}{p}} \\ & \leq c h_{\max}^n |\phi|_{n,1,\Omega}^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{j=1}^{\delta/\rho_{\min}} j^{d-1-n} h_{\max}^{d-n} \right)^{\frac{p-1}{p}} \leq c h_{\max}^n |\phi|_{n,1,\Omega}^{\frac{1}{p}} \left((\delta/\rho_{\min})^{\max(0,d-n)} h_{\max}^{d-n} \right)^{\frac{p-1}{p}} \\ & \leq c h_{\max}^n \left(h_{\max}^{d-n} \right)^{1/p} \left(h_{\max}^{\min(0,n-d)} h_{\max}^{d-n} \right)^{\frac{p-1}{p}} \leq c h_{\max}^n \left(h_{\max}^{d-n} \right)^{1/p} \left(h_{\max}^{d-n} \right)^{\frac{p-1}{p}} \\ & = c h_{\max}^n h_{\max}^{d-n} = c h_{\max}^d. \end{aligned}$$

Für $n = d$ ist die dritt- und zweitletzte Zeile entsprechend anzupassen. \square

Lemma 5.2.8. *Sei Ω ein Gebiet und für eine Funktion $u \in L^r(\Omega)$ und ein $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ existieren die n -ten verallgemeinerten Ableitungen $\partial^\alpha u \in L^r(\Omega)$, wobei α ein Multiindex mit $|\alpha| = n$ sei. Dann gilt mit $\frac{s}{p} + \frac{1-s}{q} = \frac{1}{r}$ und $s \in [0, 1]$ die Ungleichung*

$$|u|_{n,r,\Omega} \leq |u|_{n,p,\Omega}^s |u|_{n,q,\Omega}^{1-s}.$$

Beweis. Der Beweis beruht auf der Aufteilung $|\partial^\alpha u| = |\partial^\alpha u|^{rs} |\partial^\alpha u|^{r(1-s)}$ und der Anwendung der HÖLDER-Ungleichung. Es ist

$$|u|_{n,r} = \left(\sum_{|\alpha|=n} \int_{\Omega} |\partial^\alpha u|^{rs} |\partial^\alpha u|^{r(1-s)} dx \right)^{1/r}.$$

Nach Anwenden der HÖLDER-Ungleichung zuerst auf das Integral und dann auf die Summe erhalten wir

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{|\alpha|=n} \left(\int_{\Omega} |\partial^{\alpha} u|^p dx \right)^{rs/p} \left(\int_{\Omega} |\partial u|^q dx \right)^{r(1-s)/q} \right)^{1/r} \\ & \leq \left(\left(\sum_{|\alpha|=n} \int_{\Omega} |\partial^{\alpha} u|^p dx \right)^{rs/p} \left(\sum_{|\alpha|=n} \int_{\Omega} |\partial^{\alpha} u|^q dx \right)^{r(1-s)/q} \right)^{1/r} \\ & = |u|_{n,p,\Omega}^s |u|_{n,q,\Omega}^{1-s}. \end{aligned}$$

□

Zum Abschluss geben wir eine Fehlerabschätzung der Ordnung $\mathcal{O}(h_{\max}^d)$ unter den geringsten Voraussetzungen an das Verschiebungsfeld \mathbf{u} ohne die Betrachtung der Kreisinge.

Satz 5.2.9. *Sei $\mathbf{u} \in W^{l,q}(\Omega)^d$ mit $q(l-1) > d$ und $l > d$. Weiter betrachten wir eine Quadraturformel, die exakt ist für Polynome vom Grad $l-1$. Dann lässt sich der Quadraturfehler auf $\Omega = B_{\delta}(\mathbf{0})$ abschätzen durch*

$$|E_{\Omega}[\phi]| \leq c h_{\max}^d \|\mathbf{u}\|_{l,q,\Omega}.$$

Beweis. Nach Korollar 5.1.20 gilt die Abschätzung

$$|\phi|_{l,1,\Omega \setminus T_0} \leq c \sup_{\hat{\mathbf{x}} \in \Omega \setminus T_0} |\hat{\mathbf{x}}|^{d-l} \|\mathbf{u}\|_{l,q}.$$

Nach Satz 3.3.8 gilt dann für den Quadraturfehler

$$|E_{\Omega \setminus T_0}[\phi]| \leq c h_{\max}^l |\phi|_{l,1,\Omega \setminus T_0} \leq c h_{\max}^d \|\mathbf{u}\|_{l,q}.$$

Der Fehler auf T_0 lässt sich wie zuvor beschränken. □

Bemerkung. Im Fall $\ell = d$ betrachtet man $|\phi|_{\ell,1+\varepsilon_1}$ mit $\varepsilon_1 > 0$ und erhält eine Fehlerordnung von $\mathcal{O}(h_{\max}^{d-\varepsilon_2})$ mit $\varepsilon_2 = \frac{d\varepsilon_1}{1+\varepsilon_1}$.

Bei geringeren Differenzierbarkeitsvoraussetzungen an das Verschiebungsfeld verringert sich auch die Fehlerordnung.

Satz 5.2.10. *Sei $\mathbf{u} \in W^{l,q}(\Omega)^d$ mit $lq > d$. Für festes l sei p minimal gewählt, so dass $lp > d$ gilt. Wir betrachten eine Quadraturformel, die exakt ist für Polynome vom Grad $l-1$. Dann existiert eine Abschätzung für den Quadraturfehler auf $\Omega = B_{\delta}(\mathbf{0})$ der Form*

$$|E_{\Omega}[\phi]| \leq c h_{\max}^{\min(\frac{d}{p} - \frac{d}{q} + l - 1, \frac{d}{p})} \|\mathbf{u}\|_{l,q,\Omega}.$$

Bemerkung. Die Voraussetzung an das Verschiebungsfeld \mathbf{u} kann nicht abgeschwächt werden. Zur Berechnung der Quadraturformel ist \mathbf{u} an den Stützstellen auszuwerten. Ohne die Einbettung in die stetigen Funktionen wäre eine Abänderung der Funktionswerte an den Stützstellen möglich, ohne den Integralwert zu verändern. Damit ist eine Konvergenz der Quadraturformel nicht gegeben.

Beweis von Satz 5.2.10. Nach Satz 5.1.19 gilt die Abschätzung

$$|\phi|_{l,p,\Omega \setminus T_0} \leq c \sup_{\hat{\mathbf{x}} \in \Omega \setminus T_0} |\hat{\mathbf{x}}|^{\min(\frac{d}{p} - \frac{d}{q} - 1, \frac{d}{p} - l)} \|\mathbf{u}\|_{l,q}.$$

Für den Quadraturfehler gilt dann nach Satz 3.3.8

$$|E_{\Omega \setminus T_0}[\phi]| \leq c h_{\max}^l |\phi|_{l,p,\Omega \setminus T_0} \leq c h_{\max}^{\min(\frac{d}{p} - \frac{d}{q} + l - 1, \frac{d}{p})} \|\mathbf{u}\|_{l,q}.$$

Auch auf dem Element T_0 ergibt sich dieselbe Fehlerordnung mit der Einbettung

$$W^{l,q}(\Omega)^d \hookrightarrow W^{1,r}(\Omega)^d \hookrightarrow C^{0,\lambda}(\bar{\Omega})^d,$$

wenn das optimale r und λ gewählt wird. \square

Der Quadraturfehler in der Peridynamik hängt folglich von der Dimension ab. Dies ergibt sich unter anderem aus der Problematik auf dem Element T_0 . Der Integrand ist hier unstetig. In unseren Betrachtungen in diesem Abschnitt haben wir gefordert, dass die Quadraturformeln exakt sind für Polynome gewissen Grades auf $B_\delta(\mathbf{0})$. Tatsächlich werden wir aber summierte Quadraturformeln, basierend auf z.B. Dreieck- oder Rechteckelementen im Zweidimensionalen, nutzen. Die Formeln erfüllen die Exaktheitsforderung nicht. Wir betrachten daher im nächsten Abschnitt den entstehenden Fehler am Rand des Horizontes.

5.2.1 Randapproximation des Horizontes

Im vorigen Abschnitt sind wir davon ausgegangen, dass die gewählten Quadraturformeln exakt sind für Polynome gewissen Grades auf dem Gebiet $B_\delta(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$. Dies ist allerdings bei der hier verwendeten Zerlegung nicht der Fall. Der Horizont $B_\delta(\mathbf{x})$ wird im Zweidimensionalen z.B. durch Dreieck- oder Rechteckelemente diskretisiert. Das heißt es entsteht ein Diskretisierungsfehler am Rand des Horizontes, da die Krümmung des Kreises nicht perfekt aufgelöst wird. Weiter hat die zu integrierende Kraftfunktion die Form

$$(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = c_{d,\delta} \frac{(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \otimes (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^3} (\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})), \quad \mathbf{x} \in \mathcal{V}, \hat{\mathbf{x}} \in B_\delta(\mathbf{x}).$$

Betrachten wir jetzt einen Punkt $\hat{\mathbf{x}}$ auf dem Rand von $B_\delta(\mathbf{x})$, d.h. $|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}| = \delta$. Für festes \mathbf{x} und $\hat{\mathbf{x}}$ lässt sich dann $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})$ in der euklidischen Norm abschätzen mit

$$|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})| \leq \frac{c_{d,\delta}}{\delta} |\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})|.$$

Die Konstante $c_{d,\delta}$ ist groß und somit springt $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ von einem großen Wert auf Null für $|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}| > \delta$. Die Funktion $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ ist unstetig am Rand des Horizontes. Der Fehler auf einem Randelement T (siehe Abb. 5.2.2) lässt sich nur durch $\|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,T} |T|$ abschätzen und ist somit von der Ordnung $\mathcal{O}(h_{\max}^d)$. Die Anzahl der Elemente, die auf dem Rand liegen ist von der Ordnung $\mathcal{O}(h_{\max}^{1-d})$ und damit der durch die Randapproximation entstehende Fehler von der Ordnung $\mathcal{O}(h_{\max})$, aber nicht besser.

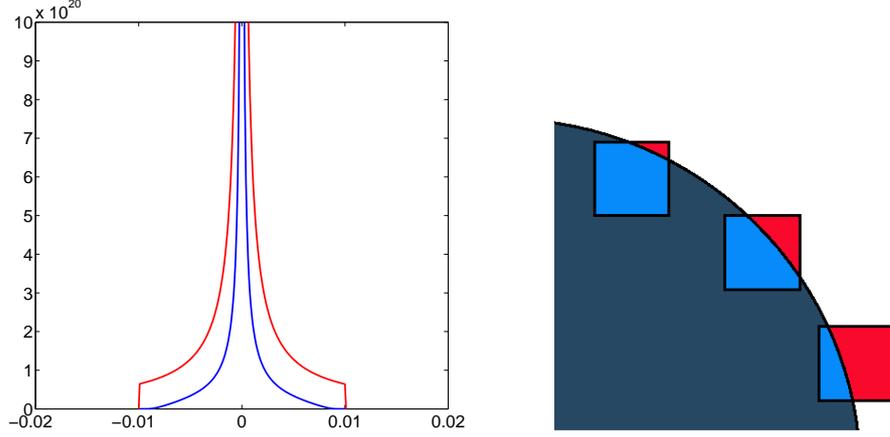


Abbildung 5.2.2: Norm des Steifigkeitstensors \mathbf{C} für $d = 2$, $E_{\text{Stahl}} = 210e9$, $\delta = 0.01$ mit **Sprung** und **regulärisiert** (links). Rechtecke auf dem Rand des Horizontes (rechts).

Um eine bessere Fehlerordnung am Rand zu erhalten multiplizieren wir die Kraftfunktion $(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)$ mit $\varphi(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = \exp(-1/(1 - |\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|^2/\delta^2))$ (siehe auch Gleichung (4.1.5) mit $\alpha = -3$). Für $|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}| = \delta$ wird die entstehende Funktion Null und zum Rand hin klingt sie auf Null ab. Betrachten wir jetzt den Fehler auf einem Randelement T

$$\begin{aligned} E_T[\varphi(\mathbf{x}, \cdot)(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)] &= \left| \int_T \varphi(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) d\hat{\mathbf{x}} - \sum_j w_j \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) \right| \\ &\leq \|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,T} \left(|T| \|\varphi(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,T} + \|\varphi(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,T} \sum_j |w_j| \right) \\ &\leq 2 h_{\max}^d \|(\mathcal{F}\mathbf{u})(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,T} \|\varphi(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,T}, \quad \mathbf{x} \in \mathcal{V}. \end{aligned}$$

Dabei nutzen wir die Eigenschaft $\sum_j |w_j| = \sum_j w_j = |T|$ einer positiven Quadraturformel. Die gewählte Exponentialfunktion wird maximal, wenn $|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}|$ minimal wird. Da wir ein Randelement betrachten gilt

$$\begin{aligned} \|\varphi(\mathbf{x}, \cdot)\|_{0,\infty,T} &= \exp(-1/(1 - (\delta - h_{\max})^2/\delta^2)) \\ &= \exp(-1/(2h_{\max}/\delta - h_{\max}^2/\delta^2)) \\ &\leq c \exp(-\delta/h_{\max}) \leq c (\delta/h_{\max})^{-p} \leq c h_{\max}^p, \quad \mathbf{x} \in \mathcal{V} \end{aligned}$$

mit einer Konstanten $c > 0$ und für beliebige natürliche Zahlen p . Dies folgt aus der Eigenschaft $\exp(z) \geq z^p/p!$ der Exponentialfunktion. Damit fällt der Fehler auf dem Rand nicht ins Gewicht und der Fehler bestimmt sich allein durch den Fehler im Inneren von $B_\delta(\mathbf{x})$. Mit Hilfe der modifizierten Kraftfunktion können wir die Fehlerabschätzungen aus dem vorherigen Abschnitt übernehmen. Im nächsten Abschnitt betrachten wir die Quadraturformelmethode mit deren Hilfe wir eine Gesamtfehlerabschätzung für das lineare Modell geben werden.

5.3 Die Quadraturformelmethode

Betrachten wir die Bewegungsgleichung (4.1.1) der Peridynamik. Außerhalb des Horizontes $B_\delta(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ interagieren zwei Teilchen \mathbf{x} und $\hat{\mathbf{x}}$ nicht mehr miteinander und die Kraftfunktion verschwindet

$$\mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}, \mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = 0, \text{ falls } \hat{\mathbf{x}} \notin B_\delta(\mathbf{x}) \cap \mathcal{V}.$$

Bei der Quadraturformelmethode diskretisieren wir das Integral durch eine geeignete Quadraturformel. Betrachten wir die Näherungen $\mathbf{u}_i(t) \approx \mathbf{u}(\mathbf{x}_i, t)$ an den Diskretisierungspunkten \mathbf{x}_i ($i = 1, 2, \dots, N$). Die diskretisierte Version der peridynamischen Gleichung liest sich dann wie folgt

$$\rho(\mathbf{x}_i) \partial_t^2 \mathbf{u}_i(t) = \sum_{j \in I(i)} \sigma_{l(j)} \mathbf{f}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, \mathbf{u}_j(t) - \mathbf{u}_i(t)). \quad (5.3.1)$$

Dabei bezeichne $I(i) \subseteq \{1, 2, \dots, N\}$ eine Indexmenge für die gilt

$$|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i| \begin{cases} \leq \delta & \text{falls } j \in I(i) \\ > \delta & \text{sonst.} \end{cases}$$

Sei weiter das Gebiet \mathcal{V} im Zweidimensionalen unterteilt in Rechtecke oder Dreiecke T_l ($l = 1, 2, \dots, M$), im Dreidimensionalen in Quader oder Tetraeder. Zu jedem Punkt \mathbf{x}_j gehört genau ein Element $T_{l(j)}$ sowie ein entsprechendes Quadraturgewicht $\sigma_{l(j)}$. Die Kraftfunktion \mathbf{f} hängt dabei im Dreidimensionalen von den Verschiebungen in x , y und z -Richtung ab. Dies sei durch die Schreibweise $\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}^{(x)}, \boldsymbol{\eta}^{(y)}, \boldsymbol{\eta}^{(z)})$ deutlich gemacht.

Wir schreiben Gleichung (5.3.1) um in ein System von Gleichungen erster Ordnung. Für $i = 1, 2, \dots, N$ sei

$$\begin{aligned} U_i(t) &= \mathbf{u}_i^{(x)}(t), \\ U_{N+i}(t) &= \partial_t \mathbf{u}_i^{(x)}(t), \\ U_{2N+i}(t) &= \mathbf{u}_i^{(y)}(t), \\ U_{3N+i}(t) &= \partial_t \mathbf{u}_i^{(y)}(t), \\ U_{4N+i}(t) &= \mathbf{u}_i^{(z)}(t), \\ U_{5N+i}(t) &= \partial_t \mathbf{u}_i^{(z)}(t). \end{aligned}$$

Für einen beliebigen Vektor $V = (V_1, V_2, \dots, V_{6N})^T$ sei

$$\begin{aligned} F_i(V) &= V_{N+i}, \\ F_{N+i}(V) &= \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \sum_{j \in I(i)} \sigma_{l(j)} \mathbf{f}^{(x)}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, V_j - V_i, V_{2N+j} - V_{2N+i}, V_{4N+j} - V_{4N+i}), \\ F_{2N+i}(V) &= V_{3N+i}, \\ F_{3N+i}(V) &= \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \sum_{j \in I(i)} \sigma_{l(j)} \mathbf{f}^{(y)}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, V_j - V_i, V_{2N+j} - V_{2N+i}, V_{4N+j} - V_{4N+i}), \\ F_{4N+i}(V) &= V_{5N+i}, \\ F_{5N+i}(V) &= \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \sum_{j \in I(i)} \sigma_{l(j)} \mathbf{f}^{(z)}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, V_j - V_i, V_{2N+j} - V_{2N+i}, V_{4N+j} - V_{4N+i}). \end{aligned}$$

Das zu lösende Gleichungssystem gewöhnlicher Differentialgleichungen können wir nun schreiben als

$$\partial_t U(t) = F(U(t)), \quad t \in (0, T)$$

mit Anfangsdaten $U(0)$. Hier gibt man die Anfangsverschiebungen und Anfangsgeschwindigkeiten in allen Diskretisierungspunkten \mathbf{x}_i , ($i = 1, 2, \dots, N$) vor. Dieses System lässt sich dann zum Beispiel mit einem eingebetteten Runge-Kutta-Verfahren mit Schrittweitensteuerung effizient lösen.

5.4 Gesamtfehlerabschätzung für das lineare Modell

In diesem Abschnitt leiten wir eine A-priori-Fehlerabschätzung für das lineare Modell der Peridynamik her. Die räumliche Diskretisierung erfolgt dabei durch die Quadraturformelmethode. Das wesentliche Resultat dieses Abschnittes formulieren wir im folgenden Satz.

Satz 5.4.1. *Unter der Annahme hinreichender Differenzierbarkeit des Verschiebungsfeldes \mathbf{u} ist der Diskretisierungsfehler in Verschiebungen und Geschwindigkeiten von der gleichen Ordnung wie der Quadraturfehler.*

Bemerkung. Wir berücksichtigen keine Zeitdiskretisierung durch die noch ein zusätzlicher Fehler entsteht, sondern wir geben eine explizite Darstellung des Fehlers, den wir mit Hilfe des Quadraturfehlers abschätzen. Die Lösung der Fehlergleichung beruht auf dem Prinzip von DUHAMEL. Wesentlich ist somit die Linearität der Gleichung, sowie die zweimalige Differenzierbarkeit der Verschiebungen in der Zeit. Von den Differenzierbarkeitseigenschaften im Ort hängt wiederum der Quadraturfehler ab.

Beweis von Satz 5.4.1. Sei $t \in [0, T]$ dann schreiben wir

$$(\mathcal{F}\mathbf{u}(\cdot, t))(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{C}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) \quad \forall t \in [0, T],$$

mit dem Steifigkeitstensor \mathbf{C} aus Gleichung (4.1.4). Die Bewegungsgleichung der Peridynamik an den Quadraturpunkten \mathbf{x}_i ($i=1,2,\dots,N$) lässt sich somit schreiben als

$$\rho(\mathbf{x}_i)\partial_t^2\mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t) = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{C}(\mathbf{x}_i,\hat{\mathbf{x}})(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}},t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t)) d\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}(\mathbf{x}_i,t).$$

Ersetzen wir jetzt das Integral durch eine numerische Quadraturformel mit den Gewichten σ_j , berechnen wir Näherungen $\mathbf{u}_i(t)$ an $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t)$ und schreiben

$$\rho(\mathbf{x}_i)\partial_t^2\mathbf{u}_i(t) = \sum_{j=1, j\neq i}^N \sigma_j \mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)(\mathbf{u}_j(t) - \mathbf{u}_i(t)).$$

Für den Diskretisierungsfehler $\mathbf{e}_i(t) := \mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t) - \mathbf{u}_i(t)$ erhalten wir nach einer Nullergänzung mit

$$\sum_{j=1, j\neq i}^N \sigma_j \mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)(\mathbf{u}(\mathbf{x}_j,t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t))$$

die Gleichung

$$\rho(\mathbf{x}_i)\partial_t^2\mathbf{e}_i(t) = \sum_{j=1, j\neq i}^N \sigma_j \mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)[\mathbf{e}_j(t) - \mathbf{e}_i(t)] + E_{\mathcal{V}}[\mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \cdot)(\mathbf{u}(\cdot,t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t))], \quad (5.4.1)$$

wobei wir den Quadraturfehler, den wir im vorigen Abschnitt abgeschätzt hatten, beschreiben durch

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{V}}[\mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \cdot)(\mathbf{u}(\cdot,t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t))] &= \int_{\mathcal{V}} \mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \hat{\mathbf{x}})(\mathbf{u}(\hat{\mathbf{x}},t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t)) d\hat{\mathbf{x}} \\ &\quad - \sum_{j=1, j\neq i}^N \sigma_j \mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)(\mathbf{u}(\mathbf{x}_j,t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t)). \end{aligned}$$

Die summierte Quadratur berechnet Näherungen auf den einzelnen Elementen T_l mit $l = 1, 2, \dots, N$. Die Zerlegung kann dabei sowohl aus einer Rechteckzerlegung als auch aus einer Dreieckzerlegung bestehen. Beispiele für Quadraturformeln können in Kapitel 1 nachgelesen werden.

Betrachten wir ein polygonal berandetes Gebiet \mathcal{V} , das aus der Vereinigung von Elementen T_l besteht, $\mathcal{V} = \cup_{l=1}^N T_l$, und sei das Verschiebungsfeld \mathbf{u} als glatt vorausgesetzt. Wir betrachten das mit λ_{-3} modifizierte (siehe Gleichung (4.1.5)), linearisierte Bondstretch-Modell. Mit Hilfe der Fehlerabschätzung im Falle einer Singularität aus Abschnitt 5.2 ist der Quadraturfehler von der Ordnung $\mathcal{O}(h_{\max}^d)$ für eine Quadratur, die diese Ordnung liefert. Der Fehler, der am Rande des Horizontes $B_{\delta}(\mathbf{x})$ entsteht, kann nach Abschnitt 5.2.1 vernachlässigt werden. Somit erhalten wir unter der Voraussetzung genügender Glattheit von \mathbf{u} und genügend großem Grad der Quadraturformel

$$|E_{\mathcal{V}}[\mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \cdot)(\mathbf{u}(\cdot,t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_i,t))]| \leq ch_{\max}^d.$$

Wir geben jetzt eine Lösung für die Fehlergleichung (5.4.1) an und schätzen mit Hilfe eines Stabilitätsargumentes den Gesamtfehler ab.

Wir schreiben Gleichung (5.4.1) als System linearer Differentialgleichungen

$$\rho(\mathbf{x}_i)\partial_t^2 \mathbf{e}(t) = \mathbf{A}_N \mathbf{e}(t) + \boldsymbol{\tau}(t).$$

Hierbei sei $\mathbf{e}(t) := (\mathbf{e}_1(t), \dots, \mathbf{e}_N(t))^T \in \mathbb{R}^{dN}$ der Fehlervektor, der in jeder Komponente aus dem Fehler an den einzelnen Punkten \mathbf{x}_i besteht. Weiter haben wir den Quadraturfehler

$$\boldsymbol{\tau}_i(t) := E_{\mathcal{V}}[\mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \cdot)(\mathbf{u}(\cdot, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_i, t))], \quad i = 1, \dots, N,$$

sowie die Matrix $\mathbf{A}_N \in \mathbb{R}^{dN \times dN}$. Diese besteht aus $N \times N$ Einträgen der Größe $d \times d$. Angewendet auf einen beliebigen Vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{dN}$ sei

$$(\mathbf{A}_N \mathbf{v})_i := \sum_{j=1, j \neq i}^N \sigma_j \mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i).$$

Jeder Eintrag des Vektors bestehe aus einem Vektor der Größe \mathbb{R}^d .

Formen wir dieses System gewöhnlicher Differentialgleichungen zweiter Ordnung in ein System der Ordnung eins um, können wir mit Hilfe des Prinzips von DUHAMEL eine Lösung angeben. Sei

$$\mathbf{e}(t) := (\mathbf{e}(t), \partial_t \mathbf{e}(t))^T, \quad \mathbf{A}_N := \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -I \\ -\mathbf{A}_N & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau}(t) := (\mathbf{0}, \boldsymbol{\tau}(t)) \quad \text{und} \quad \mathbf{e}(0) = \mathbf{e}_0 = (\mathbf{0}, \mathbf{0})^T.$$

Letztere Annahme ist gerechtfertigt, da wir sowohl die Anfangsverschiebungen als auch die Anfangsgeschwindigkeiten explizit vorgeben. Die Lösung nach dem Prinzip von Duhamel (siehe z.B. EMMRICH [9] oder WALTER [28]) lautet:

$$\mathbf{e}(t) = \mathcal{L}(t)\mathbf{e}_0 + \int_0^t \mathcal{L}(t-s)\boldsymbol{\tau}(s) \, ds$$

mit

$$\mathcal{L}(t) = \exp(-t\mathbf{A}_N) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-t)^j}{j!} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -I \\ -\mathbf{A}_N & \mathbf{0} \end{bmatrix}^j.$$

Es gilt

$$\mathcal{L}(t) = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j}(\mathbf{A}_N)^j}{(2j)!} & \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j+1}(\mathbf{A}_N)^j}{(2j+1)!} \\ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j+1}(\mathbf{A}_N)^{j+1}}{(2j+1)!} & \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j}(\mathbf{A}_N)^j}{(2j)!} \end{bmatrix}$$

und somit

$$\mathbf{e}(t) = \int_0^t \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(t-s)^{2j+1}}{(2j+1)!} \left(\frac{1}{\rho(\mathbf{x}_i)} \mathbf{A}_N \right)^j \boldsymbol{\tau}(s) \, ds.$$

Mit der formalen Notation

$$\sqrt{\mathbf{A}_N}^{-1} \sinh(t\sqrt{\mathbf{A}_N}) := \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j+1} \mathbf{A}_N^j}{(2j+1)!}$$

können wir mit $\rho \equiv 1$ den Gesamtfehler als

$$\mathbf{e}(t) = \int_0^t \sqrt{\mathbf{A}_N}^{-1} \sinh((t-s)\sqrt{\mathbf{A}_N}) \boldsymbol{\tau}(s) \, ds$$

schreiben. Zur Abschätzung benutzen wir die Stabilität der numerischen Approximation:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}_N \mathbf{v}\|_{\infty} &= \max_i |(\mathbf{A}_N \mathbf{v})_i| \\ &= \max_i \left| \sum_{j=1, j \neq i}^N \sigma_j \mathbf{C}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \right| \\ &\leq \max_i \sum_{j=1, j \neq i}^N \sigma_j \frac{c_{d,\delta}}{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|} |\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i| \\ &\leq \beta \|\mathbf{v}\|_{\infty}. \end{aligned}$$

In die erste Ungleichung geht die Positivität der Gewichte ein. Die letzte Ungleichung gilt, da $\sum_{j=1, j \neq i}^N \sigma_j \frac{c_{d,\delta}}{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|}$ eine Approximation an $\int_{B_{\delta}(\mathbf{x}_i)} \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_i|} \, d\hat{\mathbf{x}}$ darstellt. Satz 5.2.3 führt zu einer Fehlerabschätzung der Ordnung $\mathcal{O}(h_{\max}^{d-1})$ außerhalb eines Elementes $T_0 \ni \mathbf{x}_i$. Das Element T_0 betrachten wir nicht und es entsteht folglich auf diesem ein Fehler $\int_{T_0} \frac{c_{d,\delta}}{|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_i|} \, d\hat{\mathbf{x}} \leq c h_{\max}^{d-1}$, falls das Element T_0 den Durchmesser h_{\max} besitzt. Die Quadraturformel konvergiert daher gegen den Wert des Integrals, und $\sum_j \sigma_j \frac{c_{d,\delta}}{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|}$ ist unabhängig von h_{\max} beschränkt. Wir erhalten

$$\sup_{\mathbf{v} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}_N \mathbf{v}\|_{\infty}}{\|\mathbf{v}\|_{\infty}} = \|\mathbf{A}_N\|_{\infty} \leq \beta$$

mit einer Konstanten β , die von der Dimension und δ , nicht aber von der Zerlegung abhängt.

Damit gilt für den Gesamtfehler

$$\begin{aligned} |\mathbf{e}(t)| &\leq \frac{c}{\sqrt{\beta}} \int_0^t \sinh((t-s)\sqrt{\beta}) |\boldsymbol{\tau}(s)| \, ds \\ &\leq \frac{c}{\sqrt{\beta}} h_{\max}^d \int_0^t \sinh((t-s)\sqrt{\beta}) \, ds \\ &= \frac{c}{\beta} h_{\max}^d (\cosh(t\sqrt{\beta}) - 1) \end{aligned}$$

und damit

$$\max_{t \in [0, T]} |\mathbf{e}(t)| \leq \frac{c}{\beta} h_{\max}^d (\cosh(T\sqrt{\beta}) - 1).$$

□

Im nächsten Kapitel stellen wir einige Testprobleme vor. Wir bestimmen die numerische Konvergenzordnung bei Vorgabe eines glatten Verschiebungsfeldes und untersuchen in einer weiteren Simulation die Reduzierung der Ordnung bei Unstetigkeiten im Verschiebungsfeld. Das letzte Beispiel zeigt einen Bruchversuch zur Demonstration des eigentlichen Anwendungsgebietes der Peridynamik.

6 Numerische Ergebnisse

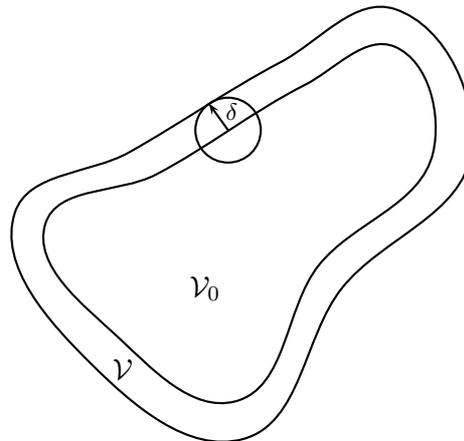
Im folgenden Kapitel stellen wir einige numerische Testprobleme vor. Dabei betrachten wir unterschiedliche Modelle für die Kraftfunktion, die sowohl mikroelastische Materialien als auch Materialien, die Brüche erleiden können beinhalten. Zur Diskretisierung des Integralterms verwenden wir verschiedene Quadraturformeln und beschränken uns auf den zweidimensionalen Fall.

6.1 Testbeispiel mit glattem Verschiebungsfeld

Wir betrachten eine rechteckige Stahlplatte mit den Abmessungen $(0, 1) \times (0, 0.3)$ in Metern, der Dichte $\rho = 8000 \text{ kgm}^{-3}$, Elastizitätsmodul $E = 210 \cdot 10^9 \text{ Nm}^{-2}$ und Querkontraktionsrate $\nu = 1/4$. Die Platte sei spannungsfrei und es wirken keine externen Kräfte, d.h. $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t) = 0$. In der Peridynamik existieren aufgrund der Abwesenheit von Ableitungstermen keine Randbedingungen. Die Anfangsverschiebung sei Null und die Anfangsgeschwindigkeit in ms^{-1} sei $\mathbf{v}_0(x, y) := (10(x - 0.5), 0)^T$. Wir vergleichen die Simulation zum Zeitpunkt $t_{\text{end}} = 10^{-3}\text{s}$.

In ihrem Bericht [48] nutzen EMMRICH, BÜSING UND KUSCHE einen selbstprogrammierten MATLAB-Code zur Durchführung der numerischen Simulationen. Für diese Diplomarbeit wurde der Code aus Geschwindigkeitsgründen in die Programmiersprache C umgeschrieben. Die Delaunay-Triangulierung für die auf Dreiecken basierenden Quadraturen wurde mit einer eingebauten Routine der MATLAB PDE Toolbox erstellt; das nach der Diskretisierung des Integralterms entstehende System von gewöhnlichen Differentialgleichungen mit der ebenso eingebauten Routine für ein explizites, eingebettetes Runge-Kutta-(4,5) Verfahren numerisch gelöst.

Neben der numerischen Lösung zur Zeit t_{end} für verschiedene Kraftansätze (siehe Abb. 6.1.2 und 6.1.3) zeigen wir den Diskretisierungsfehler für unterschiedliche Quadraturformeln (siehe Tabelle 6.1.1). Die Konvergenz der numerischen Lösung wurde dabei in Ermangelung einer analytischen Lösung auf folgende Weise bestimmt. Als erstes wurde eine Referenzlösung mit Hilfe der Mittelpunkregel auf einem äquidistanten Gitter berechnet. Die Gitterweite betrug $h = 1.94 \cdot 10^{-3}$ für $\delta = 0.05$, d.h. 2094 Quadraturpunkte in jedem vollen Horizont und 79980 Quadraturpunkten insgesamt, sowie $h = 2.73 \cdot 10^{-3}$ für $\delta = 0.1$, d.h. 4205 Quadraturpunkte in jedem vollen Horizont bei einer Gesamtzahl von 40150 Quadraturpunkten. Diese diskrete Referenzlösung wurde mit Hilfe einer bilinearen Interpolation auf die zu vergleichende Lösung interpoliert. Als Fehlermaß wurde die Maximal-Differenz der aktuellen numerischen Lösung zu der interpolierten Referenzlösung in einem inneren Gebiet mit Mindestabstand δ vom Rand gewählt. Abb. 6.1.1 zeigt diese Region \mathcal{V}_0 für ein Gebiet \mathcal{V} . Damit werden unterschiedliche Randeffekte vernachlässigt.

Abbildung 6.1.1: Die Region \mathcal{V}_0

sigt. Die Konvergenzordnung wurde durch eine Kleinste-Quadrate-Anpassung unter der Annahme abgeschätzt, dass der Fehler $\log e(h) = p \log h + \text{const}$ erfüllt.

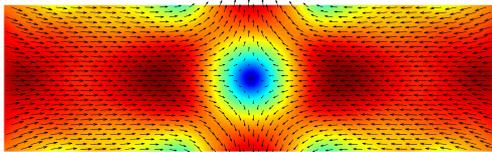


Abbildung 6.1.2: Verschiebung

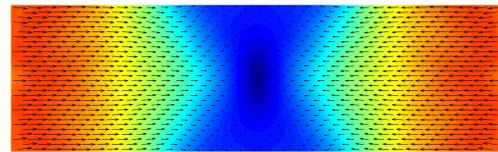


Abbildung 6.1.3: Geschwindigkeit

In Abb. 6.1.2 sieht man die euklidische Norm des Verschiebungsfeldes farblich dargestellt. Rot entspricht dabei großen Verschiebungen und blau kleinen. Die schwarzen Pfeile deuten die Richtung der Verschiebung an. Gut zu erkennen ist, dass sich die Lösung zum Zeitpunkt t_{end} in einer Kontraktion befindet. Die Platte zieht sich zusammen und wird dadurch in der Mitte natürlicherweise breiter. In einer Phase der Relaxation würde sie sich verdünnen. In Abb. 6.1.3 ist das zugehörige Geschwindigkeitsfeld gezeigt.

6.1.1 Abschätzung der Konvergenzordnung

Die folgende Tabelle 6.1.1 fasst einige Resultate der Simulationen aus [48] zusammen. Für unser Beispielproblem existiert fast kein Unterschied zwischen der Lösung des nicht-linearen Bondstretch-Modells und seiner Linearisierung.

Das Bondstretch-Modell erreicht eine Konvergenzordnung von $\mathcal{O}(h)$. Dies ist nach den Überlegungen aus Abschnitt 5.2.1 auch zu erwarten. Durch die Approximation am Rand des Horizontes ist keine höhere Ordnung möglich. Erst durch die Regularisierung mit der Exponentialfunktion wird eine Verbesserung erreicht. Für eine Beschreibung der unterschiedlichen Modelle mit $\alpha = -2$, $\alpha = 0$ und $\alpha = 1$, siehe Abschnitt 4.1.2. Die

für diese Modelle bestimmte Konvergenzordnung übertrifft in einigen Fällen sogar die, aus dem Quadraturfehler resultierende, theoretisch vorhergesagte Ordnung. Es tritt eine sogenannte Superkonvergenz ein.

Aus theoretischer Sicht sollte der Fehler in Verschiebung und Geschwindigkeiten von der gleichen Ordnung sein. Dies kann bei den vorgestellten Ergebnissen nicht beobachtet werden. Der Fehler in den Geschwindigkeiten hat eine wesentlich kleinere Ordnung als der in den Verschiebungen. Eine Ursache hierfür kann in dem verwendeten Zeitintegrator liegen, hier die in MATLAB eingebaute ode45-Routine. Für das resultierende System gewöhnlicher Differentialgleichungen wurde keine Skalierung auf eine einheitliche Größe vorgenommen. Während die Verschiebungen bei ca. 10^{-5} m liegen, haben die Geschwindigkeiten eine Größe von 1ms^{-1} . Dies kann, aufgrund der eingestellten Fehler-Toleranz, Einfluss auf die Konvergenzordnung haben. Tests mit verschiedenen Zeitintegratoren haben zusätzlich gezeigt, dass die Konvergenzordnung in den Verschiebungen und Geschwindigkeiten durchaus unterschiedlich sein kann. Das in EMU verwandte Schema zur Zeitintegration liefert eine geringere Konvergenzordnung in der Zeit für die Geschwindigkeiten als für die Verschiebungen. Dieser Fehler in der Zeit kann ebenso die Ergebnisse für den Ortsfehler beeinflussen.

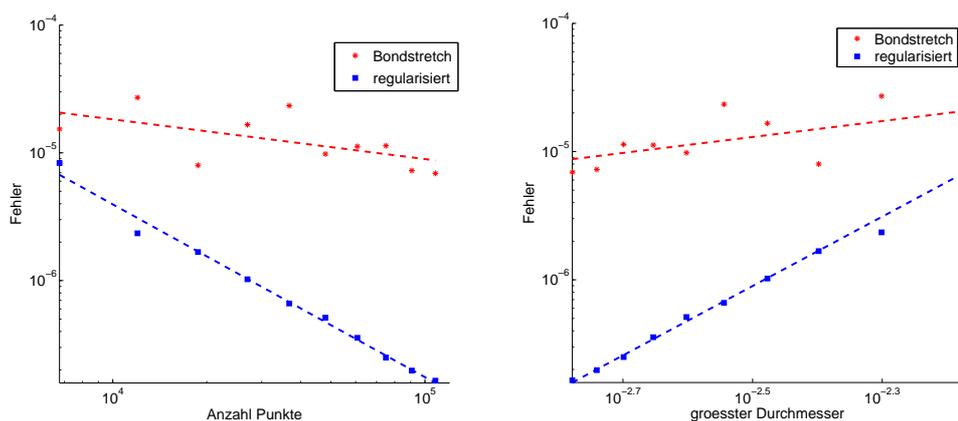


Abbildung 6.1.4: Fehler für Bondstretch und regularisierten Bondstretch

Abb. 6.1.4 zeigt den Fehler in den Verschiebungen für das Bondstretch-Modell, sowie für das regularisierte Bondstretch-Modell mit $\alpha = -3$. Der Horizont wurde mit $\delta = 0.05$ gewählt. Einmal ist der Fehler über die Anzahl Punkte abgetragen und einmal über den größten Durchmesser. Beide Achsen sind in ihrer Darstellung logarithmisch gewählt. Die Steigung der Ausgleichsgeraden gibt die Fehlerordnung an. Da hier die Mittelpunkregel mit äquidistanter Schrittweite verwandt wurde, sind beide Bilder symmetrisch zueinander. Sehr deutlich wird in beiden Bildern die geringere Schwankungsbreite des Fehlers beim regularisierten Modell. Außerdem ist die größere Konvergenzordnung des regularisierten Modells gut anhand der Steigung der Geraden zu erkennen.

Quadratur	exakt für Polynome	optimale Ordnung	Bondstretch Modell	modifiziertes Bondstretch-Modell mit			linearisiert mit $\alpha = 1$
				$\alpha = -2$	$\alpha = 0$	$\alpha = 1$	
Mittelpunkte	\mathcal{Q}^1	h^2	1.07 1.38	2.38 1.13 (h^2)	2.53 1.40 (h^2)	2.79 1.89 (h^2)	2.79 1.89 (h^2)
MP (random)	\mathcal{Q}^1	h^2	0.93 1.38	2.87 0.95 (h^2)	2.77 1.97 (h^2)	2.75 1.61 (h^2)	2.75 1.61 (h^2)
Gauß	\mathcal{Q}^3	h^4	1.10 1.47	2.31 0.65 (h^2)	3.01 1.54 (h^4)	3.74 1.97 (h^4)	3.74 1.97 (h^4)
Gauß (random)	\mathcal{Q}^3	h^4	0.72 1.08	3.28 1.79 (h^2)	2.92 1.71 (h^4)	2.91 1.45 (h^4)	2.91 1.45 (h^4)
Dreiecke vom Typ 1	\mathcal{P}^1	h^2	1.08 1.01	2.63 0.59 (h^2)	3.01 1.22 (h^2)	2.99 1.35 (h^2)	2.99 1.35 (h^2)
Dreiecke vom Typ 2	\mathcal{P}^2	h^3	0.76 0.97	1.48 0.65 (h^2)	2.37 1.59 (h^3)	3.14 1.48 (h^3)	3.14 1.48 (h^3)
Dreiecke vom Typ 3	\mathcal{P}^3	h^4	1.35 1.30	4.01 1.21 (h^2)	3.55 1.64 (h^4)	3.87 2.31 (h^4)	3.87 2.31 (h^4)
Dreiecke vom Typ 4	\mathcal{P}^2	h^3	1.54 1.39	3.53 0.93 (h^2)	3.28 1.27 (h^3)	3.98 1.77 (h^3)	3.98 1.77 (h^3)
Dreiecke vom Typ 5	\mathcal{P}^1	h^2	1.86 1.30	3.40 2.39 (h^2)	3.31 2.24 (h^2)	3.36 2.32 (h^2)	3.36 2.32 (h^2)
Dreiecke vom Typ 6	\mathcal{P}^3	h^4	0.24 0.9	1.25 0.83 (h^2)	1.84 1.75 (h^4)	2.33 2.00 (h^4)	2.33 2.00 (h^4)

Tabelle 6.1.1: Radius des Horizontes $\delta = 0.1$

Die erste Zahl in den Spalten zu den einzelnen Modelle beschreibt die bestimmte Konvergenzordnung für das Verschiebungsfeld, wohingegen die zweite Zahl die Ordnung für das Geschwindigkeitsfeld angibt. Die zu erwartende Konvergenzordnung geben wir mit $\mathcal{O}(h^p)$, wobei h den maximalen Durchmesser eines Elementes beschreibt, an. Eine theoretische Begründung für die Konvergenzordnung ist aber nur für die Linearisierung bei glattem Verschiebungsfeld gegeben.

6.2 Testbeispiel mit unstetigem Verschiebungsfeld

Nachdem wir im vorigen Abschnitt ein Beispiel mit glatten Verschiebungsfeld untersucht haben, geben wir in diesem Abschnitt ein unstetiges Verschiebungsfeld vor. Wie zuvor betrachten wir eine Stahlplatte mit den Abmessungen $(0, 1) \times (0, 0.3)$ in Metern. Die Materialeigenschaften bleiben die gleichen, allerdings hat die Platte diesmal ein Loch mit dem Zentrum bei $(0.0265, 0.0265)$, wenn das Zentrum der Platte bei $(0, 0)$ liegt. Die restlichen Abmessungen werden aus Abb. 6.2.1 ersichtlich. Die Anfangsverschiebung sei Null und die Anfangsgeschwindigkeit in ms^{-1} sei in dem schmalen Abschnitt auf der linken Seite $\mathbf{v}_\ell(x, y) = (10, 0)^T$ und auf der rechten Seite $\mathbf{v}_r(x, y) = (-10, 0)^T$.

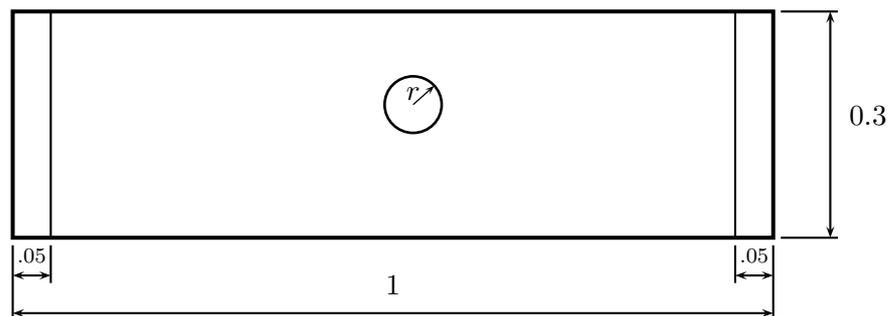


Abbildung 6.2.1: Testbeispiel mit asymmetrisch liegendem Loch, $r = 0.0375$

Im restlichen Bereich sei die Anfangsgeschwindigkeit Null. Zur Diskretisierung bietet sich die Delaunay-Triangulierung an, da mit ihr die runde Geometrie des Lochs besser als mit Rechteckzerlegungen aufgelöst werden kann. In Abb. 6.2.2 sieht man eine solche Dreieckzerlegung. Gut zu erkennen ist die feinere Auflösung um das Loch. Die zu Grunde liegende Quadraturformel ist die Dreieckregel vom Typ 4. Die Quadraturpunkte sind ebenso eingezeichnet.

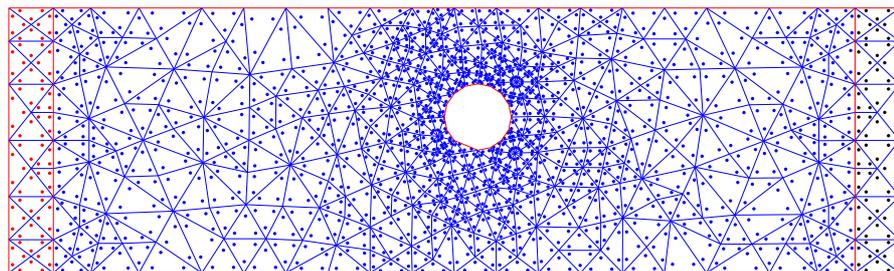


Abbildung 6.2.2: Delaunay-Triangulierung mit Dreiecken vom Typ 4

Wie zu erwarten, reduziert sich die Konvergenzordnung auf Eins. Bei einem unstetigen Verschiebungsfeld sind die Glattheitsvoraussetzungen für eine höhere Konvergenzordnung

nicht gegeben. Eine bessere Quadratur kann nur in Bereichen mit glatten Verschiebungsfeld ihre Vorteile ausspielen. In Bereichen mit unstetigem Verschiebungsfeld, wie es auch bei einem Bruch auftritt, reduziert sich die Ordnung jeder Quadraturformel. Ein verbesserter Code sollte in Abhängigkeit der Glattheit der zu integrierenden Funktion zwischen Quadraturen wechseln können. In Bereichen mit unstetigem Verschiebungsfeld wird eine einfache, und damit rechentechnisch weniger aufwändige, Quadratur niedriger Ordnung benutzt. In Bereichen mit glattem Verschiebungsfeld sollte dann zu einer Quadratur höherer Ordnung umgeschaltet werden, die eine größere Genauigkeit ermöglicht.

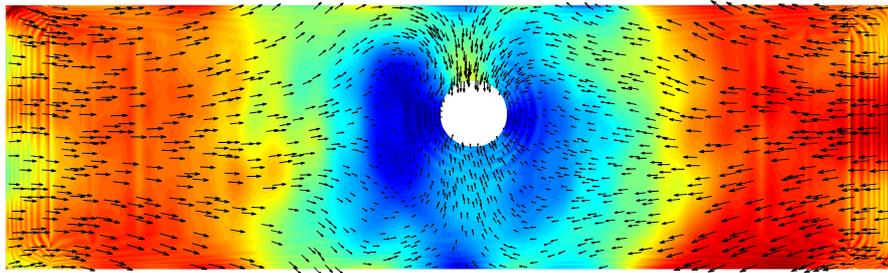


Abbildung 6.2.3: Größe der Verschiebung und Richtung

Abb. 6.2.3 zeigt die euklidische Norm der Verschiebungen. Die Richtung der Verschiebung ist wieder anhand von Pfeilen dargestellt. Die Lösung wurde mit 243000 Diskretisierungspunkten berechnet. Für die Darstellung der Richtung wurde nur ein Bruchteil dieser Punkte genutzt. Daraus resultiert ein relativ gleichmäßiges Bild an dem gut die allgemeine Richtung der Verschiebungen zu erkennen ist. Die Unstetigkeiten innerhalb des Verschiebungsfeldes sind mittels des Farbbildes abzulesen. Man achte insbesondere auf die Ränder der Platte und das Loch. Für eine genauere Darstellung des Wellenphänomens in der Umgebung des Lochs siehe Abb. 6.3.2.

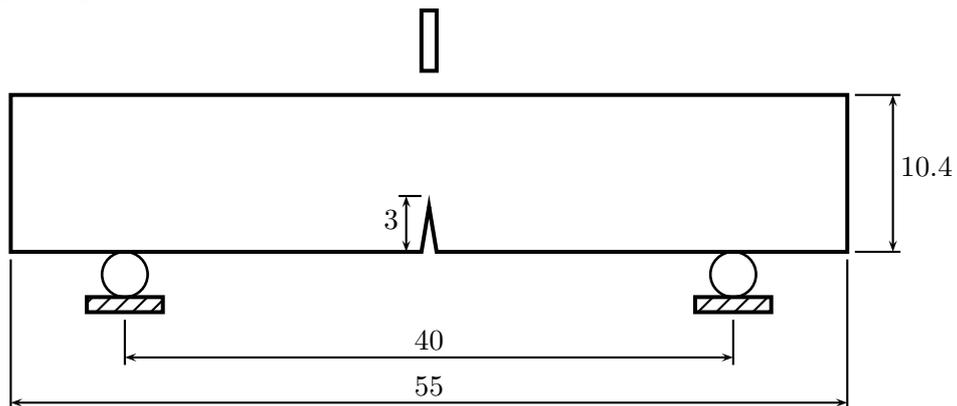


Abbildung 6.2.4: Dreipunkt-Biegetest Fall A

6.3 Testbeispiel mit Bruch

In diesem Abschnitt wollen wir numerische Untersuchungen zum Dreipunkt-Biegetest (siehe Abb. 6.2.4 und Abb. 6.3.3) betrachten. Folgende zwei Fälle haben EMMRICH, BÜSING und KUSCHE in ihrem Abschlussbericht [49] untersucht.

Im ersten Fall befindet sich der Riss direkt unter der Auflast. Im zweiten Fall hat der Riss einen Abstand von $L/6$ von der Auflast, wobei $L = 55\text{mm}$ der Breite des Prüfkörpers entspricht. Die Simulationen werden mit ca. 2000 sowie 8000 Quadraturpunkten durchgeführt. Als Quadraturen werden die Mittelpunkregel und die Gauß-Quadratur sowie Dreiecke vom Typ 4 mit einer Delaunay-Triangulierung und einer regelmäßigen Triangulierung basierend auf Rechtecken verwendet.

Der Prüfkörper besteht aus Beton mit einem Elastizitätsmodul von $243 \cdot 10^9 \text{ Nm}^{-2}$ einer Dichte von $\rho = 8000 \text{ kgm}^{-3}$ und einem Schubmodul von $G = 3 \cdot 10^4 \text{ Nm}^{-2}$. Die Abmessungen finden sich in Abb. 6.2.4 und 6.3.3 wobei von einer Dicke von 5mm auszugehen ist. Die Einschlag-Geschwindigkeit der Last in ms^{-1} beträgt $\mathbf{v}_0(x, y) = (0, -1)^T$.

In Abb. 6.3.1 sieht man die Rissausbreitung in Fall B in einem Ausschnitt. Der Schaden, d.h. der Anteil gebrochener Bonds an einem Diskretisierungspunkt, ist farblich dargestellt.

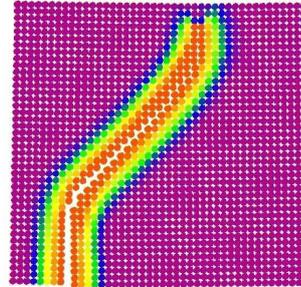


Abbildung 6.3.1: Fall B

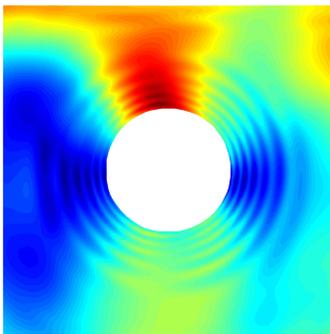


Abbildung 6.3.2: Verschiebungen um das Loch

Abb. 6.3.4 zeigt den Prüfkörper zum Zeitpunkt $t = 2 \cdot 10^{-4}\text{s}$. Die gewählte Quadraturformel ist die äquidistante Gaußquadratur mit 2268 Diskretisierungspunkten. Der Horizont beträgt $\delta = 1.5\text{mm}$. Im gezeigten Fall A befindet sich der anfängliche Riss direkt unter der Auflast und breitet sich im Laufe der Rechnung senkrecht nach oben aus. Der Rissverlauf stimmt mit dem aus Experimenten bekannten überein. Die Farbgebung gibt dieses Mal die maximale Streckung, und nicht den Schaden, der Bonds an dem jeweiligen Quadraturpunkt wieder. Zu erkennen sind die Auflagerungspunkte und der Riss an denen die Streckung groß wird.

Der Fall B ist in Abb. 6.3.5 zu sehen. Wie zuvor ist der Prüfkörper zum Zeitpunkt $t = 2 \cdot 10^{-4}\text{s}$ dargestellt und der Horizont hat einen Radius von $\delta = 1.5\text{mm}$. Die zu Grunde liegende Quadraturformel ist die Mittelpunkregel mit 9152 Diskretisierungspunkten. Der Riss befindet sich nicht direkt unter der Auflast, sondern ist um 9.167mm versetzt (siehe auch Abb. 6.3.3). Die Rissausbreitung erfolgt erst senkrecht nach oben, dreht dann aber und verläuft schräg zur Auflast hin. Gut in der Farbgebung zu erkennen sind wieder die Auflagerungspunkte und der Riss. Ebenso ist die Einschlagstelle der Auflast zu sehen. Der qualitative Rissverlauf ist so auch in Experimenten zu beobachten. Allerdings konnte der genaue Risswinkel nicht verglichen werden, da der Rissabstand zur Auflast in numerischer Rechnung und realem Experiment differieren.

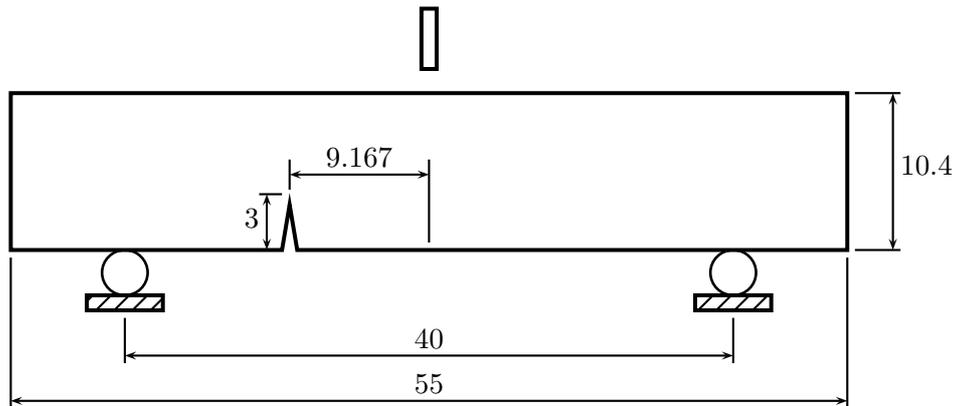


Abbildung 6.3.3: Dreipunkt-Biegetest Fall B

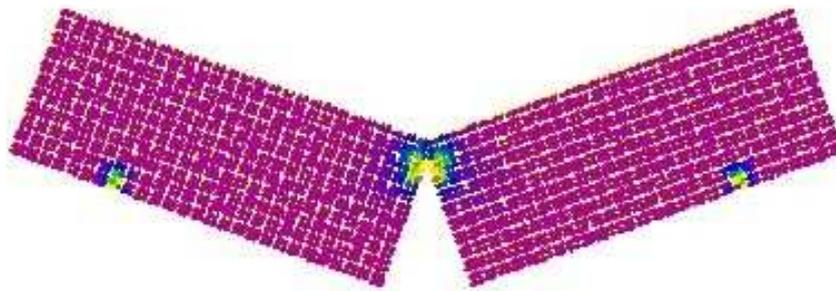


Abbildung 6.3.4: Dreipunkt-Biegetest Fall A. Maximale Streckung.

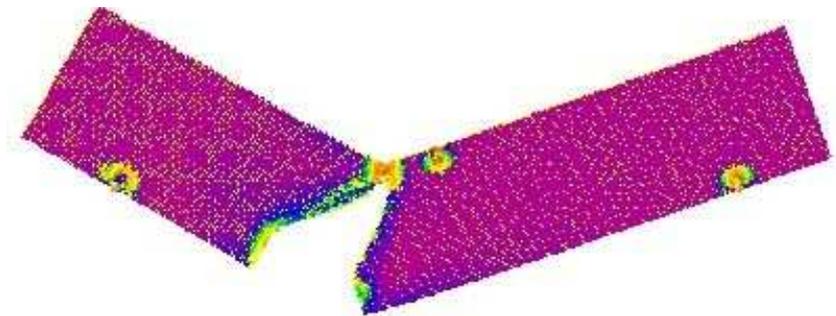


Abbildung 6.3.5: Dreipunkt-Biegetest Fall B. Maximale Streckung.

A Anhang

A.1 Bemerkungen zur Peridynamik

In diesem Abschnitt diskutieren wir einige Ansätze zur numerischen Integration der Kraftfunktion in der Peridynamik. Wir beschreiben unterschiedliche allgemeine Vorgehensweisen und gehen auf ihre Tauglichkeit im Fall der Peridynamik ein.

A.1.1 Transformation auf Polarkoordinaten

In der Peridynamik ist die Kraftfunktion über einen Kreis oder eine Kugel zu integrieren. Ein natürlicher Ansatz wäre die Transformation auf Polarkoordinaten. Dabei entsteht folgendes Problem: Führt man eine Integration über $[0, \delta] \times [0, 2\pi]$ mit einer gut angepassten Quadraturformel aus (spricht man löst einen einzelnen Horizont gut durch eine Quadratur auf), so erhält man in der näheren Umgebung viele weitere schlecht aufgelöste Horizonte. Denn durch jeden eingeführten Quadraturpunkt entsteht ein neuer Horizont um diesen Punkt, über den zu integrieren ist. Die Verschiebungen werden aber nur an bestimmten, vorher durch die Diskretisierung festgelegten, Punkten berechnet. Für eine Quadratur im aktuellen Zeitschritt über den aktuellen Horizont muss man im vorherigen Zeitschritt an allen in der Quadratur abgefragten Punkten schon die Verschiebungen berechnet haben. Dafür musste man aber über den jeweiligen Horizont integrieren. Die einzige Möglichkeit dieses Problem zu umgehen besteht darin nach jedem Zeitschritt die aktuellen Verschiebungen auf das gesamte Gebiet zu interpolieren. Somit könnte man dann mit Hilfe dieser Interpolierenden eine genau Quadratur durchführen. Der Nachteil der Interpolation besteht allerdings darin, dass man einerseits zusätzlichen Aufwand betreibt und andererseits der durch die Interpolation entstehende Fehler zu berücksichtigen ist. Ist dieser Fehler nicht von derselben Größenordnung wie der Quadraturfehler, so wäre der betriebene Aufwand umsonst.

Auf das gleiche Problem stößt man bei Nutzung einer speziellen Kubatur für den Kreis oder die Kugel. Ein Horizont kann auf diese Weise gut aufgelöst werden. Durch die Kubatur entstehen aber weitere Horizonte um jeden Kubaturpunkt, über die mit der gewählten Kubaturformel nicht mehr integriert werden kann. Dieses Problem ist nur durch eine Interpolation zu lösen.

A.1.2 Räumliche Diskretisierung

Im Gegensatz zu Finite-Elemente-Diskretisierungen ist die räumliche Diskretisierung der peridynamischen Gleichung gitterlos. Es existieren keine Basisfunktionen, die bestimmte Elemente der Diskretisierung als Träger besitzen. Nur die angewandte Kubatur bestimmt

die Diskretisierung. Insofern sind z.B. Rechtecke oder auch Dreiecke als Grundelemente möglich. Es muss nur eine entsprechende Kubaturformel auf dem Grundelement bekannt sein. Für Gebiete bestehend aus Rechtecken oder Quadern ist eine Diskretisierung beruhend auf diesen Grundelementen zu empfehlen. Betrachtet man jedoch Gebiete mit krummlinigen Rändern sollte eine Diskretisierung basierend auf Dreiecken oder Tetraedern gewählt werden. Mit Hilfe der DELAUNAY-Triangulierung ist dann eine viel bessere Auflösung der Ränder möglich.

A.1.3 Behandlung der Singularität

In diesem Abschnitt diskutieren wir einige Möglichkeiten zur Behandlung der Singularität in der Peridynamik.

Abziehen der Singularität

Eine Möglichkeit der Behandlung einer Singularität, die bei der zu integrierenden Funktion auftritt, besteht im Abziehen der Singularität. Als Beispiel betrachten wir

$$\int_0^1 \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx \doteq 1.809048475.$$

Der Integrand hat bei $x = 0$ eine schwache Singularität. Dies wird bei der numerischen Integration Probleme bereiten.

Statt der numerischen Integration des ursprünglichen Integranden könnten wir aber auch einen anderen Integranden wählen und uns die Arbeit erleichtern. Betrachten wir

$$\int_0^1 \frac{\cos(x) - 1}{\sqrt{x}} dx + 2,$$

so erhalten wir den gleichen Integralwert müssen aber nicht mehr eine (schwach) singuläre Funktion numerisch integrieren.

Dies wird sofort klar, wenn wir den veränderten Integranden betrachten. Sowohl Zähler als auch Nenner gehen für $x \rightarrow 0$ gegen 0. Anwenden der Regel von L'HÔPITAL ergibt als Grenzwert für $x \rightarrow 0$ Null für den Integranden, anstatt der vorher vorhandenen Singularität.

Lässt sich diese Methode auch in der Peridynamik verwenden? Das Problem besteht darin, dass wir das eigentliche Verhalten der Kraftfunktion, nämlich die Verschiebungen, nicht kennen. Wir kennen natürlich den singulären Charakter der Funktion. Damit könnten wir wie im Beispiel die singuläre Funktion abziehen, das Integral berechnen, und den Wert hinzu addieren. Somit ließe sich dann eine, hoffentlich einfachere, Funktion numerisch integrieren.

Leider kennen wir die Verschiebungen nicht. Somit liegt es außerhalb unserer Möglichkeiten eine nicht-singuläre Funktion herzustellen. Wir können zwar die Singularität "abziehen", werden aber im Allgemeinen keine nicht-singuläre Funktion erhalten.

Verarbeiten der Singularität in der Gewichtsfunktion

Anstatt die Singularität abzuziehen kann man auch den singulären Charakter in den Gewichten verarbeiten. Sei zum Beispiel $\Omega = (0, 1)^2$. Wir betrachten Integrale der Form

$$I[f] = \int_{\Omega} w(\mathbf{x})f(\mathbf{x})d\mathbf{x}$$

mit einer Gewichtsfunktion w , so dass wf integrierbar ist auf Ω . Gesucht ist dann eine Kubaturformel

$$Q[f] = \sum_{j=1}^N w_j f(\mathbf{x}_j).$$

In der Kubaturformel ist die Gewichtsfunktion nur noch in den Gewichten vorhanden. Ausgewertet an den Stützstellen wird nur das f .

In unserem zweidimensionalen Fall ist $w(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\mathbf{x}|}$ schwach singulär. Es ist wichtig, dass sich die Gewichtsfunktion noch über das Gebiet integrieren lässt. Anderenfalls ließen sich die Gewichte der Kubaturformel nicht bestimmen.

Eine Kubaturformel mit einer Stützstelle (in etwa eine Entsprechung der Mittelpunkregel) können wir bestimmen in dem wir folgendes Gleichungssystem lösen: Sei $\mathbf{x} = (x, y)^T$

$$\begin{aligned} w &= \int_0^1 \int_0^1 \frac{1}{|\mathbf{x}|} d\mathbf{x} \\ wx &= \int_0^1 \int_0^1 \frac{x}{|\mathbf{x}|} d\mathbf{x} \\ wy &= \int_0^1 \int_0^1 \frac{y}{|\mathbf{x}|} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Lösen wir nach x, y und w erhalten wir Stützstellen und Gewichte der neuen Kubaturformel. Hierbei ist zu beachten, dass diese nichtlinear vom Integrationsgebiet abhängen. Die Stützstellen sind z.B. nicht immer das Zentrum des Integrationsgebietes wie bei der Mittelpunkregel. Dessen ungeachtet lässt sich eine zusammengesetzte Kubaturformel mit Hilfe der grundlegenden Formel erstellen. Der Vorteil dieser neuen Regel ist, dass die Fehlerabschätzung nur noch von der Regularität der Funktion f abhängt und nicht mehr vom ganzen Integranden. Wir bezeichnen sie als Gauß-Jacobi-Formel.

Beispiel A.1.1. Sei $\Omega = (-1, 1)^2$ und wir wollen das Integral $I[f] = \int_{\Omega} \frac{\exp(x)}{|\mathbf{x}|} d\mathbf{x}$ numerisch berechnen. Der gesamte Integrand ist unstetig in $(0, 0)$, wohingegen $\exp(x) \in C^{\infty}(\bar{\Omega})$ gilt. Wir vermuten, dass die Mittelpunkregel nicht ihre volle Konvergenzordnung von $O(h^2)$ erreicht. Im Gegensatz dazu sollte die neue Kubaturformel die Fehlerordnung $O(h^2)$ voll erreichen, da sie in diesem Fall nur von der Regularität der Exponentialfunktion abhängt.

Die numerischen Tests zeigen eindeutig die Fehlerordnung $O(h^2)$ für die neue Regel und eine Fehlerordnung $O(h)$ für die Mittelpunkregel (siehe Abb. A.1.1 für eine doppelt logarithmische Darstellung des Fehlers und Tabelle A.1.1). Die Tabelle zeigt die mittels

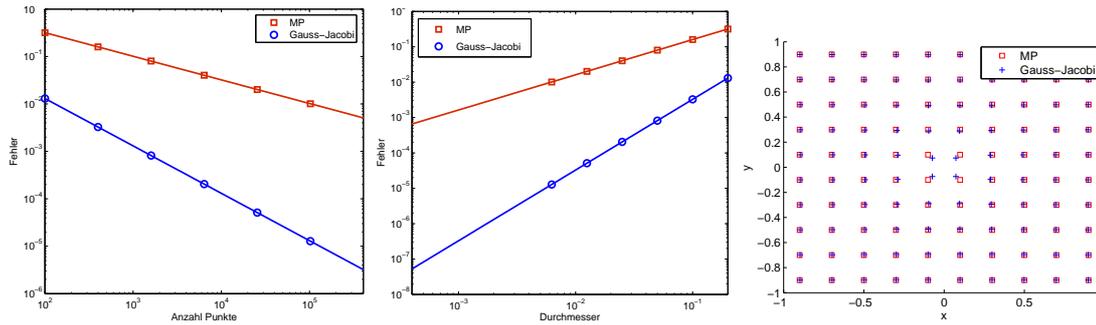


Abbildung A.1.1: Fehler über Anzahl Punkte und Durchmesser, sowie Stützstellen

der Methode der kleinsten Quadrate berechnete numerische Fehlerordnung, sowie die optimale Fehlerordnung, einmal für die Anzahl Punkte N und einmal für den Durchmesser eines Elementes h_{\max} . Bei einer Halbierung des Durchmessers vervierfacht sich die An-

Kubatur	Fehler (N)	Fehler (h_{\max})
Mittelpunktregel	$-0.498 (N^{-1/2})$	$0.995 (h_{\max})$
Gauß-Jacobi-Formel	$-0.999 (N^{-1})$	$1.998 (h_{\max}^2)$

Tabelle A.1.1: Fehlerordnung

zahl der Punkte in unserem Beispiel. In Abbildung A.1.1 werden auch die Stützstellen der Mittelpunkregel im Vergleich zu der Gauß-Jacobi-Formel gezeigt. Letztere zeigen eine Verschiebung zum Ursprung hin. \triangle

Gravierender wird der Unterschied in der Fehlerordnung, wenn wir Formeln höherer Ordnung betrachten. So wird die zusammengesetzte Gauß-Legendre-Formel bei diesem Beispiel ebenso nur eine Fehlerordnung von $O(h)$ erreichen, wohingegen die ihr entsprechende Gauß-Jacobi-Formel nach Behandlung der schwach-singulären Gewichtsfunktion die volle Fehlerordnung von $O(h^4)$ erreicht.

Problematisch bei der Anwendung in der Peridynamik ist, dass die Stützstellen für jeden Horizont angepasst werden müssen. Zwei Horizonte, die sich überschneiden, hätten im Allgemeinen keine Stützstellen gemeinsam. Dies führt zu Schwierigkeiten, da die Verschiebungen an jedem Kubaturpunkt in jedem Zeitschritt bekannt sein müssen. Dieses Problem ließe sich wie oben beschrieben nur durch Interpolation der Verschiebungsfunktion vermeiden.

Passt man die Formel hingegen so an, dass nur die Funktion $\frac{1}{|x|}$ exakt integriert wird, so sind die Stützstellen frei wählbar und könnten z.B. als Mittelpunkte gewählt werden. Es werden zwar noch um den Ursprung punktsymmetrische Funktionen bei Integration über $[-1, 1]^2$ oder $B_1(0)$ exakt integriert, aber eine allgemeine Fehlerabschätzung liefert nur eine Ordnung von $O(h)$. Wie im Beispiel schon gesehen bietet dies keine Verbesserung gegenüber der Mittelpunkregel. Es ist im Fall der Peridynamik somit nicht sinnvoll den

singulären Charakter der Kraftfunktion in Stützstellen und Gewichten zu verarbeiten.

Weglassen der Singularität

Der schwach singuläre Integrand der Peridynamik lässt sich im Zentrum des Horizontes nicht auswerten. Eine noch verbliebene Möglichkeit besteht im schlichten Weglassen der fraglichen Stelle, genauer gesagt der Integrand wird hier auf Null gesetzt. Dies entspricht der allgemeinen Vorgehensweise bei der numerischen Methode in der Peridynamik.

A.1.4 Die Formeln von Clenshaw und Curtis

In [47] stellt TREFETHEN die Frage ob die Gauß-Legendre-Quadratur besser sei als die von Clenshaw und Curtis. Mit $(N+1)$ Punkten integriert die Gauß-Quadratur Polynome vom Grad $2N+1$ exakt. Wie man zeigen kann sind Gauß-Formeln in diesem Sinne optimal, d.h. es existieren keine Formeln, die mit der gleichen Anzahl Punkte auch noch Polynome von höherem Grad exakt integrieren. Newton-Cotes Formeln mit $(N+1)$ Punkten integrieren Polynome vom Grad N exakt, leiden aber für $N \rightarrow \infty$ unter dem Phänomen negativer Gewichte. Außerdem ist die Konvergenz nicht gesichert.

Dahingegen bieten die Formeln von Clenshaw-Curtis den gleichen Genauigkeitsgrad wie die von Newton-Cotes ohne die genannten Schwierigkeiten. Für Aufgabenstellungen in denen Adaptivität wichtig ist, können außerdem schon berechnete Werte einfach weiterverwendet werden. Die Stützstellen sind explizit gegeben. Im Gegensatz dazu sind bei Gauß-Formeln nach Unterteilung eines Intervalls $[a,b]$ in zwei Teilintervalle im Allgemeinen sämtliche Stützstellen verschieden. Es müssen daher sämtliche Werte des Integranden neu berechnet werden.

Einen Ausweg bieten sogenannte Gauß-Kronrod-Schemata die durch Hinzufügen von $(N+1)$ Punkten in eine N -Punkt-Formel eine neue Formel vom Grad $3N+1$ erstellen. Einfacher ist die Möglichkeit der Adaptivität bei den Formeln von Clenshaw und Curtis möglich. TREFETHEN zeigt nun an Beispielen, dass der Faktor zwei Vorteil der Gauß-Formel selten zum Tragen kommt und, dass häufig die gleiche Genauigkeit erreicht wird. Er untermauert diese Beobachtung durch Theoreme, die dieses Verhalten erklären.

Könnten wir genau so gut Clenshaw-Curtis-Formeln statt der Gauß-Quadratur verwenden? Hierzu ist zu sagen, dass der beobachtete Effekt der gleichen Genauigkeit nur im Eindimensionalen auftritt. Für tensorielle CC-Formeln im Zweidimensionalen ist dies nicht zu beobachten. (siehe SOMMARIVA et al. [46])

A.2 Räume und Normen

Räume stetiger und stetig differenzierbarer Funktionen

Definition A.2.1. Sei $\Omega \subsetneq \mathbb{R}^d$ beschränkt und offen. Dann ist der Raum $C(\overline{\Omega})$ definiert als

$$C(\overline{\Omega}) := \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : u \text{ ist stetig auf } \Omega \text{ und stetig fortsetzbar auf } \overline{\Omega}\}.$$

Durch

$$\|u\|_{C(\overline{\Omega})} := \|u\|_{\infty} := \max_{x \in \overline{\Omega}} |u(x)|$$

ist auf $C(\overline{\Omega})$ eine Norm definiert, mit der $C(\overline{\Omega})$ zum BANACH-Raum wird.

Ebenso definieren wir Räume stetig differenzierbarer Funktionen.

Definition A.2.2. Sei $\Omega \subsetneq \mathbb{R}^d$ beschränkt und offen und sei $k \in \mathbb{N}$. Dann ist der Raum $C^k(\overline{\Omega})$ definiert als

$$C^k(\overline{\Omega}) := \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : \partial^{\alpha} u \in C(\overline{\Omega}) \text{ für alle } \alpha \text{ mit } |\alpha| \leq k\}.$$

Auf $C^k(\overline{\Omega})$ definieren wir durch

$$\|u\|_{C^k(\overline{\Omega})} := \|u\|_{k,\infty} := \sum_{|\alpha| \leq k} \|\partial^{\alpha} u\|_{\infty}$$

eine Norm mit der $C^k(\overline{\Omega})$ ein BANACH-Raum ist. Eine äquivalente Norm ist durch

$$\|u\|_{k,\infty} := \max_{|\alpha| \leq k} \|\partial^{\alpha} u\|_{\infty}$$

gegeben.

Räume Hölder-stetiger Funktionen

Definition A.2.3. Sei $\Omega \subsetneq \mathbb{R}^d$ beschränkt und offen, weiter seien $k \in \mathbb{N}$ und $\lambda \in (0, 1]$. Dann ist der Raum $C^{k,\lambda}(\overline{\Omega})$ definiert als der Unterraum von $C^k(\overline{\Omega})$, der aus den Funktionen u besteht, die für $0 \leq \alpha \leq k$ auf Ω die folgende Bedingung erfüllen. Es existiere eine Konstante $c > 0$, so dass

$$|\partial^{\alpha} u(x) - \partial^{\alpha} u(y)| \leq c |x - y|^{\lambda}, \quad x, y \in \Omega.$$

Auf dem Raum $C^{k,\lambda}(\overline{\Omega})$ wird durch

$$\|u\|_{C^{k,\lambda}(\overline{\Omega})} := \|u\|_{C^k(\overline{\Omega})} + \sum_{|\alpha| \leq k} \sup_{\substack{x,y \in \Omega \\ x \neq y}} \frac{|\partial^{\alpha} u(x) - \partial^{\alpha} u(y)|}{|x - y|^{\lambda}}$$

eine Norm definiert mit der $C^{k,\lambda}(\overline{\Omega})$ ein BANACH-Raum ist.

Bemerkung. Der Raum $C^{0,1}(\overline{\Omega})$ ist der Raum der LIPSCHITZ-stetigen Funktionen.

Die Lebesgue-Räume L^p

Zur späteren Definition der SOBOLEW-Räume verwenden wir die L^p -Räume, benannt nach Henri Léon LEBESGUE.

Sei $\Omega \subsetneq \mathbb{R}^d$ beschränkt und offen. Dann bezeichnen wir mit $L^p(\Omega)$ ($1 \leq p \leq \infty$) den Raum der LEBESGUE-messbaren Funktionen, deren Betrag in p -ter Potenz auf Ω LEBESGUE-integrierbar ist. Mit der Norm

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} := \|u\|_{0,p,\Omega} := \begin{cases} \left(\int_{\Omega} |u(x)|^p dx \right)^{1/p} & \text{für } 1 \leq p < \infty, \\ \text{ess sup}_{x \in \Omega} |u(x)| & \text{für } p = \infty \end{cases}$$

ist $L^p(\Omega)$ ein BANACH-Raum.

Sobolew-Räume

Definition A.2.4. Sei $\Omega \subsetneq \mathbb{R}^d$ ein Lipschitz-Gebiet, $k \in \mathbb{N}$ und $1 \leq p \leq \infty$. Dann ist der SOBOLEW-Raum $W^{k,p}(\Omega)$ definiert als

$$W^{k,p}(\Omega) := \{u \in L^p(\Omega) : \forall \alpha \text{ mit } |\alpha| \leq k \exists \partial^\alpha u \in L^p(\Omega)\}.$$

Die zugehörige Norm ist definiert als

$$\|u\|_{W^{k,p}(\Omega)} := \|u\|_{k,p,\Omega} := \begin{cases} \left(\sum_{|\alpha| \leq k} \|\partial^\alpha u\|_{0,p,\Omega}^p \right)^{1/p} & \text{für } 1 \leq p < \infty, \\ \max_{|\alpha| \leq k} \|\partial^\alpha u\|_{0,\infty,\Omega} & \text{für } p = \infty. \end{cases}$$

Weiter definieren wir mit

$$|u|_{W^{k,p}(\Omega)} := |u|_{k,p,\Omega} := \begin{cases} \left(\sum_{|\alpha|=k} \|\partial^\alpha u\|_{0,p,\Omega}^p \right)^{1/p} & \text{für } 1 \leq p < \infty, \\ \max_{|\alpha|=k} \|\partial^\alpha u\|_{0,\infty,\Omega} & \text{für } p = \infty \end{cases}$$

eine Halbnorm auf $W^{k,p}(\Omega)$. Ist das betrachtete Gebiet aus dem Zusammenhang ersichtlich so schreiben wir kurz $\|\cdot\|_{k,p}$ statt $\|\cdot\|_{k,p,\Omega}$ und $|\cdot|_{k,p}$ für $|\cdot|_{k,p,\Omega}$.

Definition A.2.5. Seien α und β zwei Multiindizes aus \mathbb{N}^d . Wir sagen $\beta \leq \alpha$, wenn $\beta_j \leq \alpha_j$ für alle $j = 1, \dots, d$ gilt. Weiter definieren wir $\alpha! := \alpha_1! \cdot \dots \cdot \alpha_d!$. Für $\beta \leq \alpha$ ist $\alpha - \beta$ ebenso ein Multiindex. Außerdem gilt dann $|\alpha - \beta| + |\beta| = |\alpha|$. Für den Binomialkoeffizienten gilt

$$\binom{\alpha}{\beta} = \frac{\alpha!}{\beta!(\alpha - \beta)!} = \binom{\alpha_1}{\beta_1} \cdot \dots \cdot \binom{\alpha_d}{\beta_d}.$$

Lemma A.2.6. Für Multiindizes β und α mit $\beta \leq \alpha$ und Funktionen u und v , die $|\alpha|$ -mal stetig differenzierbar in einer Umgebung von x sind, gilt die LEIBNIZ-Formel:

$$\partial^\alpha (uv)(x) = \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \partial^\beta u(x) \partial^{\alpha - \beta} v(x).$$

B Interpolatorische Quadratur

Interpolatorische Quadraturformeln zur Approximation eines Integrals $I[f]$ erhält man, indem man die Funktion $f \in C[a, b]$ durch ein Interpolationspolynom ersetzt und dieses integriert. Wir betrachten kurz die Polynominterpolation im Eindimensionalen und konstruieren im Anschluss beispielhaft für eine Dreieckregel sowie eine Rechteckregel das zugehörige Interpolationspolynom. Integration dieser Polynome liefert dann die uns schon bekannten Kubaturformeln.

B.1 Polynominterpolation

Gegeben seien $N + 1$ Stützstellen x_0, \dots, x_N und dazugehörige Werte y_0, \dots, y_N . Ist nun ein Polynom $p \in \mathcal{P}^N(\mathbb{R})$ mit Höchstgrad N gesucht, so dass $p(x_i) = y_i$, $i = 0, \dots, N$, so spricht man von *Polynominterpolation*.

Satz B.1.1. *Bei paarweise verschiedenen Stützstellen x_i mit $i=0, \dots, N$, ist das zugehörige Interpolationspolynom $p \in \mathcal{P}^N(\mathbb{R})$ eindeutig bestimmt.*

Mit Hilfe der LAGRANGESchen Polynome lässt sich das Interpolationspolynom einfach darstellen. Dazu bezeichnen wir mit

$$L_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^N \frac{x - x_i}{x_j - x_i}, \quad j \in \{0, \dots, N\}$$

das j -te LAGRANGE-Polynom. Es gilt $L_j \in \mathcal{P}_N$. Das Polynom

$$p_f(x) := \sum_{j=0}^N L_j(x) f(x_j)$$

interpoliert zwischen den Werten $f(x_i)$ und es gilt $p_f(x_i) = f(x_i)$. Integration des Interpolationspolynoms p_f liefert die zugehörige *interpolatorische Quadraturformel*,

$$\int_a^b p_f(x) dx = Q[f] \approx \int_a^b f(x) dx.$$

Sind die Stützstellen äquidistant gewählt, so erhält man als Quadratur die Formeln von NEWTON-COTES. An dieser Stelle ist zu sehen, dass die Wahl äquidistanter Stützstellen, sowohl bei der Polynominterpolation (RUNGE's Phänomen), als auch bei der Konstruktion von Quadraturformeln (Divergenz des NEWTON-COTES-Verfahren) zu schlechten Ergebnissen führt.

B.2 Interpolation auf Dreiecken

Alle Quadratur- und Kubaturformeln, die wir betrachten, können wir als interpolatorische Quadratur- oder Kubaturformeln auffassen. Statt direkt eine Näherung für das Integral zu suchen betrachten wir die zu integrierende Funktion f selbst. Wir suchen nun ein Polynom p_f , das f möglichst gut approximiert. Integrieren wir dieses Polynom p_f erhalten wir eine Näherung für das Integral über die Funktion f . Wir haben das Problem der Integration folglich auf das Auffinden einer guten Polynomapproximation zurückgeführt.

Durch die Wahl der Stützstellen für die Polynominterpolation gerade als die Stützstellen der Kubaturformel erhalten wir nach Integration des Interpolationspolynoms die Gewichte der ursprünglichen Kubaturformel.

Betrachten wir Dreieck 6 mit vier Punkten aus Kapitel 1.1.3 (siehe Abbildung 1.1.5). Für die Stützstellen aus [43] wurde eine neue exakte Wurzelarstellung berechnet. Es gilt $\mathbf{x}_1 = (\nu_1, \nu_2)$, $\mathbf{x}_2 = (\nu_2, \nu_1)$, $\mathbf{x}_3 = (\nu_3, \nu_4)$ und $\mathbf{x}_4 = (\nu_4, \nu_3)$ mit

$$\begin{aligned}\nu_1 &= \frac{3}{10} - \frac{1}{20}\sqrt{6} - \frac{1}{10}\sqrt{3} + \frac{1}{20}\sqrt{2} \doteq 0.075031110, \\ \nu_2 &= \frac{3}{10} - \frac{1}{20}\sqrt{6} + \frac{1}{10}\sqrt{3} - \frac{1}{20}\sqrt{2} \doteq 0.280019915, \\ \nu_3 &= \frac{3}{10} + \frac{1}{20}\sqrt{6} + \frac{1}{10}\sqrt{3} + \frac{1}{20}\sqrt{2} \doteq 0.666390246, \\ \nu_4 &= \frac{3}{10} + \frac{1}{20}\sqrt{6} - \frac{1}{10}\sqrt{3} - \frac{1}{20}\sqrt{2} \doteq 0.178558728.\end{aligned}$$

Wir wollen Polynome p_i

$$p_i(x, y) = a_i + b_i x + c_i y + d_i x^2, \quad i = 1, \dots, 4,$$

so anpassen, dass sie jeweils in einem der vier Punkte eins werden und in den anderen Null. Für die einzelnen Polynome erhalten wir nach Lösen des entsprechenden Gleichungssystems

$$\begin{aligned}a_1 &= \frac{1}{12} \left(+3 + 6\sqrt{2} + 2\sqrt{3} + 3\sqrt{6} \right) & b_1 &= \frac{1}{12} \left(-45\sqrt{2} - 20\sqrt{3} - 5\sqrt{6} \right) \\ c_1 &= \frac{1}{12} \left(-3\sqrt{2} + 4\sqrt{3} - 5\sqrt{6} \right) & d_1 &= \frac{1}{3} \left(+15\sqrt{2} + 5\sqrt{3} \right) \\ a_2 &= \frac{1}{12} \left(+3 - 6\sqrt{2} - 2\sqrt{3} + 3\sqrt{6} \right) & b_2 &= \frac{1}{12} \left(+45\sqrt{2} + 20\sqrt{3} - 5\sqrt{6} \right) \\ c_2 &= \frac{1}{12} \left(+3\sqrt{2} - 4\sqrt{3} - 5\sqrt{6} \right) & d_2 &= \frac{1}{3} \left(-15\sqrt{2} - 5\sqrt{3} \right) \\ a_3 &= \frac{1}{12} \left(+3 + 6\sqrt{2} - 2\sqrt{3} - 3\sqrt{6} \right) & b_3 &= \frac{1}{12} \left(-45\sqrt{2} + 20\sqrt{3} + 5\sqrt{6} \right) \\ c_3 &= \frac{1}{12} \left(-3\sqrt{2} - 4\sqrt{3} + 5\sqrt{6} \right) & d_3 &= \frac{1}{3} \left(+15\sqrt{2} - 5\sqrt{3} \right) \\ a_4 &= \frac{1}{12} \left(+3 - 6\sqrt{2} + 2\sqrt{3} - 3\sqrt{6} \right) & b_4 &= \frac{1}{12} \left(+45\sqrt{2} - 20\sqrt{3} + 5\sqrt{6} \right) \\ c_4 &= \frac{1}{12} \left(+3\sqrt{2} + 4\sqrt{3} + 5\sqrt{6} \right) & d_4 &= \frac{1}{3} \left(-15\sqrt{2} + 5\sqrt{3} \right).\end{aligned}$$

Das Interpolationspolynom p_f zur Funktion f können wir dann schreiben als

$$p_f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_1)p_1(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x}_2)p_2(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x}_3)p_3(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x}_4)p_4(\mathbf{x}),$$

wobei $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$ und \mathbf{x}_4 wie oben gewählt werden (siehe auch Abbildung 1.1.5). Integrieren wir nun über das Interpolationspolynom so erhalten wir die Kubaturformel (1.1.7) aus Kapitel 1.1.3. Es gilt

$$\int_0^1 \int_0^{1-x} p_f(\mathbf{x}) \, dy \, dx = Q[f].$$

Somit ist die Kubaturformel eine *interpolatorische* Kubatur.

B.3 Interpolation auf Rechtecken

Wir hatten bei der Interpolation im Eindimensionalen schon die LAGRANGE-Polynome kennengelernt. Für die Interpolation auf Rechtecken können wir ein Produkt eindimensionaler LAGRANGE-Polynome benutzen. So wie die Gauß-Legendre-Kubaturformeln im Mehrdimensionalen aus einer Produktdarstellung der eindimensionalen Quadraturformeln herrühren so existiert auch eine einfache Darstellung der mehrdimensionalen LAGRANGE-Polynome.

Definition B.3.1. Wir definieren das μ -te LAGRANGE-Polynome in der Dimension d , $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_d)$, durch

$$\mathbf{L}_\mu(\mathbf{x}) = \prod_{k=1}^d \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq \mu_k}}^N \frac{x_k - x_k^i}{x_k^{\mu_k} - x_k^i}, \quad \mu_k \in \{0, 1, \dots, N\}.$$

Dabei bezeichne der obere Index jeweils die Stützstelle und der untere Index die Dimension, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$, x_k^i ist die i -te Stützstelle im Intervall $[a_k, b_k]$.

Das zugehörige Interpolationspolynom ist definiert auf $R = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_d, b_d]$.

Beispiel B.3.2. Betrachten wir die Mittelpunkregel auf $R = [-1, 1] \times [-1, 1]$. Da nur eine Stützstelle vorhanden ist, erhalten wir ein leeres Produkt und somit $\mathbf{L}(\mathbf{x}) = 1$. Das Interpolationspolynom zur Funktion f hat die Form $p_f = f(\mathbf{x}_M)$, wobei $\mathbf{x}_M = (0, 0)$ der Mittelpunkt von R sei. Integration des Interpolationspolynoms liefert die Mittelpunkregel

$$Q[f] = |R| f(\mathbf{x}_M).$$

△

Beispiel B.3.3. Als weiteres Beispiel betrachten wir die Gauß-Legendre-Formel. Wir erhalten für die LAGRANGE-Funktionen

$$\mathbf{L}_{1,2,3,4}(\mathbf{x}) = \frac{3 \left(x \pm \frac{\sqrt{3}}{3} \right)}{2\sqrt{3}} \frac{3 \left(y \pm \frac{\sqrt{3}}{3} \right)}{2\sqrt{3}},$$

wobei $\mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_{(0,0)}$, $\mathbf{L}_2 = \mathbf{L}_{(1,0)}$, $\mathbf{L}_3 = \mathbf{L}_{(0,1)}$ und $\mathbf{L}_4 = \mathbf{L}_{(1,1)}$, und somit für das Interpolationspolynom

$$p_f(\mathbf{x}) = f(\bar{x}, \bar{x}) \frac{3(x + \bar{x})}{2\sqrt{3}} \frac{3(y + \bar{x})}{2\sqrt{3}} + f(-\bar{x}, \bar{x}) \frac{3(x - \bar{x})}{2\sqrt{3}} \frac{3(y + \bar{x})}{2\sqrt{3}} \\ + f(-\bar{x}, -\bar{x}) \frac{3(x - \bar{x})}{2\sqrt{3}} \frac{3(y - \bar{x})}{2\sqrt{3}} + f(\bar{x}, -\bar{x}) \frac{3(x + \bar{x})}{2\sqrt{3}} \frac{3(y - \bar{x})}{2\sqrt{3}},$$

mit $\bar{x} = \frac{\sqrt{3}}{3}$. Integration über das Interpolationspolynom liefert auch hier die entsprechende Quadraturformel

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 p_f(\mathbf{x}) \, dx \, dy = Q[f].$$

△

Ebenso wie in den vorangegangenen Beispielen könnte man auch bei der Quadratur mit Eckpunkten vorgehen und auch hier $Q[f]$ als interpolatorische Quadratur identifizieren.

Monographien

- [1] ADAMS, Robert A. ; FOURNIER, John J. F.: *Sobolev Spaces*. 2. Academic Press, Amsterdam, 2005
- [2] BRAESS, Dietrich: *Finite Elemente*. 3. Springer, Berlin, 2003
- [3] BRASS, Helmut: *Quadraturverfahren*. Vandenhoeck Ruprecht, Göttingen, 1977
- [4] BRENNER, Susanne C. ; SCOTT, L.R.: *The mathematical theory of finite element methods*. Springer, New York, 1994
- [5] CIARLET, Philippe G.: *The finite element method for elliptic problems*. SIAM, Philadelphia, 2002
- [6] DAVIS, Philip J. ; RABINOWITZ, Philip: *Methods of numerical integration*. Academic Press, New York, 1975
- [7] DEUFLHARD, Peter ; HOHMANN, Andreas: *Numerische Mathematik*. de Gruyter, Berlin, 1991
- [8] DRÁBEK, Pavel ; ALOIS, Kufner: *Integralgleichungen*. Teubner, Stuttgart, 1996
- [9] EMMRICH, Etienne: *Gewöhnliche und Operator-Differentialgleichungen*. Vieweg, Wiesbaden, 2004
- [10] ENGELS, Hermann: *Numerical quadrature and cubature*. Academic Press, London, 1980
- [11] ENGL, Heinz W.: *Integralgleichungen*. Springer, Wien, 1997
- [12] ERN, Alexandre ; GUERMOND, Jean-Luc: *Theory and practice of finite elements*. Springer, New York, 2004
- [13] GROSSMANN, Christian ; ROOS, Hans-Görg: *Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen*. 3. Teubner, Wiesbaden, 2004
- [14] HACKBUSCH, Wolfgang: *Integralgleichungen*. Teubner, Stuttgart, 1989
- [15] HAIRER, Ernst ; LUBICH, Christian ; WANNER, Gerhard: *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer, Berlin, 2002
- [16] HÄMMERLIN, Günther ; HOFFMANN, Karl-Heinz: *Numerische Mathematik*. 2. Springer, Berlin, 1991
- [17] KENNEDY, Hubert C.: *Peano: Life and Works of Giuseppe Peano*. Reidel, Dordrecht, 1980

- [18] KYTHE, Prem K. ; PURI, Pratap: *Computational methods for linear integral equations*. Birkhäuser, Boston, 2002
- [19] NATANSON, Isidor P.: *Constructive function theory – Interpolation and approximation quadratures*. Ungar, New York, 1965
- [20] PLATO, Robert: *Numerische Mathematik kompakt*. Vieweg, Braunschweig – Wiesbaden, 2000
- [21] QUARTERONI, Alfio ; SACCO, Riccardo ; SALERI, Fausto: *Numerical mathematics*. 2. Springer, Berlin, 2007
- [22] RAVIART, Pierre-Arnaud ; THOMAS, Jean-Marie: *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*. Masson, Paris, 1983
- [23] SARD, Arthur: *Linear Approximation*. American Math. Soc., Providence, RI, 1963
- [24] STOER, Josef: *Numerische Mathematik*. 6. Springer, Berlin, 1993
- [25] STROUD, Arthur H.: *Approximate calculation of multiple integrals*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1971
- [26] STROUD, Arthur H.: *Numerical quadrature and solution of ordinary differential equations*. Springer, New York, 1974
- [27] STROUD, Arthur H. ; SECREST, Don: *Gaussian Quadrature Formulas*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1966
- [28] WALTER, Wolfgang: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 7. Springer, Berlin, 2000
- [29] WLOKA, Josef: *Funktionalanalysis und Anwendungen*. de Gruyter, Berlin, 1971

Artikel zu numerischer Integration

- [30] BRAMBLE, J. H. ; HILBERT, S. R.: Estimation of linear functionals on sobolev spaces with application to fourier transforms and spline interpolation. In: *SIAM J. Numer. Anal.* 7 (1970), Nr. 1, S. 112–124
- [31] BRAMBLE, J. H. ; HILBERT, S. R.: Bounds for a class of linear functionals with applications to hermite interpolation. In: *Numer. Math.* 16 (1971), S. 362–369
- [32] BRASS, Helmut: Ein Gegenbeispiel zum Newton-Cotes-Verfahren. In: *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 57 (1977), S. 609
- [33] COOLS, Ronald: The approximation of low-dimensional integrals: available tools and trends. In: SYDOW, A. (Hrsg.): *Numerical Mathematics, 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics* Bd. 2, Wissenschaft & Technik Verlag, Berlin, 1997, S. 469–474

-
- [34] COOLS, Ronald: Constructing Cubature Formulae: The Science behind the Art. In: *Acta numerica* 6 (1997), S. 1–54
- [35] COOLS, Ronald: Monomial cubature rules since “Stroud”: a compilation—part 2. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 112 (1999), S. 21–27
- [36] COOLS, Ronald: Advances in multidimensional integration. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 149 (2002), S. 1–12
- [37] COOLS, Ronald: An encyclopedia of cubature formulas. In: *Journal of Complexity* 19 (2003), S. 445–453
- [38] COOLS, Ronald ; KIM, Kyung J.: A survey of known and new cubature formulas for the unit disk. In: *The Korean Journal for Computational & Applied Mathematics (Series A)* 7 (2000), Nr. 3, S. 709–717
- [39] COOLS, Ronald ; RABINOWITZ, Philip: Monomial cubature rules since “Stroud”: a compilation. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 48 (1993), Nr. 3, S. 309–326
- [40] COOLS, Ronald ; SCHMID, Hans J.: On the (non)-existence of some cubature formulas: gaps between a theory and its applications. In: *Journal of Complexity* 19 (2003), S. 403–405
- [41] COOLS, Ronald ; SLOAN, Ian H.: Minimal Cubature Formulae of Trigonometric Degree. In: *Mathematics of Computation* 65 (1996), Nr. 216, S. 1583–1600
- [42] DUPONT, Todd ; SCOTT, Ridgway: Polynomial approximation of functions in Sobolev spaces. In: *Mathematics of computation* 34 (1980), Nr. 150, S. 441–463
- [43] HILLION, Pierre: Numerical Integration on a Triangle. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 11 (1977), S. 797–815
- [44] LYNESS, J. N. ; COOLS, Ronald: A Survey of Numerical Cubature over Triangles. In: GAUTSCHI, W. (Hrsg.): *Mathematics of computation 1943-1993: A half-century of computational mathematics, Proceedings of Symposia in Applied Mathematics* Bd. 48, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1994, S. 127–150
- [45] PÓLYA, George: Über die Konvergenz von Quadraturverfahren. In: *Mathematische Zeitschrift* 37 (1933), S. 264–286
- [46] SOMMARIVA, Alvisè ; VIANELLO, Marco ; ZANOVELLO, Renato: Nontensorial Clenshaw-Curtis cubature. In: *Numerical Algorithms* 49 (2008), Nr. 1, S. 409–427
- [47] TREFETHEN, Lloyd N.: Is Gauss Quadrature Better than Clenshaw-Curtis? In: *SIAM Review (SIREV)* 50 (2008), Nr. 1, S. 67–87

Artikel zur Peridynamik

- [48] BÜSING, Henrik ; EMMRICH, Etienne ; KUSCHE, Stephan: *Numerical Methods in the Peridynamic Theory - improved quadrature*. October, 3rd 2006. – Report – unpublished
- [49] BÜSING, Henrik ; EMMRICH, Etienne ; KUSCHE, Stephan: *Numerical Methods in the Peridynamic Theory - improved quadrature*. June, 29th 2007. – Final Report – unpublished
- [50] EMMRICH, Etienne ; WECKNER, Olaf: The peridynamic equation of motion in non-local elasticity theory. In: SOARES, C. A. M. (Hrsg.): *III European Conference on Computational Mechanics. Solids, Structures and Coupled Problems in Engineering*, Springer, 2006, S. 19
- [51] EMMRICH, Etienne ; WECKNER, Olaf: Analysis and numerical approximation of an integro-differential equation modelling non-local effects in linear elasticity. In: *Mathematics and Mechanics of Solids* 12 (2007), Nr. 4, S. 363–384
- [52] EMMRICH, Etienne ; WECKNER, Olaf: On the well-posedness of the linear peridynamic model and its convergence towards the Navier equation of linear elasticity. In: *Communications in Mathematical Sciences* 5 (2007), Nr. 4, S. 851–864
- [53] EMMRICH, Etienne ; WECKNER, Olaf: The peridynamic equation and its spatial discretisation. In: *Mathematical Modelling and Analysis* 12 (2007), Nr. 1, S. 17–27
- [54] EMMRICH, Etienne ; WECKNER, Olaf: The peridynamic model in non-local elasticity theory. In: *PAMM* 6 (2007), Nr. 1, S. 155–156
- [55] GERSTLE, Walter ; SAU, Nicolas: Peridynamic modeling of concrete structures. In: LI ET AL. (Hrsg.): *Proceedings of the 5th International Conference on Fracture Mechanics and Concrete Structures* Bd. 2, Ia-FRaMCoS, 2004, S. 949–956
- [56] GERSTLE, Walter ; SAU, Nicolas ; SILLING, Stewart A.: Peridynamic modeling of plain and reinforced concrete structures. In: *SMiRT 18: 18th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology*, Beijing, 2005, S. 15
- [57] SILLING, Stewart A.: Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 48 (2000), S. 175–209
- [58] SILLING, Stewart A.: Dynamic fracture modeling with a meshfree peridynamic code. In: BATHE, K. J. (Hrsg.): *Computational Fluid and Solid Mechanics*, Elsevier, Amsterdam, 2003, S. 641–644
- [59] SILLING, Stewart A. ; ASKARI, E.: Peridynamic modeling of impact damage. In: MOODY, F. J. (Hrsg.): *Problems Involving Thermal-Hydraulics, Liquid Sloshing, and Extreme Loads on Structures* Bd. PVP-Vol. 489, American Society of Mechanical Engineers, New York, 2004, S. 197–205

- [60] SILLING, Stewart A. ; ASKARI, E.: A meshfree method based on the peridynamic model of solid mechanics. In: *Computers & Structures* 83 (2005), Nr. 17-18, S. 1526–1535
- [61] SILLING, Stewart A. ; BOBARU, Florin: Peridynamic modeling of membranes and fibers. In: *International Journal of Non-Linear Mechanics* 40 (2005), S. 395–409
- [62] SILLING, Stewart A. ; ZIMMERMANN, Markus ; ABEYARATNE, Rohan: Deformation of a peridynamic bar. In: *Journal of Elasticity* 73 (2003), S. 173–190
- [63] WECKNER, Olaf ; ABEYARATNE, Rohan: The effect of long-range forces on the dynamics of a bar. In: *Journal of the Mechanics and Physics of solids* 53 (2005), S. 705–728
- [64] WECKNER, Olaf ; EMMRICH, Etienne: Numerical simulation of the dynamics of a nonlocal inhomogeneous, infinite bar. In: *Journal of Computational and Applied Mechanics* 6 (2005), Nr. 2, S. 311–319
- [65] ZIMMERMANN, Markus: *A continuum theory with long-range forces for solids*, Massachusetts Institute of Technology, Department of Mechanical Engineering, Diss., 2005