

TA 88.

FORSCHUNG - AUSBILDUNG - WEITERBILDUNG

Bericht Nr. 113

**"PARTIKELAPPROXIMATION VON WAHRSCHEINLICHKEITS-
MAßEN MIT MINIMALEM LIPSCHITZABSTAND"**

Jan Mohring

UNIVERSITÄT KAISERSLAUTERN
Fachbereich Mathematik
Postfach 3049

D -67653 Kaiserslautern

September 1994

1 Einleitung

Betrachtet man physikalische Transportprobleme auf mikroskopischer Ebene, so führt die Modellierung in der Regel auf Varianten der *Boltzmanntransportgleichung* [Cerc], [Mark]. Gegenstand dieser Gleichungen bildet stets eine Teilchendichte, die über dem bis zu sechsdimensionalen Phasenraum erklärt ist. Eine Möglichkeit, mit solcherlei hochdimensionalen Problemen numerisch fertig zu werden, besteht in der Nutzung *deterministischer Partikelmethoden* [Neun]. Die zu findende Dichte wird darin durch geschickt verteilte Punktmassen approximiert. Von vornherein ist jedoch nicht klar, wie die Güte einer solchen Approximation zu bewerten ist. Dazu müssen wir zunächst eine Beschreibung finden, in der Dichte und Punktmassen vergleichbare Objekte sind. Z.B. lassen sich die Punktmassen als *diskretes Wahrscheinlichkeitsmaß* interpretieren und die Dichte als die eines *absolut stetigen WS-Maßes*. Die Approximationsgüte ist dann mit Hilfe einer Metrik auf den WS-Maßen bewertbar. Wann eine Punktapproximation als gut zu gelten hat, hängt natürlich von der Anwendung ab. Im Rahmen von Partikelverfahren wird von einer Punktapproximation vor allem verlangt, daß sie zur näherungsweise Berechnung von Integralen geeignet ist, die mit der ursprünglichen Dichte gewichtet sind.

Ein Abstandsbegriff, der dieser Forderung gerecht wird, ist die *beschränkte Lipschitzmetrik*. Sie gibt die maximale Abweichung an, die sich einstellt, wenn gewisse Testfunktionen bzgl. der beiden zu vergleichenden Maße integriert werden. Als Testfunktionen dienen dabei alle absolut durch 1 beschränkten Kontraktionen.

Bisher allerdings galt der beschränkte Lipschitzabstand als nicht berechenbar und wurde folglich nicht zur Bewertung von Punktapproximationen, geschweidenn bei deren Erzeugung, eingesetzt. Tatsächlich aber kann zwischen *WS-Maßen mit existierenden ersten Momenten* und *gleichgewichteten diskreten WS-Maßen* ein eng verwandter Abstand bestimmt werden, und zwar als Lösung eines endlichdimensionalen Optimierungsproblems. Um die Berechnung dieses Abstandes — der Lipschitzmetrik — und die Charakterisierung von in ihrem Sinne optimalen Punktapproximationen soll es in diesem Bericht gehen.

Abschließend findet ein Vergleich mit Punktapproximationen statt, die im Sinne einer minimalen *Diskrepanz* optimal sind. Es stellt sich heraus, daß die bzgl. der Lipschitzmetrik erreichbare Approximationsordnung i.a. schlechter ist und insbesondere von der Dimension abhängt. Ursachen und Konsequenzen werden aufgezeigt.

2 Maßtheoretische Grundlagen

Wir begeben uns nun in das Gebiet, in dem Punktmassen und Dichten vergleichbare Objekte sind — die Maßtheorie. Die im folgenden aufgeführten Begriffe und Ergebnisse finden sich, wenn nicht anders angegeben, in [Neun].

Definition 2.1 (*Wahrscheinlichkeitsmaße*)

$\mathcal{M}_1 = \mathcal{M}_1(\mathbb{R}^d)$ bezeichne die Menge der *Wahrscheinlichkeitsmaße* auf dem \mathbb{R}^d , d.h. aller auf $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$, der σ -Algebra der Borelschen Mengen des \mathbb{R}^d , definierten normierten Maße.

Vor allem interessieren uns WS-Maße, die eine Dichte besitzen, die wir also mit einer (schwachen) Lösung der ursprünglichen Boltzmann-Gleichung identifizieren können.

Definition 2.2 (*absolut stetige Wahrscheinlichkeitsmaße*)

Sei λ das Borel-Lebesguesche Maß auf dem \mathbb{R}^d . Dann heißt:

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{ac} &= \mathcal{M}_{ac}(\mathbb{R}^d) \\ &:= \left\{ \mu \in \mathcal{M}_1 \mid \exists \text{Dichtef} \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d) \quad \forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) : \mu(A) = \int_A f d\lambda \right\}\end{aligned}$$

Menge der *absolut stetigen WS-Maße* des \mathbb{R}^d .

Der folgende Satz charakterisiert absolut stetige WS-Maße:

Satz 2.1 (*Radon-Nikodym*)

Folgende Aussagen sind äquivalent:

1. $\mu \in \mathcal{M}_{ac}$
2. $\forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) : \lambda(A) = 0 \implies \mu(A) = 0$
3. $\forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0 : \lambda(A) \leq \delta \implies \mu(A) \leq \varepsilon$

Auch die Partikelmengen wollen wir mit WS-Maßen identifizieren. Dazu definieren wir:

Definition 2.3 (*diskretes WS-Maß*)

Sei

$$\delta_x : \begin{cases} \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \longrightarrow \{0, 1\} \\ A \longrightarrow \begin{cases} 1 & x \in A \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \end{cases}$$

das *Dirac-Maß* zu $x \in \mathbb{R}^d$. Dann heißen:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_N &:= \left\{ \nu \in \mathcal{M}_1 \mid \exists \text{Meßpunkte } \{x^1, \dots, x^N\} \subseteq \mathbb{R}^d, \right. \\ &\quad \left. \text{Gewichte } \{\alpha_1, \dots, \alpha_N\} \subseteq \mathbb{R}^+ \text{ mit } \sum_{i=1}^N \alpha_i = 1, \text{ so daß } \nu = \sum_{i=1}^N \alpha_i \delta_{x_i} \right\}\end{aligned}$$

Menge der *diskreten WS-Maße mit N Meßpunkten* und

$$\mathcal{D}_N^g := \left\{ \nu \in \mathcal{M}_1 \mid \exists \text{Meßpunkte } \{x^1, \dots, x^N\}, \text{ so daß } \nu = \nu_{\{x^i\}} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{x^i} \right\}$$

Menge der *gleichgewichteten diskreten WS-Maße mit N Meßpunkten*.

Die diskreten Maße sollen absolut stetige Maße in dem Sinne approximieren, daß sie gute Quadraturformeln darstellen. Der folgende Konvergenzbegriff ist hierzu geeignet:

Definition 2.4 (schwache Konvergenz)

Sei $C^b(\mathbb{R}^d)$ der Raum der beschränkten stetigen Funktionen auf \mathbb{R}^d . Dann sagen wir:

Eine Folge $\{\mu_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subseteq \mathcal{M}_1$ konvergiert schwach gegen $\mu \in \mathcal{M}_1$

$$:\Leftrightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} g d\mu_n = \int_{\mathbb{R}^d} g d\mu \quad \forall g \in C^b(\mathbb{R}^d).$$

Wir schreiben dafür $\mu_n \rightarrow \mu$ oder $\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n = \mu$.

Tatsächlich reichen gewisse Teilmengen von $C^b(\mathbb{R}^d)$ als Testfunktionenmengen aus, um die schwache Konvergenz zu prüfen:

Definition 2.5 (konvergenzbestimmende Funktionenklasse)

$U \subseteq C^b(\mathbb{R}^d)$ heißt *konvergenzbestimmend*

$$:\Leftrightarrow \forall \mu_n, \mu \in \mathcal{M}_1 : \quad \mu_n \rightarrow \mu \Leftrightarrow \sup_{g \in U} \left| \int g d\mu_n - \int g d\mu \right| \rightarrow 0$$

Die Menge der Einheitskontraktionen ist z.B. konvergenzbestimmend:

Definition 2.6 (Funktionenklassen)

- Sei $L > 0$. Dann heißt

$$Lip_L = Lip_L(\mathbb{R}^d, \|\cdot\|) := \{g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \mid \forall x, y \in \mathbb{R}^d : |g(x) - g(y)| \leq L\|x - y\|\}$$

Menge der bzgl. $\|\cdot\|$ Lipschitz-stetigen Funktionen mit Lipschitz-Konstante L .

- $Lip_1 = Lip_1(\mathbb{R}^d, \|\cdot\|)$ heißt Menge der Kontraktionen auf \mathbb{R}^d

- $\mathcal{U} := Lip_1 \cap \{g : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]\}$ heißt Menge der Einheitskontraktionen

Mit Hilfe der Einheitskontraktionen können wir auf \mathcal{M}_1 eine Metrik einführen, die die schwache Konvergenz induziert.

Definition 2.7 (beschränkte Lipschitzmetrik)

$$\rho : \begin{cases} \mathcal{M}_1 \times \mathcal{M}_1 \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \\ (\mu, \nu) \mapsto \sup_{g \in \mathcal{U}} \left| \int_{\mathbb{R}^d} g d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} g d\nu \right| \end{cases} \quad (1)$$

heißt *beschränkte Lipschitzmetrik* auf \mathcal{M}_1

Satz 2.2 (Kellerer)

ρ ist eine Metrik auf \mathcal{M}_1 und induziert die schwache Konvergenz:

$$\forall \mu_n, \mu \in \mathcal{M}_1 : \quad \mu_n \rightarrow \mu \Leftrightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \rho(\mu_n, \mu) = 0$$

Bemerkung:

Insbesondere ist der Grenzwert einer schwach konvergenten Folge $(\mu_n)_{n \in \mathbb{N}} \subseteq \mathcal{M}_1$ also eindeutig bestimmt.

Nun können wir endlich eine Aussage darüber machen, ob und in welchem Sinne sich WS-Maße durch diskrete WS-Maße approximieren lassen:

Satz 2.3 (Approximation durch diskrete WS-Maße)

Die diskreten und sogar die gleichgewichteten diskreten WS-Maße liegen bzgl. ρ dicht in \mathcal{M}_1 :
 $\forall \mu \in \mathcal{M}_1 \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists N_1, N_2 \in \mathbb{N}, \nu_1 \in \mathcal{D}_{N_1}, \nu_2 \in \mathcal{D}_{N_2}^q : \quad \rho(\nu_1, \mu) \leq \varepsilon, \quad \rho(\nu_2, \mu) \leq \varepsilon$

Bei der Lösung der Boltzmann-Gleichung sind die behandelten Gebiete in der Regel beschränkt und es gibt lokale mittlere Driftgeschwindigkeiten. Damit existieren für die betrachteten Maße die ersten Momente. Zwischen WS-Maßen mit ersten Momenten kann ein der beschränkten Lipschitzmetrik eng verwandter Abstand erklärt werden, der sich jedoch explizit berechnen läßt — die Lipschitzmetrik. Als Testfunktionen treten hier alle Kontraktionen auf, also insbesondere unbeschränkte.

Definition 2.8 (WS-Maße mit ersten Momenten)

$$\mathcal{M}_1^1 = \mathcal{M}_1^1(\mathbb{R}^d) := \{ \mu \in \mathcal{M}_1 \mid \int_{\mathbb{R}^d} \|x\| d\mu < \infty \}$$

heißt Menge der WS-Maße mit existierenden ersten Momenten.

Definition 2.9 (absolut stetiges WS-Maß mit ersten Momenten)

$$\mathcal{M}_{ac}^1 := \mathcal{M}_1^1 \cap \mathcal{M}_{ac}$$

heißt Menge der absolut stetigen WS-Maße mit existierenden ersten Momenten

Definition 2.10 (Lipschitzmetrik)

$$d_L \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{M}_1^1 \times \mathcal{M}_1^1 \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \\ (\mu, \nu) \mapsto \sup_{u \in Lip_1} \left| \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu \right| \end{array} \right. \text{ heißt Lipschitzmetrik auf } \mathcal{M}_1^1$$

Bemerkung:

- d_L wäre für beliebige Wahrscheinlichkeitsmaße nicht notwendig wohldefiniert. Für $\mu, \nu \in \mathcal{M}_1^1$ gilt aber:

$$\begin{aligned} d_L(\mu, \nu) &= \sup_{u \in Lip_1} \left| \int u d\mu - \int u d\nu \right| \\ &\leq \sup_{u \in Lip_1} \left| \int u(0) + (u(x) - u(0))(d\mu - d\nu) \right| \\ &\leq \sup_{u \in Lip_1} |u(0)| \underbrace{\left| \int d\mu - \int d\nu \right|}_{=0} + \left| \int \|x\| d\mu \right| + \left| \int \|x\| d\nu \right| \\ &< \infty \end{aligned}$$

- d_L ist Metrik:

Alleine unklar ist die positive Definitheit von d_L . Wegen $\mathcal{M}_1^1 \subseteq \mathcal{M}_1$ und $\mathcal{U} \subseteq Lip_1$ folgt sie aus der positiven Definitheit der beschränkten Lipschitzmetrik (vergl. Satz 2.2).

3 Die Grundidee

Die entscheidende Beobachtung, die die praktische Berechnung des Lipschitzabstandes und die Charakterisierung optimaler Punktapproximationen erst ermöglicht, ist folgende:

Zu gegebenem absolut stetigem Maß $\mu \in \mathcal{M}_{ac}^1$ mit existierenden ersten Momenten und diskretem Maß $\nu_{\{x^i\}} \in \mathcal{D}_N^q$ kann man unter allen kontrahierenden Abbildungen u diejenige konstruieren, für die der Integrationsfehler

$$\left| \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} \right|$$

maximal wird. Kennen wir aber dasjenige $\bar{u} = u(\mu, \{x^i\})$, das zum größten Integrationsfehler führt, dann können wir $d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}})$ explizit berechnen!

Eine diskrete Approximation $\bar{\nu}$ für μ mit minimaler Integrationsfehlerabschätzung zu finden, erfordert dann nur noch die Lösung eines endlichdimensionalen Optimierungsproblems:

Minimiere den Betrag der „Fehlerfunktion“

$$E_\mu(x^1, \dots, x^N) = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{u} d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{u}(x^i)$$

über $\mathbb{R}^{d \times N}$.

Die minimierenden $\{\bar{x}_i\}$ liefern uns $\bar{\nu} := \nu_{\{\bar{x}_i\}}$, die bezüglich d_L beste Approximation von μ durch ein N -punktiges, gleichgewichtetes diskretes WS-Maß. $E = E_\mu(\{\bar{x}_i\})$ gibt den entsprechenden Lipschitz-Abstand $d_L(\mu, \bar{\nu})$ an, also eine strikte Fehlerschranke für die Quadratur von Kontraktionen. Wir werden sehen, daß dann natürlich $L \cdot E$ die (strikte) Fehlerschranke für Funktionen aus Lip_L ist.

Die Funktionsfähigkeit des vorgeschlagenen Optimierungsverfahrens kann bisher nur garantiert werden, wenn sich die Lipschitzstetigkeit der Testfunktionen auf eine p -Norm bezieht, wobei $p \in (1, \infty)$.

4 Berechnung des Lipschitzabstandes

Zu gegebenem Maß $\mu \in \mathcal{M}_{ac}^1$ und Meßpunkten $\{x^1, \dots, x^N\} \subseteq \mathbb{R}^d$ wollen wir nun die groß angekündigte „schlimmste“ Kontraktion \bar{u} bestimmen, die $\left| \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} \right|$ maximiert.

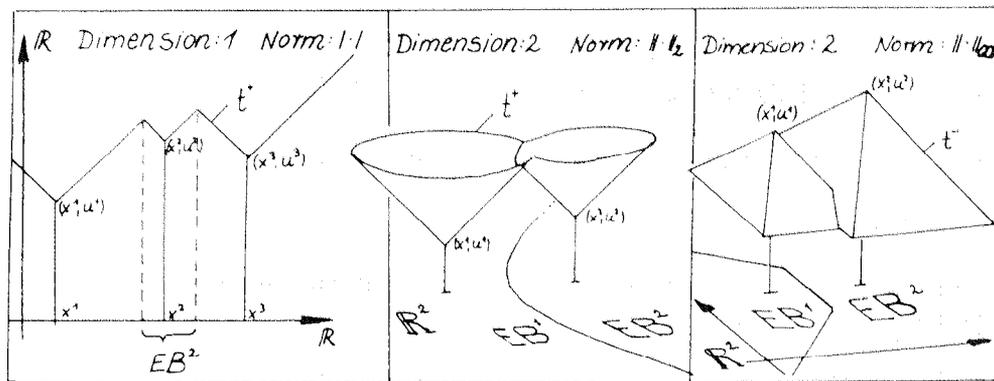
Definition 4.1 (schlimmste Kontraktion)

Seien $\mu \in \mathcal{M}_1^1$, $\{x^1, \dots, x^N\} \subseteq \mathbb{R}^d$ gegebene Meßpunkte. Dann heißt

$\bar{u} = \bar{u}(\mu, \{x^i\})$ *schlimmste Kontraktion* zu μ und $\nu_{\{x^i\}}$

$$:\Leftrightarrow \forall u \in Lip_1 : \left| \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} \right| \leq \left| \int_{\mathbb{R}^d} \bar{u} d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} \bar{u} d\nu_{\{x^i\}} \right|$$

Auf dem Wege dorthin suchen wir zunächst aus allen Kontraktionen, die in den x^i feste Stützwerte u^i annehmen, diejenige mit größtem Integrationsfehler aus.



Dazu definieren wir

Definition 4.2 (Einzugsbereich)

Seien $(x^i, u^i) \in \mathbb{R}^{d+1}$, $i \in \{1, \dots, N\}$ gegebene Stützpunkte und $\|\cdot\|$ eine Norm auf dem \mathbb{R}^{d+1} . Dann heißen die Gebiete

$$EB^i = EB_{\{(x^j, u^j)\}}^i := \{x \in \mathbb{R}^d \mid u^i + \|x - x^i\| \leq u^j + \|x - x^j\| \quad \forall j \neq i\} \quad (2)$$

Einzugsbereich von x^i und

$$\tilde{EB}^i := EB^i \setminus \bigcup_{j < i} EB^j \quad (3)$$

schnittfreier Einzugsbereich von x^i .

Definition 4.3 (Trichterfunktion)

Die Funktionen

$$t^+ = t_{\{(x^i, u^i)\}}^+ : \begin{cases} \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \{u^i + \|x - x^i\|\} \end{cases}$$

bzw.

$$t^- = t_{\{(x^i, u^i)\}}^- : \begin{cases} \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto \max_{i \in \{1, \dots, N\}} \{u^i - \|x - x^i\|\} \end{cases}$$

heißen die zu den $\{(x^i, u^i)\}$ gehörigen *positiven* bzw. *negativen Trichterfunktionen*.

Definition 4.4 (interpolierbare Stützwerte)

Die Menge von Stützwerte-Vektoren

$$I = I_{\{x^i\}} := \{(u^1, \dots, u^N) \in \mathbb{R}^N \mid \forall i, j \in \{1 \dots N\} : |u^i - u^j| \leq \|x^i - x^j\|\}$$

heißt Menge der *interpolierbaren Stützwerte*.

Damit können wir folgendes Lemma formulieren:

Lemma 4.1 („schlimmste“ Kontraktion bei gegebenen Stützstellen)

Gegeben seien

- Ein Wahrscheinlichkeitsmaß mit existierenden ersten Momenten $\mu \in \mathcal{M}_1^1$,
- N Stützpunkte $(x^i, u^i) \in \mathbb{R}^{d+1}$, $i \in \{1, \dots, N\}$
- Die Stützpunkte mögen interpolierbar sein, d.h. $(u^1, \dots, u^N) \in I_{\{x^i\}}$

Dann gilt: Die interpolierende Kontraktion, die zum größten Integrationsfehler führt, ist eine Trichterfunktion, genauer:

- (i) $t^+ = t^+_{\{(x^i, u^i)\}}$, $t^- = t^-_{\{(x^i, u^i)\}} \in Lip_1$
- (ii) $t^+(x^i) = t^-(x^i) = u^i$
- (iii) $\forall u \in Lip_1$ mit $u(x^i) = u^i, i \in \{1, \dots, N\}$

$$\begin{aligned} & \left| \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} \right| \\ & \leq \max \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} t^+ d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^+ d\nu_{\{x^i\}}, - \left(\int_{\mathbb{R}^d} t^- d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^- d\nu_{\{x^i\}} \right) \right\} \end{aligned}$$

Beweis:

- zur Wohldefiniertheit:

Wegen $\mu \in \mathcal{M}_1^1$ sind die unter (iii) auftauchenden Integrale wohldefiniert. (siehe Bemerkung S. 5)

- zu (i):

Wir zeigen nur $t^+ \in Lip_1$. $t^- \in Lip_1$ ergibt sich analog.

Seien $x, y \in \mathbb{R}^d$, $i_0, j_0 \in \{1, \dots, N\}$ mit

$$\begin{aligned} \forall i \in \{1, \dots, N\} & \quad u^{i_0} + \|x - x^{i_0}\| \leq u^i + \|x - x^i\| \\ \forall j \in \{1, \dots, N\} & \quad u^{j_0} + \|y - x^{j_0}\| \leq u^j + \|y - x^j\| \end{aligned}$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} t^+(x) - t^+(y) &= u^{i_0} + \|x - x^{i_0}\| - (u^{j_0} + \|y - x^{j_0}\|) \\ &\leq u^{j_0} + \|x - x^{j_0}\| - (u^{j_0} + \|y - x^{j_0}\|) \\ &\leq \|x - x^{j_0}\| - \|y - x^{j_0}\| \leq \|x - y\| \end{aligned}$$

analog: $-(t^+(x) - t^+(y)) \geq -\|x - y\|$

• zu (ii):

(ii) folgt direkt aus der Interpolierbarkeitsbedingung $(u^1, \dots, u^N) \in I$

• zu (iii):

Sei $u \in Lip_1$ mit $u(x^i) = u^i, i \in \{1, \dots, N\}$.

Dann gilt $\forall x \in \mathbb{R}^d, \forall i \in \{1, \dots, N\} : |u(x) - u^i| \leq \|x - x^i\|$ und wegen $\mu, \nu_{\{x^i\}} \geq 0$ also:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} &\leq \int_{\mathbb{R}^d} \min_{i \in \{1, \dots, N\}} (u^i + \|x - x^i\|) d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u^i \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} t^+ d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^+ d\nu_{\{x^i\}} \\ \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} &\geq \int_{\mathbb{R}^d} \max_{i \in \{1, \dots, N\}} (u^i - \|x - x^i\|) d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u^i \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} t^- d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^- d\nu_{\{x^i\}} \end{aligned} \tag{4}$$

q.e.d.

Nun können wir daran gehen, alleine für gegebene $\{x^i\}$ und μ die „schlimmste“ Kontraktion u zu bestimmen. Es wird sich zeigen, daß diese nur bis auf eine Konstante eindeutig bestimmt ist. Wir definieren deshalb:

Definition 4.5 (interpolierbare Stützwerte mit $u^N = 0$)

$$I^0 = I_{\{x^i\}}^0 := \left\{ (u^1, \dots, u^{N-1}) \in \mathbb{R}^{N-1} \mid \text{mit } u^N = 0 : \forall i, j \in \{1, \dots, N\} \quad |u^i - u^j| \leq \|x^i - x^j\| \right\}$$

heißt Menge der *interpolierbaren Stützwerte mit $u^N = 0$* .

Von zentraler Bedeutung ist folgende auch von den Stützwerten u^i abhängige Fehlerfunktion.

Definition 4.6 (Fehlerfunktion)

$$e : \begin{cases} \mathcal{M}_1^1 \times \mathbb{R}^{d \times N} \times I^0 & \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \\ (\mu; x^1, \dots, x^N; & \mapsto \int_{\mathbb{R}^d} \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \{u^i + \|x - x^i\|\} d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} u^i \\ u^1, \dots, u^{N-1}) & \end{cases}$$

heißt *Fehlerfunktion* zum WS-Maß μ und den Stützpunkten $\{(x^1, u^1), \dots, (x^{N-1}, u^{N-1}), (x^N, 0)\}$.

Bemerkung: Wird e in einem Rahmen betrachtet, in dem gewisse Parameter fixiert sind, dann wollen wir diese in der Parameterliste fortlassen.

Lemma 4.2 (größter Integrationsfehler)

Gegeben seien ein Wahrscheinlichkeitsmaß $\mu \in \mathcal{M}_1^1$ und Meßpunkte $x^i \in \mathbb{R}^d, i \in \{1, \dots, N\}$. Dann gilt für den größten Integrationsfehler:

$$d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) = \sup_{u \in I^0} e(\mu; x^1, \dots, x^N; u^1, \dots, u^{N-1})$$

Beweis:

$$\begin{aligned} d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) &= \sup_{u \in Lip_1} \left| \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} \right| \\ &= \sup_{(u^1, \dots, u^N) \in \mathbb{R}^N} \sup_{\substack{u \in Lip_1 \\ u(x^i) = u^i}} \left| \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} \right| \\ &= \sup_{(u^1, \dots, u^N) \in I} \sup_{\substack{u \in Lip_1 \\ u(x^i) = u^i}} \left| \int_{\mathbb{R}^d} u d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} u d\nu_{\{x^i\}} \right| \end{aligned}$$

Die Beschränkung auf $(u^1, \dots, u^N) \in I$ stellt keine Einschränkung dar, da wir nur interpolierende Kontraktionen betrachten. Für gegebene $(u^1, \dots, u^N) \in I$ können wir nach Lemma 4.1 den maximalen Integrationsfehler angeben und es folgt:

$$d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) = \sup_{(u^1, \dots, u^N) \in I} \max \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} t^+ d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^+ d\nu_{\{x^i\}}, - \left(\int_{\mathbb{R}^d} t^- d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^- d\nu_{\{x^i\}} \right) \right\}$$

Direkt aus den Definitionen von I, t^+ und t^- folgt:

- $(u^1, \dots, u^N) \in I \implies (-u^1, \dots, -u^N) \in I$ und
- $-\left(\int_{\mathbb{R}^d} t^-_{\{(x^i, u^i)\}} d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^-_{\{(x^i, u^i)\}} d\nu_{\{x^i\}} \right) = \int_{\mathbb{R}^d} t^+_{\{(x^i, -u^i)\}} d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^+_{\{(x^i, -u^i)\}} d\nu_{\{x^i\}}$

Damit erhalten wir:

$$d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) = \sup_{(u^1, \dots, u^N) \in I} \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} t^+ d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^+ d\nu_{\{x^i\}} \right\}$$

Schließlich ist mit (u^1, \dots, u^N) auch $(u^1 - u^N, \dots, u^{N-1} - u^N, 0)$ aus I und der Integrationsfehler verändert sich nicht, wenn die Stützwerte um die gemeinsame Konstante $-u^N$ verschoben werden:

$$\begin{aligned} d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) &= \sup_{(u^1, \dots, u^N) \in I} \int_{\mathbb{R}^d} t^+_{\{(x^i, u^i)\}} d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t^+_{\{(x^i, u^i)\}} d\nu_{\{x^i\}} \\ &= \sup_{(u^1, \dots, u^N) \in I} \int_{\mathbb{R}^d} \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \{u^i + \|x - x^i\|\} d\mu - \underbrace{u^N \mu(\mathbb{R}^d)}_{=1} - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u^i \right) + u^N \\ &= \sup_{(u^1, \dots, u^N) \in I} \int_{\mathbb{R}^d} \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \{u^i - u^N + \|x - x^i\|\} d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u^i - u^N) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sup_{(u^1, \dots, u^N) \in I} \int_{\mathbb{R}^d} t_{\{(x^i, u^i - u^N)\}}^+ d\mu - \int_{\mathbb{R}^d} t_{\{(x^i, u^i - u^N)\}}^+ d\nu_{\{x^i\}} \\
&= \sup_{(u^1, \dots, u^{N-1}) \in I^0} e(\mu; x^1, \dots, x^N; u^1, \dots, u^{N-1})
\end{aligned}$$

q.e.d.

Nach diesen Vorüberlegungen können wir nun endlich diejenigen Kontraktionen angeben, die für gegebenes Maß und gegebene Meßpunkte zum größten Integrationsfehler führen. Dadurch wird es uns möglich, den Lipschitzabstand zwischen μ und $\nu_{\{x^i\}}$ zu berechnen. Bei der Bestimmung der schlimmsten Kontraktion werden wir explizit die absolute Stetigkeit von μ und die Eigenschaften der p -Normen für $p \in (1, \infty)$ ausnutzen.

Satz 4.1 (Berechnung von $d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}})$)

Gegeben seien

- ein absolut stetiges Wahrscheinlichkeitsmaß mit existierenden 1. Momenten $\mu \in \mathcal{M}_{ac}^1$
- N Meßpunkte $x^i \in \mathbb{R}^d$, $i \in \{1, \dots, N\}$, $d > 1$
- Die in der Fehlerfunktion auftretende Norm sei eine p -Norm, $p \in (1, \infty)$

Dann gilt für Ort und Wert des absoluten Maximums der Fehlerfunktion e über der Menge I^0 der interpolierbaren Stützwerte mit $u^N = 0$:

(i) I^0 ist kompakt, konvex und enthält die 0.

(ii) e ist eine über I^0 konkave und stetig differenzierbare Funktion mit

$$\frac{\partial e}{\partial u^i} = \mu(EB^i) - \frac{1}{N} \quad i \in \{1, \dots, N-1\}$$

(iii) Es gibt mindestens ein $\bar{u} \in I^0$ mit $\nabla e(\bar{u}) = 0$. Für ein jedes solches \bar{u} nimmt e sein absolutes Maximum über I^0 an.

(iv) Alle zu \bar{u} gehörenden Einzugsbereiche tragen dieselbe Masse:

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} : \mu(EB_{\{(x^i, \bar{u}^i)\}}^i) = \frac{1}{N}.$$

(v) $d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) = e(\mu; \{x^i\}; \bar{u}) = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{t}^+ d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \bar{u}^i$ mit schlimmster Kontraktion

$$\bar{t}^+ = \min_{\substack{i \in \{1, \dots, N\} \\ u^N = 0}} \{\bar{u}^i + \|x - x^i\|\}$$

Bemerkung:

- Die Bestimmung von \bar{u} ist offenbar gut für die Anwendung dem Gradientenverfahren verwandter Optimierungsalgorithmen geeignet, wobei als Startpunkt 0 gewählt werden kann.
- \bar{u} muß trotz $u^N = 0$ noch nicht eindeutig bestimmt sein. Dies ist z.B. der Fall, wenn sich bei Änderung eines u^i zwar der Einzugsbereich, nicht aber dessen Maß ändert, also wenn die WS-Dichte über dem Rand des Einzugsbereiches verschwindet.

Beweis: zu (i)

- I^0 ist konvex:
Die Mengen $I_{ij}^0 = \left\{ u \in \mathbb{R}^{N-1} \mid \text{mit } u^N = 0 : u^i \leq u^j + \|x^i - x^j\| \right\}$ sind konvex:
Mit $\alpha, \beta > 0, \alpha + \beta = 1, u, v \in I_{ij}^0$ gilt:
 $(\alpha u^i + \beta v^i) \leq \alpha u^j + \alpha \|x^i - x^j\| + \beta v^j + \beta \|x^i - x^j\| = (\alpha u^j + \beta v^j) + \|x^i - x^j\|$
 I^0 ist dann als Schnitt der I_{ij}^0 wieder konvex.
- I^0 ist kompakt:
 I^0 ist beschränkt: $|u^i| = |u^i - u^N| \leq \|x^i - x^N\| \leq \max_{j \in \{1, \dots, N-1\}} \|x^j - x^N\| < \infty$,
da die x^j fest gewählt sind.
 I^0 ist abgeschlossen als Schnitt der abgeschlossenen I_{ij}^0
- I^0 enthält die 0:
Alle I_{ij}^0 enthalten wegen der positiven Definitheit der Norm die 0.

zu (ii)

- Für alle u aus I^0 sind die Schnitte der Einzugsbereiche μ -Nullmengen:
Wegen der absoluten Stetigkeit von μ reicht es nach Satz 2.1 zu zeigen, daß die Schnitte der Einzugsbereiche Nullmengen bzgl. des Lebesguemaßes sind. Sei also $u \in I^0$ beliebig.
Betrachten wir zunächst den Schnitt zweier Einzugsbereiche

$$S_{ij} = EB^i \cap EB^j \text{ für } i \neq j$$

Er ist die Nullstellenmenge der Funktion

$$d_{ij}(x) := u^i + \|x - x^i\|_p - (u^j + \|x - x^j\|_p)$$

∇d_{ij} ist außerhalb der Hyperebenen

$$H_{ij} := \bigcup_{\substack{k \in \{1, \dots, d\} \\ i \in \{i, j\}}} \{x \in \mathbb{R}^d \mid x_k = x_k^i\}$$

wohldefiniert und lautet dort:

$$\nabla d_{ij} : \begin{cases} \mathbb{R}^d \setminus H_{ij} \longrightarrow \mathbb{R}^d \\ x \longmapsto \left(\left(\frac{|x_k - x_k^i|}{\|x - x^i\|_p} \right)^{p-1} \text{sign}(x_k - x_k^i) - \left(\frac{|x_k - x_k^j|}{\|x - x^j\|_p} \right)^{p-1} \text{sign}(x_k - x_k^j) \right)_{k \in \{1, \dots, d\}} \end{cases}$$

H_{ij} ist als endliche Vereinigung von Hyperebenen eine λ -Nullmenge. Wir müssen also nur noch $S_{ij} \setminus H_{ij}$ betrachten.

Fall 1: $\forall x \in S_{ij} \setminus H_{ij} : \nabla d_{ij}(x) \neq 0$

Dann ist $S_{ij} \setminus H_{ij}$ eine Untermannigfaltigkeit von $\mathbb{R}^d \setminus H_{ij}$ und hat als solche Lebesguemaß 0.

Fall 2: Es gibt $x \in S_{ij} \setminus H_{ij}$ mit $\nabla d_{ij}(x) = 0$. Dann gilt für alle $k \in \{1, \dots, d\}$:

$$\underbrace{\left(\frac{|x_k - x_k^i|}{\|x - x^i\|_p} \right)^{p-1}}_{>0} \text{sign}(x_k - x_k^i) = \underbrace{\left(\frac{|x_k - x_k^j|}{\|x - x^j\|_p} \right)^{p-1}}_{>0} \text{sign}(x_k - x_k^j)$$

$$\begin{aligned}
&\implies \text{sign}(x_k - x_k^i) = \text{sign}(x_k - x_k^j) \quad \forall k \in \{1, \dots, N\} \\
&\stackrel{p>1}{\implies} \frac{|x_k - x_k^i|}{\|x - x^i\|_p} = \frac{|x_k - x_k^j|}{\|x - x^j\|_p} \quad \forall k \in \{1, \dots, N\} \\
&\stackrel{\text{sign}(x_k - x_k^i)}{\implies} \frac{x_k - x_k^i}{\|x - x^i\|_p} = \frac{x_k - x_k^j}{\|x - x^j\|_p} \quad \forall k \in \{1, \dots, N\} \\
&\implies \frac{x - x^i}{\|x - x^i\|_p} = \frac{x - x^j}{\|x - x^j\|_p} \\
&\implies (1 - \alpha(x))x = x^i - \alpha(x)x^j
\end{aligned}$$

wobei $\alpha(x) := \frac{\|x - x^i\|_p}{\|x - x^j\|_p}$ wegen $x \notin H_{ij}$ wohldefiniert ist.

Fall 2.1: $\alpha(x) = 1 \implies x - x^i = x - x^j \implies x^i = x^j$. Dies ist ein Widerspruch zu $i \neq j$.

Fall 2.2: $\alpha(x) \neq 1 \implies x = \frac{1}{1-\alpha(x)}x^i - \frac{\alpha(x)}{1-\alpha(x)}x^j = x^i + \frac{\alpha(x)}{1-\alpha(x)}(x^i - x^j)$

x liegt also innerhalb der von x^i und x^j aufgespannten Geraden. Für $d > 1$ hat eine solche das Lebesguemaß 0. Insgesamt erhalten wir also:

$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad u \in I^0 : S_i = \bigcup_{j=1}^N S_{ij}$ ist eine λ - und damit eine μ -Nullmenge. Nun können wir zeigen:

- e ist stetig differenzierbar mit $\frac{\partial e}{\partial u^i} = \mu(EB^i) - \frac{1}{N}$ für $i \in \{1, \dots, N\}$.

Wir benötigen den rechts- und linksseitigen Grenzwert von $\frac{\partial t^+}{\partial u^i}$ für $u \in I^0$. (In Randpunkten von I^0 interessiert uns natürlich nur einer von beiden.) Für $i \in \{1, \dots, N-1\}$ gilt:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial t^+}{\partial u^i}(u + 0e_i) &= \lim_{h \downarrow 0} \frac{1}{h} \left(\min_{\substack{i \in \{1, \dots, N\} \\ \sqrt{N} = 0}} \{u^j + h\delta_{ij} + \|x - x^j\|\} \right. \\
&\quad \left. - \min_{\substack{j \in \{1, \dots, N\} \\ \sqrt{N} = 0}} \{u^j + \|x - x^j\|\} \right) \\
&= \begin{cases} 1 & x \in EB^i \setminus \bigcup_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N EB^j \\ 0 & x \in \mathbb{R}^d \setminus EB^i \\ 0 & x \in \bigcup_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (EB^i \cap EB^j) \end{cases} \\
\frac{\partial t^+}{\partial u^i}(u - 0e_i) &\stackrel{\text{analog}}{=} \begin{cases} 1 & x \in EB^i \setminus \bigcup_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N EB^j \\ 0 & x \in \mathbb{R}^d \setminus EB^i \\ 1 & x \in \bigcup_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (EB^i \cap EB^j) \end{cases}
\end{aligned}$$

Die rechts- und linksseitigen Ableitungen von t^+ stimmen außerhalb von S_i überein. Da die S_i μ -Nullmengen sind, folgt deshalb für

$i \in \{1, \dots, N-1\}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial u^i}(u) &= \frac{\partial}{\partial u^i} \left(\int_{\mathbf{R}^d} t^+ d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} u^i \right) = \frac{\partial}{\partial u^i} \left(\int_{\mathbf{R}^d \setminus S_i} t^+ d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} u^i \right) \\ &= \int_{\mathbf{R}^d \setminus S_i} \frac{\partial t^+}{\partial u^i} d\mu - \frac{1}{N} = \int_{EB^i \setminus S_i} d\mu - \frac{1}{N} = \int_{EB^i} d\mu - \frac{1}{N} \\ &= \mu(EB^i) - \frac{1}{N} \end{aligned}$$

- e ist konkav auf I^0 :

Wegen der Stetigkeit von e genügt es zu zeigen, daß e im Inneren von I^0 konkav ist, d.h., daß $\forall u_0, u \in \overset{\circ}{I}^0$: $(e(u_0) + \langle \nabla e(u_0), u - u_0 \rangle) \geq e(u)$. Seien $u_0, u \in \overset{\circ}{I}^0$ beliebig. Dann gilt:

$$\begin{aligned} &e(u_0) + \langle \nabla e(u_0), u - u_0 \rangle - e(u) \\ &= \int_{\mathbf{R}^d} \min_{\substack{i \in \{1, \dots, N\} \\ u_0^N = 0}} \{u_0^i + \|x - x^i\|\} d\mu - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} u_0^i \\ &\quad + \sum_{i=1}^{N-1} \left(\mu(EB^i(u_0)) - \frac{1}{N} \right) (u^i - u_0^i) \\ &\quad - \int_{\mathbf{R}^d} \min_{\substack{i \in \{1, \dots, N\} \\ u^N = 0}} \{u^i + \|x - x^i\|\} d\mu + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} u^i \end{aligned}$$

Schnittmengen von Einzugsbereichen sind wie gesehen μ -Nullmengen. Wir können also mit $u^N = u_0^N = 0$ bedenkenlos fortsetzen...

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^N \left(\int_{EB^i(u_0)} u_0^i + \|x - x^i\| d\mu \right) + \sum_{i=1}^{N-1} \mu(EB^i(u_0)) \cdot (u^i - u_0^i) \\ &\quad - \int_{\mathbf{R}^d} \min_{\substack{i \in \{1, \dots, N\} \\ u^N = 0}} \{u^i + \|x - x^i\|\} d\mu \\ &= \sum_{i=1}^N \left(\int_{EB^i(u_0)} u^i + \|x - x^i\| d\mu \right) - \int_{\mathbf{R}^d} \min_{\substack{i \in \{1, \dots, N\} \\ u^N = 0}} \{u^i + \|x - x^i\|\} d\mu \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

da $u^j + \|x - x^j\| \geq \min_{\substack{i \in \{1, \dots, N\} \\ u^N = 0}} \{u^i + \|x - x^i\|\}$

zu (iii)

- e nimmt sein Maximum im Inneren von I^0 an:

Daß e sein Maximum überhaupt annimmt, folgt aus der Stetigkeit von e und der Kompaktheit von I^0 . Sei also $u \in I^0$ Maximumstelle. Annahme: $u \in \partial I^0$ Dann gibt es

$$u^{i_0} = \max_{i \in \{1, \dots, N\}} \{u^i \mid \exists j \in \{1, \dots, N\}, j \neq i : |u^i - u^j| = \|x^i - x^j\|\}$$

Seien

$$J = \{j \in \{1, \dots, N\} \mid j \neq i_0, |u^{i_0} - u^j| = \|x^{i_0} - x^j\|\}$$

$$\varepsilon_1 = \min_{j \in J} \{|u^{i_0} - u^j|\} = \min_{j \in J} \{\|x^{i_0} - x^j\|\}$$

$$\varepsilon_2 = \min_{j \notin J} \{\|x^{i_0} - x^j\| - |u^{i_0} - u^j|\}$$

$$\varepsilon = \min\{\varepsilon_1, \varepsilon_2\}$$

Es gilt: $J \neq \emptyset$ nach Annahme, $\varepsilon_1 > 0$, da $x^i \neq x^j$ für $i \neq j$ und $\varepsilon_2 > 0$, da $u \in I^0$ und $j \notin J$. Damit erhalten wir:

1) $\forall h \in (0, \varepsilon) \quad u_h := u - h e_{i_0} \in I^0$: Seien $i, j \in \{1, \dots, N\}, \quad i \neq j$

Fall 1.1: $i \neq i_0 \neq j$

$$\implies u_h^i = u^i, \quad u_h^j = u^j \implies |u_h^i - u_h^j| \leq \|x^i - x^j\|, \text{ da } u \in I^0$$

Fall 1.2: $i = i_0, \quad j \in J$

$$\implies |u_h^{i_0} - u_h^j| \stackrel{u^{i_0} \text{ maximal}}{=} |u^{i_0} - h - u^j| \leq \|x^{i_0} - x^j\| - h \leq \|x^{i_0} - x^j\|$$

Fall 1.3: $i = i_0, \quad j \notin J$

$$\implies |u_h^{i_0} - u_h^j| \leq |u^{i_0} - u^j| + h \leq |u^{i_0} - u^j| + \|x^{i_0} - x^j\| - |u^{i_0} - u^j| = \|x^{i_0} - x^j\|$$

2) $\frac{\partial e}{\partial u^{i_0}} = -\frac{1}{N}$: Sei $j \in J$

$$\implies |u^{i_0} - u^j| = u^{i_0} - u^j = \|x^{i_0} - x^j\|$$

$$\implies \forall x \in EB^{i_0} \quad u^j + \|x - x^j\| \leq u^{i_0} - \|x^{i_0} - x^j\| + \|x - x^j\|$$

$$\leq u^{i_0} + \|x - x^{i_0}\|$$

$$\implies EB^{i_0} \subseteq EB^j$$

$$\implies \mu(EB^{i_0}) = \mu(S_{i_0j}) = 0 \implies \frac{\partial e}{\partial u^{i_0}}(u) = 0 - \frac{1}{N}$$

Wegen der stetigen Differenzierbarkeit von e auf I^0 folgt dann:

$$e(u - h e_{i_0}) = e(u) + \frac{h}{N} + o(h) \quad \forall h \in (0, \varepsilon)$$

$$\implies \exists h \in (0, \varepsilon) \text{ so daß } e(u - h e_{i_0}) > e(u)$$

$\implies e$ nimmt in u kein absolutes Maximum an (Widerspruch).

u liegt also im Innern von I^0 . Wegen der stetigen Differenzierbarkeit von e über I^0 folgt dann $\nabla e(u) = 0$. Umgekehrt maximiert jedes u mit $\nabla e(u) = 0$ die Fehlerfunktion e , da e über I^0 stetig differenzierbar und konkav ist.

zu (iv)

- Sei $\bar{u} \in I^0$ Maximumstelle von e . Dann tragen die entsprechenden Einzugsbereiche alle die gleiche Masse $\frac{1}{N}$:

Sei zunächst $i \in \{1, \dots, N-1\}$. Dann folgt wegen $\frac{\partial e}{\partial u^i}(\bar{u}) = 0 \implies \mu(EB^i) = \frac{1}{N}$. Wegen $\mu(S_{ij}) = 0 \quad \forall i, j \in \{1, \dots, N\}, \quad i \neq j$ folgt schließlich auch für $i = N$:

$$\mu(EB^N) = 1 - \sum_{i=1}^{N-1} \mu(EB^i) = \frac{1}{N}.$$

zu (v)

- $d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) = e(\bar{u})$ folgt mit Lemma 4.2.

q.e.d.

Bemerkung: Die Einschränkung auf Dimensionen $d > 1$ und p -Normen mit $p \in (1, \infty)$ geschieht nur, um auszuschließen, daß die Schnitte der Einzugsbereiche ein Maß größer Null haben. Dies kann für die ∞ - und die 1-Norm für Randpunkte von I^0 passieren. Im Innern von I^0 gilt dagegen auch für diese Normen:

$$\frac{\partial e}{\partial u^i} = \mu(EB^i) - \frac{1}{N} \text{ für } i \in \{1, \dots, N-1\} \text{ und } \nabla e(\bar{u}) = 0 \implies d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) = e(\bar{u})$$

5 Charakterisierung einer lokal optimalen Punktapproximation

Analog zu Satz 4.1 können wir auch die partiellen Ableitungen der Fehlerfunktion e nach den Meßpunktkoordinaten angeben. Notwendige Bedingung für eine lokal optimale Punktapproximation von μ ist dann, daß alle partiellen Ableitungen der Fehlerfunktion — sowohl nach den Stützwerten u^i als auch nach den Meßpunktkoordinaten x_j^i — verschwinden.

Definition 5.1 (*lokal optimale Punktapproximation*)

Sei $\mu \in \mathcal{M}$. $\nu_{\{x^i\}}$ heißt *lokal optimale Punktapproximation* $:\iff \exists$ Umgebung $U \subseteq \mathbb{R}^{d \times N}$ von (x^1, \dots, x^N) , so daß $\forall (y^1, \dots, y^N) \in U : d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) \leq d_L(\mu, \nu_{\{y^i\}})$

Lemma 5.1 (*Ableitung nach den Meßpunktkoordinaten*)

Seien $\mu \in \mathcal{M}_{ac}^1$, $\{x^1, \dots, x^N\} \subseteq \mathbb{R}^d$, $d > 1$, $u \in I^0$. Dann gilt:

$$\frac{\partial e}{\partial x_j^i} = \int_{EB^i} \left(\frac{|x_j^i - x_j|}{\|x^i - x\|^p} \right)^{p-1} \text{sign}(x_j^i - x_j) d\mu \quad \begin{array}{l} i \in \{1, \dots, N\} \\ j \in \{1, \dots, d\} \end{array}$$

Beweis: Nicht triviale Teile wie in Satz 4.1

Satz 5.1 (*notwendige Bedingung für lokal optimale Punktapproximation*)

Seien $\mu \in \mathcal{M}_{ac}^1$, $\{x^1, \dots, x^N\} \subseteq \mathbb{R}^d$, $d > 1$. $\nu_{\{x^i\}}$ sei eine lokal optimale Punktapproximation von μ . Es gebe Umgebung $U \subseteq \mathbb{R}^{d \times N}$ von (x^1, \dots, x^N) , so daß $d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}})$ dort stetig differenzierbar nach den Meßpunktkoordinaten ist. \bar{u} sei die schlimmste Kontraktion zu μ und den $\{x^i\}$. Dann gilt:

$$\begin{array}{l} \forall i \in \{1, \dots, N-1\} \quad \frac{\partial e}{\partial u^i} = 0 \\ \forall \begin{array}{l} i \in \{1, \dots, N\} \\ j \in \{1, \dots, d\} \end{array} \quad \frac{\partial e}{\partial x_j^i} = 0 \end{array}$$

Beweis:

Nach Satz 4.1 gilt: $d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) = e(\mu, \{x^i\}, \bar{u})$. Da d_L als stetig differenzierbar vorausgesetzt ist, folgt:

$$0 = \frac{\partial d_L}{\partial x_j^i} = \frac{\partial e}{\partial x_j^i} + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial e}{\partial u^k} \cdot \frac{\partial u^k}{\partial x_j^i} \quad \begin{array}{l} i \in \{1, \dots, N\} \\ j \in \{1, \dots, d\} \end{array} \quad (5)$$

Die Kettenregel ist anwendbar, da e nach Satz 4.1 bzw. Lemma 5.1 partiell nach den u^i und x_j^i ableitbar ist und die linke Seite existiert. Nach Satz 4.1 gilt in \bar{u} :

$$\forall k \in \{1, \dots, N-1\} \quad \frac{\partial e}{\partial u^k} = 0. \text{ Aus Gleichung (5) folgt dann auch } \frac{\partial e}{\partial x_j^i} = 0 \quad \forall \substack{i \in \{1, \dots, N\} \\ j \in \{1, \dots, d\}}.$$

q.e.d

Bemerkung:

Wahrscheinlich läßt sich die Differenzierbarkeit von \bar{u} nach den $\{x^i\}$ für $\mu \in \mathcal{M}_{ac}^1$ mit Hilfe des Satzes über implizite Funktionen beweisen. Dann müßte die Differenzierbarkeit von d_L nicht mehr explizit vorausgesetzt werden.

Zum Schluß wollen wir noch einige Aussagen über die Existenz, Eindeutigkeit und Konstruktion optimaler Punktapproximationen machen.

5.1 Existenz

Für WS-Maße mit kompaktem Träger läßt sich zeigen, daß es immer eine global optimale Punktapproximation gibt.

Lemma 5.2 (*Beschränkung auf Träger*)

Sei $\mu \in \mathcal{M}_{ac}^1(\mathbb{R}^d)$ mit kompaktem Träger in $B_R(0) := \{x \in \mathbb{R}^d \mid \|x\|_\infty \leq R\}$, $R > 0$. Dann gilt: Gibt es eine lokal optimale Punktapproximation von μ , dann liegen deren Meßpunkte in $B_R(0)$.

Beweis:

Nehmen wir an, es gäbe eine lokal optimale Punktapproximation von μ mit Meßpunkt $x^i \notin B_R(0)$, $\exists x_j^i > R$. Dann gilt:

$$\frac{\partial e}{\partial x_j^i} = \int_{EB^i \cap B_R(0)} \left(\frac{|x_j^i - x_j|}{\|x^i - x\|^p} \right)^{p-1} \underbrace{\text{sign}(x_j^i - x_j)}_{=1} d\mu \geq c \cdot \mu(EB^i) \geq 0$$

wo $c = \frac{x_j^i - R}{\max_{x \in B_R(0)} \|x^i - x\|^p} > 0$. $\nu_{\{x^i\}}$ lokal optimal $\implies \frac{\partial e}{\partial x_j^i} = 0 \implies \mu(EB^i) = 0$. Dies steht im

Widerspruch zu $\frac{\partial e}{\partial u^i}(\bar{u}) = 0 \iff \mu(EB^i) = \frac{1}{N}$ für die schlimmste Kontraktion \bar{u} .

q.e.d.

Für WS-Maße mit kompaktem Träger können wir nun die Existenz einer global optimalen Punktapproximation beweisen.

Satz 5.2 (*Existenz einer global optimalen Punktapproximation*)

Sei $\mu \in \mathcal{M}_{ac}$ mit kompaktem Träger.

Dann gibt es Meßpunkte $\{x^1, \dots, x^N\} \subseteq \mathbb{R}^d$, so daß $\forall \{y^1, \dots, y^N\} \subseteq \mathbb{R}^d$:

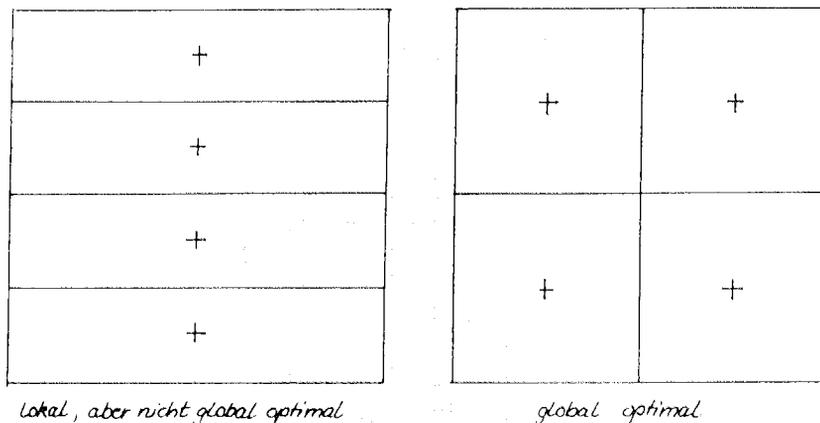
$$d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) \leq d_L(\mu, \nu_{\{y^i\}})$$

Beweis:

Zunächst gehört μ wegen seines kompakten Trägers zu \mathcal{M}_{ac}^1 und die vorangegangenen Sätze sind anwendbar. Der Träger von μ liege in $B_R(0)$, $R > 0$. Nach Lemma 5.2 genügt es, $\{y^i\} \subseteq B_R(0)$ zu betrachten. Als stetige Funktion nimmt $d_L(\mu, \nu_{\{y^i\}}) = e(\mu, \{y^i\}, \bar{u}(\mu, \{y^i\}))$ auf dem Kompaktum $(B_R(0))^N$ sein Minimum an.

5.2 Eindeutigkeit

Es gibt lokal optimale Punktapproximationen, die nicht global optimal sind. Als Beispiel mögen folgende Approximationen der Uniformverteilung auf $[0, 1]^2$ durch vier Punkte dienen:



Selbst eine global optimale Punktapproximation ist nicht eindeutig bestimmt. Jede Permutation der Meßpunkte führt zum gleichen Lipschitzabstand. Enthält das Zielmaß ferner Symmetrien, dann ist auch jede entsprechende Transformation optimaler Meßpunkte wieder optimal.

5.3 Konstruktion

Prinzipiell kann eine optimale Punktapproximation durch Lösen eines $(d+1)N - 1$ dimensionalen Sattelpunktproblems gefunden werden. Dazu ist die Fehlerfunktion e bzgl. der Stützpunkte u^i zu maximieren und bzgl. der Meßpunktkoordinaten x_j^i zu minimieren.

Numerisch ergeben sich jedoch erhebliche Schwierigkeiten. Zunächst lassen sich Sattelpunktprobleme prinzipiell nur schwer behandeln. Darüberhinaus sind die Grenzen der Einzugsbereiche *nicht* stückweise durch Hyperebenen, sondern durch gekrümmte Hyperflächen gegeben. Dadurch wird eine Bestimmung und Darstellung außerordentlich erschwert. In [Mohr] findet sich ein wenig elegantes aber zumindest praktikables Verfahren.

6 Die Approximationsordnung

In diesem Abschnitt betrachten wir nur Zielmaße $\mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{R}^d)$ mit kompaktem Träger. Für ein allgemeines solches WS-Maß werden wir zeigen, daß die bestmögliche Approximationsordnung durch gleichgewichtete diskrete WS-Maße $\nu_{\{x^i\}} \in \mathcal{D}_N^d$ zwischen $O(N^{-\frac{1}{d}})$ und $O(N^{-\frac{1}{d+1}})$ liegt. Numerische Ergebnisse deuten jedoch darauf hin, daß zumindest für glatte Zielmaße die untere Schranke $O(N^{-\frac{1}{d}})$ stets erreichbar ist.

Satz 6.1 (Optimalität kubischer Gitter)

Sei $d \in \mathbb{N}$, λ die Uniformverteilung auf $I^d := [0, 1]^d$. Die Lipschitzstetigkeit der Testfunktionen beziehe sich auf die ∞ -Norm. Die Meßpunktzahl sei $N = n^d$, $n \in \mathbb{N}$. Dann ist $\nu_{\{x^i\}} \in \mathcal{D}_N^q$ mit Meßpunktmenge $\{x \in I^d \mid \forall j \in \{1, \dots, d\} \exists k \in \{1, \dots, n\} : x_j = \frac{2k-1}{2n}\}$ global optimale Punktapproximation für λ mit Lipschitzabstand

$$d_L(\lambda, \nu_{\{x^i\}}) = \frac{d}{2(d+1)} N^{-\frac{1}{d}}$$

Beweis:

1° Die schlimmste Kontraktion hat die Form $\bar{t}^+(x) = \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \|x - x^i\|_\infty$, d.h. alle Stützwerte sind 0. Um dies zu sehen, stellen wir zunächst fest, daß die Einzugsbereiche von folgender Gestalt sind:

$$EB^i = [x_1^i - \frac{h}{2}, x_1^i + \frac{h}{2}] \times \dots \times [x_d^i - \frac{h}{2}, x_d^i + \frac{h}{2}] \text{ mit } h = \frac{1}{n} = N^{-\frac{1}{d}}, \text{ d.h.}$$

$$\mu(EB^i) = h^d = \frac{1}{N} \quad (6)$$

Nach der Bemerkung zu Satz 4.1 ergeben sich auch für die ∞ -Norm die partiellen Ableitungen der Fehlerfunktion durch $\frac{\partial e}{\partial u^i}(u) = \mu(EB^i) - \frac{1}{N}$, sofern wir Stützstellenvektoren aus dem Innern von I^0 betrachten, also insbesondere für das vorliegende $\bar{u} = (0, \dots, 0)$. Gleichung (6) liefert $\nabla e(\bar{u}) = 0$. Nach der Bemerkung zu Satz 4.1 ist \bar{u} also schlimmste Kontraktion.

2° Elementare Integration ergibt für den Lipschitzabstand:

$$\begin{aligned} d_L(\lambda, \nu_{\{x^i\}}) &= \int_{I^d} \bar{t}^+ d\lambda - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \bar{u}^i \\ &= \int_{I^d} \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \|x - x^i\|_\infty dx \\ &= \sum_{i=1}^N \int_{EB^i} \|x - x^i\|_\infty dx \\ &= \sum_{i=1}^N d \cdot \int_{x_1 = -\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} |x_1| \int_{x_2 = -|x_1|}^{|x_1|} \dots \int_{x_d = -|x_1|}^{|x_1|} dx_d \dots dx_1 \\ &= N \frac{d}{2(d+1)} h^{d+1} \\ &= \frac{d}{2(d+1)} N^{-\frac{1}{d}} \end{aligned}$$

Dabei ist $\frac{d}{2(d+1)} h^{d+1}$ der Beitrag eines Einzugsbereiches.

3° $\nu_{\{x^i\}}$ ist unter allen N -punktigen Approximationen optimal. Dazu zeigen wir zunächst: Sei x Meßpunkt, $\mathbb{E} x = 0$ und EB ein irgendwie geformter Einzugsbereich mit Volumen $\lambda(EB) = m$. Sei W ein Würfel mit gleichem Volumen, d.h. mit Seitenlänge $h = m^{\frac{1}{d}}$ und Zentrum 0. Dann gilt:

$$\int_{EB} \|x\|_\infty dx \geq \int_W \|x\|_\infty dx \quad (7)$$

Denn:

$$\begin{aligned}
\int_{EB} \|x\|_\infty dx &= \int_{EB \setminus W} \|x\|_\infty dx + \int_{EB \cap W} \|x\|_\infty dx \\
&\geq \int_{EB \setminus W} \frac{h}{2} dx + \int_{EB \cap W} \|x\|_\infty dx \\
&= \frac{h}{2} \lambda(EB \setminus W) + \int_{EB \cap W} \|x\|_\infty dx \\
\stackrel{\lambda(EB) = \lambda(W)}{=} &\frac{h}{2} \lambda(W \setminus EB) + \int_{W \cap EB} \|x\|_\infty dx \\
&\geq \int_{W \setminus EB} \|x\|_\infty dx + \int_{W \cap EB} \|x\|_\infty dx \\
&= \int_W \|x\|_\infty dx
\end{aligned}$$

Nun können wir die Optimalität von $\nu_{\{x^i\}}$ zeigen. Sei $\nu_{\{y^i\}} \in \mathcal{D}_N^d$ beliebig, $\tilde{EB}^i = \tilde{EB}^i(\{(y^j, 0)\})$, $i \in \{1, \dots, N\}$ seien die schnittfreien Einzugsbereiche der $\{y^i\}$ zum Stützvektor $u = (0, \dots, 0)$, $m_i := h_i^d := \lambda(\tilde{EB}^i)$ sei das Volumen von \tilde{EB}^i und W^i der Würfel mit Zentrum y^i und Seitenlänge h_i . Dann gilt:

$$\begin{aligned}
d_L(\lambda, \nu_{\{y^i\}}) &\stackrel{\text{Lemma 4.2}}{=} \sup_{u \in I^0} \left(\int_{I^d} \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \{u^i + \|x - y^i\|_\infty\} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} u^i \right) \\
&\stackrel{u^i=0}{\geq} \int_{I^d} \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \|x - y^i\|_\infty dx \\
&= \sum_{i=1}^N \int_{\tilde{EB}^i} \|x - y^i\|_\infty dx \\
&\stackrel{(7)}{\geq} \sum_{i=1}^N \int_{W^i} \|x - y^i\|_\infty dx \\
&\stackrel{(2^\circ)}{=} \frac{d}{2(d+1)} \sum_{i=1}^N m_i^{\frac{d+1}{d}} \\
&=: \varphi(m_1, \dots, m_N)
\end{aligned}$$

Bemerkung: I^d bezeichnet den d-dimensionalen Einheitswürfel, I^0 die Menge der interpolierbaren Stützwerte mit $u^N = 0$.

Wir suchen das absolute Minimum von φ unter der Nebenbedingung $\sum_{i=1}^N m_i = 1$. Der Lagrangesche Ansatz liefert:

$$\begin{aligned}
\nabla \varphi &= \frac{d}{2(d+1)} \frac{d+1}{d} (m_i^{\frac{1}{d}})_{i \in \{1, \dots, N\}} = \alpha(1, \dots, 1) \\
\Rightarrow &\quad \forall i \in \{1, \dots, N\} \quad m_i = \frac{1}{N} \\
\Rightarrow &d_L(\lambda, \nu_{\{y^i\}}) \geq \frac{d}{2(d+1)} N N^{-\frac{d+1}{d}} = \frac{d}{2(d+1)} N^{-\frac{1}{d}} = d_L(\lambda, \nu_{\{x^i\}})
\end{aligned}$$

q.e.d.

Nun wollen wir zeigen, daß für beliebiges WS-Maß μ mit kompaktem Träger und zumindest für spezielle Folgen von Teilchenzahlen $(N_n) \rightarrow \infty$ stets Punktapproximationen gefunden werden können, die μ mit der Ordnung $O\left(N^{-\frac{1}{d+1}}\right)$ approximieren.

Satz 6.2 (obere Schranke für die Approximationsordnung)

Sei $\mu \in \mathcal{M}_1$ mit kompaktem Träger im Würfel $W = [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^d$, $d \in \mathbb{N}$, $N_0 = n^{d+1}$, $n \in \mathbb{N}$. Dann gibt es für jedes $N \geq N_0$ eine Approximation $\nu_{\{x^i\}} \in \mathcal{D}_N^d$ von μ und eine nur von d , L und der Bezugsnorm $\|\cdot\|$ abhängige Konstante $C > 0$ so daß:

$$d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) \leq CN_0^{-\frac{1}{d+1}}$$

Beweis:

Seien $M = N_0^{\frac{1}{d+1}}$, $m = M^{\frac{1}{d}}$, $h = \frac{L}{m}$,

$X = \{x \in W \mid \forall j \in \{1, \dots, d\} \exists k \in \{1, \dots, m\} : x_j = \frac{2k-1}{2m}\}$

die Menge der Mittelpunkte einer gleichmäßigen Zerlegung von W in Würfel

$W^i = [x_1^i - \frac{h}{2}, x_1^i + \frac{h}{2}] \times \dots \times [x_d^i - \frac{h}{2}, x_d^i + \frac{h}{2}]$, $x^i \in X$.

Sei ferner $\tilde{\mu} = \sum_{i=1}^M \alpha_i \delta_{x^i} \in \mathcal{D}_M$ gewichtete diskrete Approximation von μ mit $x^i \in X$, $\alpha_i = \mu(W^i)$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} d_L(\mu, \tilde{\mu}) &= \sup_{u \in \text{Lip}_1} \int_W u d(\mu - \tilde{\mu}) \\ &\leq \sum_{i=1}^M \sup_{u \in \text{Lip}_1} \int_{W^i} u d(\mu - \tilde{\mu}) \\ &\leq \sum_{i=1}^M \sup_{u \in \text{Lip}_1} \int_{W^i} (u(x^i) + \|x - x^i\|) d(\mu - \tilde{\mu}) \\ &\leq \sum_{i=1}^M \sup_{u \in \text{Lip}_1} \left(\alpha_i (u(x^i) - u(x^i)) + \int_{W^i} \|x - x^i\| d\mu \right) \\ &\leq \sum_{i=1}^M c(\|\cdot\|, d) \int_{W^i} h d\mu \\ &\leq c(\|\cdot\|, d) M h^{d+1} \\ &\stackrel{h=LM^{-\frac{1}{d}}}{\leq} c(\|\cdot\|, d, L) M^{-\frac{1}{d}} \end{aligned}$$

Nun approximieren wir μ durch ein gleichgewichtetes diskretes Maß $\nu_{\{x^i\}} \in \mathcal{D}_N^d$, indem wir in jedes $x^i \in X$ n_i Punkte legen, so daß gilt: $\alpha_i - \frac{1}{N_0} \leq \frac{n_i}{N} \leq \alpha_i + \frac{1}{N_0} \quad \forall i \in \{1, \dots, M\}$. Damit erhalten wir schließlich:

$$\begin{aligned} d_L(\mu, \nu_{\{x^i\}}) &\leq d_L(\mu, \tilde{\mu}) + d_L(\tilde{\mu}, \nu_{\{x^i\}}) \\ &\leq cM^{-\frac{1}{d}} + MN_0^{-1} \\ &\stackrel{M=N_0^{\frac{1}{d+1}}}{=} (c+1)N_0^{-\frac{1}{d+1}} \end{aligned}$$

q.e.d.

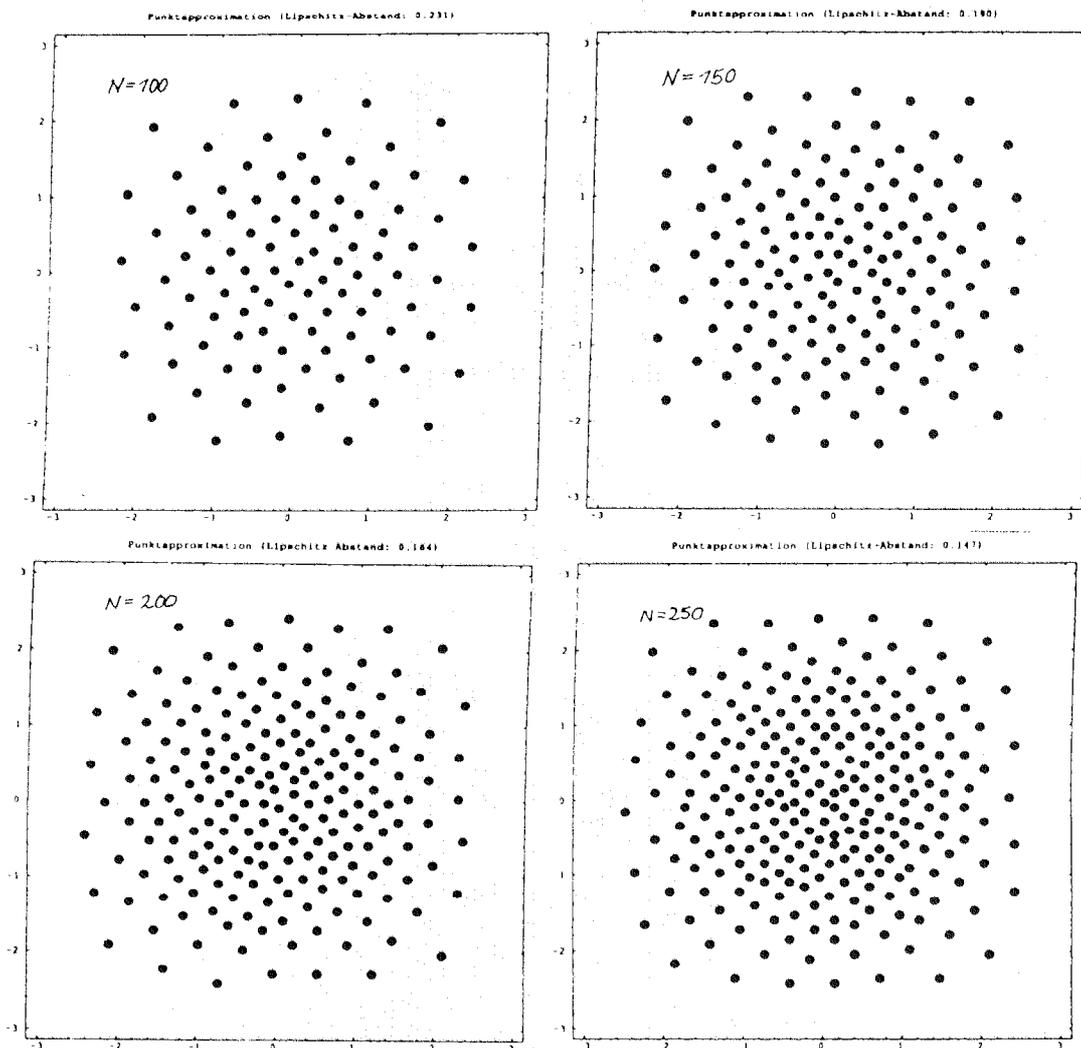
7 Numerische Ergebnisse

Die folgende Abbildung zeigt Punktapproximationen des absolut stetigen WS-Maßes mit der Dichte

$$f(x, y) := \frac{1}{4\pi^2} (1 + \cos(x))(1 + \cos(y)) \quad (x, y) \in [-\pi, \pi]^2.$$

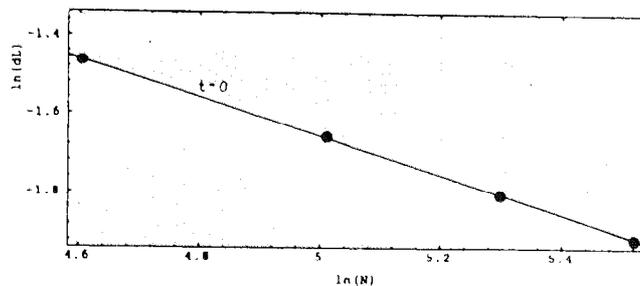
Zur Berechnung der Lipschitzabstände und zur Erzeugung der Approximationen wurde der in [Mohr] aufgeführte Algorithmus benutzt.

Punktapproximationen der Anfangsdichte



Die folgende Graphik zeigt in doppeltlogarithmischer Auftragung den Lipschitzabstand zwischen Dichte und Partikelapproximation in Abhängigkeit von der Partikelzahl N .

Lipschitzabstände zur analytischen Lösung



Deutlich zeigt sich ein Absinken des Abstandes von der Ordnung $\approx O(N^{-\frac{1}{2}})$: die Steigung der Ausgleichsgeraden beträgt $-0,495 \approx -\frac{1}{2}$. Es besteht also berechnete Hoffnung, daß zumindest die in Satz 6.1 bestimmte untere Schranke generell erreichbar ist.

8 Vergleich mit Diskrepanzkriterium

Im Rahmen deterministischer Partikelmethode werden Punktapproximationen bisher üblicherweise nach ihrer *Diskrepanz* beurteilt [Neun]. Wie die Lipschitzmetrik gibt auch die Diskrepanz den maximalen Fehler bei Integration bestimmter Testfunktionen an. Allerdings bestehen die Testfunktionen diesmal aus den charakteristischen Funktionen gewisser achsenparalleler Quader. Wir wollen uns in diesem Vergleich nur mit der Diskrepanz zur Uniformverteilung auf dem d -dimensionalen Einheitswürfel befassen [Kuip].

Definition 8.1 (Diskrepanz)

Sei λ das Borel-Lebesguesche Maß auf dem Einheitswürfel I^d und $J^* := \{Q_y := \{\eta \in I^d \mid 0 \leq \eta_i \leq y_i, \quad i \in \{1, \dots, d\}\}, \quad y \in I^d\}$ die Menge der achsenparallelen Quader mit Eckpunkten 0 und y . Dann heißt

$$D_N^* : \begin{cases} \mathbb{R}^{d \times N} & \longrightarrow \mathbb{R}_0^+ \\ (x^1, \dots, x^N) & \longmapsto \sup_{Q \in J^*} \left| \int_{I^d} \chi_Q d\nu_{\{x^i\}} - \lambda(Q) \right| \end{cases}$$

Diskrepanz zur Uniformverteilung auf I^d .

Es ist nun möglich, die Uniformverteilung derart durch gleichgewichtete, diskrete WS-Maße zu approximieren, daß die Diskrepanz mit wachsender Punktzahl N mit der Ordnung $O\left(\frac{\log^d N}{N}\right)$ fällt (vgl. LP_r -Folgen in [Sobo], S.48). Für Dimensionen $d > 1$ ist dies wesentlich besser als die beste zu erreichende Ordnung $O(N^{-\frac{1}{d}})$ bei Minimierung des Lipschitzabstandes. Wie paßt dies zusammen?

Der Lipschitzabstand ist proportional zum größten Fehler, der sich bei Integration *gleichmäßig Lipschitz-stetiger* Funktionen einstellen kann, wenn das diskrete Maß als Quadraturformel für das stetige Maß benutzt wird.

Die Diskrepanz hingegen gibt Aufschluß über den größten Fehler bei Integration von Funktionen, die über dem Einheitswürfel und all seinen niederdimensionalen Oberflächensegmenten von *gleichmäßig beschränkter Vitali-Variation* sind. Der entsprechende Zusammenhang wird durch die *Koksma-Hlawka-Ungleichung* beschrieben. Für die genaue Formulierung sei auf [Kuip], S.147 ff verwiesen. Wichtig ist an dieser Stelle nur folgende Beobachtung.

Im Sinne der Lipschitzmetrik sind über einem regelmäßigen Gitter verteilte Meßpunkte die optimale Approximation der Uniformverteilung. Berechnet man für die entsprechende schlimmste Kontraktion (s. Satz 6.1) die Variation, dann stellt sich heraus, daß diese mit wachsender Meßpunktzahl N unbeschränkt wächst:

Definition 8.2 (Vitali-Variation)

Seien $d \geq 2$, $f : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion und $0 = \eta_j^0 \leq \eta_j^1 \leq \dots \leq \eta_j^{m_j} = 1$, $m_j \in \mathbb{N}$, $j \in \{1, \dots, d\}$ Unterteilungen der Koordinatenachsen. Der Operator Δ_j sei definiert durch:

$$\Delta_j f(x_1, \dots, x_{j-1}, \eta_j^i, x_{j+1}, \dots, x_d) := f(x_1, \dots, x_{j-1}, \eta_j^{i+1}, x_{j+1}, \dots, x_d) - f(x_1, \dots, x_{j-1}, \eta_j^i, x_{j+1}, \dots, x_d)$$

und $\Delta_{j_1, \dots, j_p} := \Delta_{j_1} \cdots \Delta_{j_p}$. Dann heißt

$$V^d(f) := \sup_{\substack{0 = \eta_j^0 \leq \eta_j^1 \leq \dots \leq \eta_j^{m_j} = 1 \\ m_j \in \mathbb{N}, j \in \{1, \dots, d\}}} \sum_{i_1=0}^{m_1-1} \cdots \sum_{i_d=0}^{m_d-1} \left| \Delta_{1, \dots, d} f \left(\eta_1^{i_1}, \dots, \eta_d^{i_d} \right) \right| \quad \text{Vitali-Variation von } f.$$

Satz 8.1 (Vital-Variation der schlimmsten Kontraktion)

Seien $n, d \in \mathbb{N}$, $N = n^d$, $\{x^1, \dots, x^N\} := \left\{ \frac{1}{2n}, \frac{3}{2n}, \dots, \frac{2n-1}{2n} \right\}^d$ und damit $\nu_{\{x^i\}} \in \mathcal{D}_N^g$ die optimale N -punktige Approximation der Uniformverteilung aus Satz 6.1 mit schlimmster Kontraktion $\bar{u}(x) := \min_{i \in \{1, \dots, N\}} \|x - x^i\|_\infty$. Dann gilt:

$$V^d(\bar{u}) \geq 2^{d-1} N^{1-\frac{1}{d}}$$

Beweis: Wegen $\bar{u}|_{(0, \frac{1}{2n})^d} = \begin{cases} 0 & x = (\frac{1}{2n}, \dots, \frac{1}{2n}) \\ \frac{1}{2n} & \text{sonst} \end{cases}$ gilt:

$$\begin{aligned} V^d(\bar{u}) &\geq \sum_{i_1=0}^{2n-1} \cdots \sum_{i_d=0}^{2n-1} \left| \Delta_{1, \dots, d} \bar{u} \left(\frac{i_1}{2n}, \dots, \frac{i_d}{2n} \right) \right| \\ &= (2n)^d \left| \Delta_{1, \dots, d} \bar{u}(0, \dots, 0) \right| \\ &= (2n)^d \left| \Delta_{2, \dots, d} \bar{u} \left(\frac{1}{2n}, 0, \dots, 0 \right) - \Delta_{2, \dots, d} \bar{u}(0, 0, \dots, 0) \right| \\ &= (2n)^d \left| \Delta_{2, \dots, d} \bar{u} \left(\frac{1}{2n}, 0, \dots, 0 \right) \right| \\ &= (2n)^d \left| \Delta_{3, \dots, d} \bar{u} \left(\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n}, 0, \dots, 0 \right) - \Delta_{3, \dots, d} \bar{u} \left(\frac{1}{2n}, 0, 0, \dots, 0 \right) \right| \\ &\quad \vdots \\ &= (2n)^d \left| \bar{u} \left(\frac{1}{2n}, \dots, \frac{1}{2n}, \frac{1}{2n} \right) - \bar{u} \left(\frac{1}{2n}, \dots, \frac{1}{2n}, 0 \right) \right| \\ &= (2n)^{d-1} \\ &= 2^{d-1} N^{\frac{d-1}{d}} \end{aligned}$$

q.e.d.

Die Approximationsordnung bzgl. der Diskrepanz ist also besser, weil gleichmäßig Lipschitz-stetige Funktionen nicht notwendig von gleichmäßig beschränkter Variation sind. Bessere Approximationsordnungen lassen sich voraussichtlich dadurch erzielen, daß faktorisierende Testfunktionen höherer Differenzierbarkeitsordnung verwendet werden.

References

- [Cerc] C. Cercignani: „The Boltzmann Equation and Its Applications“, Applied Mathematical Sciences, Vol 67, Springer Verlag, 1988
- [Kuip] L. Kuipers, H. Niederreiter: „Uniform Distribution of sequences“, J. Wiley & Sons, 1974
- [Mark] P.A. Markowich, C.A. Ringhofer, C. Schmeiser: „Semiconductor Equations“, Springer-Verlag, 1990

- [Mohr] J. Mohring: „Numerische Lösung einer Halbleitermodellgleichung mit Hilfe von Partikelmethode“, Diplomarbeit an der Universität Kaiserslautern, 1992
- [Neun] H. Neunzert: „Neuere qualitative und numerische Methoden in der Plasmaphysik“, Paderborner Ferienkurs in angewandter Mathematik, 1975
- [Sobo] I.M. Sobol: „Punkte, die einen mehrdimensionalen Würfel gleichmäßig ausfüllen“, Berichte der Arbeitsgruppe Technomathematik Nr. 51, 1991

FOLGENDE BERICHTE SIND ERSCHIEENEN:

- 1983**
- Nr. 1 FORSCHUNG
W.G. Eschmann und Ralph Götz
Optimierung von Gelenksehnen
- 1984**
- Nr. 2 WEITERBILDUNG
H. Neunzert, M. Schulz-Reese
Mathematische Weiterbildung
- Nr. 3 FORSCHUNG
W. Krüger
The Trippstadt Problem
- Nr. 4 WEITERBILDUNG
H. Neunzert, M. Schulz-Reese, K.E. Hoffmann
Mathematics in the University and Mathematics in Industry - Complement or Contrast?
- Nr. 5 FORSCHUNG
A.K. Louis
The Limited Angle Problem in Computerized Tomography
- Nr. 6 FORSCHUNG
W. Krüger
Regression für Ellipsen in achsenparalleler Lage
- Nr. 7 FORSCHUNG
Th. Mietzner
Umströmung von Ecken und Kanten, Teil 1
- 1985**
- Nr. 8 FORSCHUNG
W. Krüger, J. Petersen
Simulation und Extrapolation von Rainflow-Matrizen
- Nr. 9 FORSCHUNG
W. Krüger, M. Scheutzwow u. A. Beste, J. Petersen
Markov- und Rainflow-Rekonstruktionen stochastischer Beanspruchungszeitfunktionen
- Nr. 10 FORSCHUNG
Th. Mietzner
Umströmung von Ecken und Kanten, Teil 2
- Nr. 11 FORSCHUNG
H. Ploss
Simulationmethoden zur Lösung der Boltzmann-Gleichung
- 1986**
- Nr. 12 FORSCHUNG
M. Keul
Mathematische Modelle für das Zeitverhalten stochastischer Beanspruchungszeitfunktionen
- Nr. 13 AUSBILDUNG
W. Krüger, H. Neunzert, M. Schulz-Reese
Fundamentals of Identification of Time Series
- Nr. 14 FORSCHUNG
H. Moock
Ein mathematisches Verfahren zur Optimierung von Nocken
- Nr. 15 FORSCHUNG
F.-J. Pfreundt
Berechnung und Optimierung des Energiegewinnes bei Anlagen zur Lufterwärmung mittels Erdkanal
- Nr. 16 FORSCHUNG
F.-J. Pfreundt
Berechnung einer 2-dimensionalen Kanalströmung mit parallel eingeblasener Luft
- Nr. 17 FORSCHUNG
G. Alessandrini
Some remarks on a problem of sound measurements from incomplete data
- Nr. 18 AUSBILDUNG
W. Diedrich
Einfluß eines Latentwärmespeichers auf den Wärmefluß durch eine Ziegelwand
- Nr. 19 FORSCHUNG
M. Stöhr
Der Kalman-Filter und seine Fehlerprozesse unter besonderer Berücksichtigung der Auswirkung von Modellfehlern
- Nr. 20 FORSCHUNG
H. Babovsky
Berechnung des Schalldrucks im Innern eines Quaders
- Nr. 21 FORSCHUNG
W.G. Eschmann
Toleranzuntersuchungen für Druckmessgeräte
- 1987**
- Nr. 22 FORSCHUNG
G. Schneider
Stratification of solids, a new perspective in three dimensional computer aided design
- Nr. 23 FORSCHUNG
H.-G. Stark
Identifikation von Amplituden und Phasensprüngen im Intensitätsverlauf eines Nd-YAG Festkörperlaser
- Nr. 24 FORSCHUNG
M. Scheutzwow
Einfache Verfahren zur Planung und Auswertung von Navigationsversuchsfahrten
- Nr. 25 FORSCHUNG
G.R. Dargahi-Noubary
A Parametric Solution for Simple Stress-Strength Model of Failure with an Application
- Nr. 26 FORSCHUNG
U. Helmke, D. Prätzel-Wolters
Stability and Robustness Properties of Universal Adaptive Controllers for First Order Linear Systems
- Nr. 27 FORSCHUNG
G. Christmann
Zeitreihen und Modalanalyse
- 1988**
- Nr. 28 FORSCHUNG
H. Neunzert, B. Wetton
Pattern recognition using measure space metrics
- Nr. 29 FORSCHUNG
G. Steinebach
Semi-implizite Einschrittverfahren zur numerischen Lösung differential-algebraischer Gleichungen technischer Modelle
- Nr. 30 FORSCHUNG
M. Brokate
Properties of the Preisach Model for Hysteresis
- Nr. 31 FORSCHUNG
H.-G. Stark, H. Trinkaus, Ch. Jansson
The Simulation of the Charge Cycle in a Cylinder of a Combustion Engine

- Nr. 32 FORSCHUNG
H. Babovsky, F. Gropengießer, H. Neunzert,
J. Struckmeier, B. Wiesen
*Low Discrepancy Methods for the Boltzmann
Equation*
- Nr. 33 FORSCHUNG
M. Brokate
*Some BV properties of the Preisach hysteresis
operator*

1989

- Nr. 34 FORSCHUNG
H. Neunzert
*Industrial Mathematics: General Remarks and
Some Case Studies*
- Nr. 35 FORSCHUNG
M. Brokate
*On a Characterization of the Preisach Model for
Hysteresis*
- Nr. 36 FORSCHUNG
C.-P. Fritzen, P. Hackh
Optimization of a Spring for Dental Attachments
- Nr. 37 FORSCHUNG
U. Helmke, D. Prätzel-Wolters, S. Schmid
*Adaptive Synchronization of Interconnected
Linear Systems*
- Nr. 38 FORSCHUNG
U. Helmke, D. Prätzel-Wolters, S. Schmid
*Sufficient Conditions for Adaptive Stabilization and
Tracking*
- Nr. 39 FORSCHUNG
U. Helmke, D. Prätzel-Wolters, S. Schmid
*Adaptive Tracking for Scalar Minimum Phase
Systems*
- Nr. 40 FORSCHUNG
F.-J. Pfreundt
Nähen als dynamisches System

1990

- Nr. 41 FORSCHUNG
H.-G. Stark
Multiscale Analysis, Wavelets and Texture Quality
- Nr. 42 FORSCHUNG
I. Einhorn, H. Moock
*A Deterministic Particle Method for the Simulation of
the Boltzmann Transport Equation of
Semiconductors*
- Nr. 43 FORSCHUNG
F. Gropengießer, H. Neunzert, J. Struckmeier
*Computational Methods for the Boltzmann
Equation*
- Nr. 44 FORSCHUNG
S. Nikitin, S. Schmid
*Universal Adaptive Stabilizers for One-
Dimensional Nonlinear Systems*
- Nr. 45 FORSCHUNG
P. Hackh
Quality Control of Artificial Fabrics
- Nr. 46 FORSCHUNG
S. Körber, B. Wiesen
*A Comparison of a Microscopic and a
Phenomenological Model for a Polyatomic Gas*
- Nr. 47 FORSCHUNG
F. Gropengießer, H. Neunzert, J. Struckmeier,
B. Wiesen
*Several Computer Studies on Boltzmann Flows in
Connection with Space Flight Problems*

- Nr. 48 FORSCHUNG
M. Brokate
*Some Remarks on the Discretization of the
Preisach Operator*

- Nr. 49 FORSCHUNG
M. Brokate
On the Moving Preisach Model

1991

- Nr. 50 FORSCHUNG
W. Wagner
*A Stochastic Particle System Associated with the
Spatially Inhomogeneous Boltzmann Equation*
- Nr. 51 AUSBILDUNG
I.M. Sobol
*Punkte, die einen mehrdimensionalen Würfel
gleichmäßig ausfüllen*
- Nr. 52 FORSCHUNG
M. Brokate, A.H. Siddiqi
Sensitivity in the Rigid Punch Problem
- Nr. 53 FORSCHUNG
S. Nikitin, D. Prätzel-Wolters
Multiparameter, Polynomial Adaptive Stabilizers
- Nr. 54 FORSCHUNG
S. Schmid, D. Prätzel-Wolters
Synchronization through System Interconnections
- Nr. 55 FORSCHUNG
D. Prätzel-Wolters, R.D. Reinke
*Simple Adaptive Control of a Discrete Almost
Strict Positive Real Heat Treatment System*
- Nr. 56 FORSCHUNG
S. Chen, D. Prätzel-Wolters
*Modelling and Controller Design for Heat
Treatment Processing of Enamelled Wires*
- Nr. 57 FORSCHUNG
B. Wiesen
*On the Dependence of the Solution of Generalized
Boltzmann Equation on the Scattering Cross Section:
The Inverse Problem*
- Nr. 58 FORSCHUNG
G. Engl, R. Rösch
*Studien zum Programmsystem PROM
(Berechnung des instationären Ladungswechsels
von zündenden Mehrzylinder- Verbrennungs-
motoren)*
- Nr. 59 FORSCHUNG
J. Hoffmann, D. Prätzel-Wolters
*Controllability Tests for Behaviour Systems in AR-
Representations*
- Nr. 60 FORSCHUNG
M. Bäcker, H. Neunzert, S. Sundar, S. Younis
*A 2-D Kaniel Kinetic Scheme for the Isentropic
Compressible Flow*
- Nr. 61 FORSCHUNG
F.-J. Pfreundt, J. Struckmeier
*On the Efficiency of Simulation Methods for the
Boltzmann Equation on Parallel Computers*
- Nr. 62 FORSCHUNG
M. Schreiner
Weighted particles in the finite pointset method
- Nr. 63 FORSCHUNG
D. Prätzel-Wolters, R. Reinke
*Discrete Positive Real Systems and High Gain
Stability*

- Nr. 64 FORSCHUNG
J. Hoffmann, D. Prätzel-Wolters
Dipolynomial minimal bases and linear systems in AR-representation
- Nr. 65 FORSCHUNG
P. Krejci
Global behaviour of solutions to the wave equations with hysteresis
- Nr. 66 FORSCHUNG
P. Krejci
Asymptotic stability of periodic solutions to the wave equations with hysteresis
- Nr. 67 FORSCHUNG
J. Hoffmann, D. Prätzel-Wolters
Controllability Indices for Behaviour Systems in AR-Representations

1992

- Nr. 68 FORSCHUNG
S. Nikitin
Stabilizability of Nonlinear Systems
- Nr. 69 FORSCHUNG
S. Nikitin
Decoupling Normalizing Transformation and Local Stabilization of Nonlinear Systems
- Nr. 70 FORSCHUNG
R. Illner, W. Wagner
A Random Discrete Velocity Model and Approximation of the Boltzmann Equation
- Nr. 71 FORSCHUNG
L. Arkeryd, R. Illner
The Broadwell Model in a Box: Strong L1-Convergence to Equilibrium
- Nr. 72 FORSCHUNG
J. Weickert
A Mathematical Model for Diffusion and Exchange Phenomena in Ultra Napkins
- Nr. 73 FORSCHUNG
S. Rjasanow
Optimierung einer doppelwandigen Rohrleitung
- Nr. 74 FORSCHUNG
M. Brokate, K. Dressler, P. Krejci
On the Mróz Model
- Nr. 75 FORSCHUNG
S. Nikitin
Sensitivity of Luenberger observers, ϵ -observability and uncertainty relations
- Nr. 76 FORSCHUNG
M. Brokate, J. Theel
Some numerical simulations of pseudoelastic hysteresis in shape memory alloys
- Nr. 77 FORSCHUNG
S. Nikitin, A. Ilchmann, D. Prätzel-Wolters
Multiparameter, polynomial adaptive tracking for minimum phase systems
- Nr. 78 FORSCHUNG
S. Nikitin
Topological necessary conditions of smooth stabilization in the large
- Nr. 79 FORSCHUNG
J. Hoffmann, P.A. Fuhrmann
Remarks on orthogonal polynomials and balanced realizations
- Nr. 80 FORSCHUNG
P.A. Fuhrmann, R. Ober
State space formulas for coprime factorization

- Nr. 81 FORSCHUNG
P.A. Fuhrmann
An algebraic approach to Hankel norm approximation problems
- Nr. 82 FORSCHUNG
R. Ober, P.A. Fuhrmann
Diffeomorphisms between sets of linear systems
- Nr. 83 FORSCHUNG
J. Struckmeier, K. Steiner
Boltzmann simulations with axisymmetric geometry
- Nr. 84 FORSCHUNG
M. Reissel
On a transmission boundary-value problem for the time-harmonic Maxwell equations without displacement currents
- Nr. 85 FORSCHUNG
M. Reissel
Artificial boundary conditions for a transmission boundary-value problem for the time-harmonic Maxwell equations without displacement currents
- Nr. 86 FORSCHUNG
M. Reissel
On the equivalence of two transmission boundary-value problems for the time-harmonic Maxwell equations without displacement currents

1993

- Nr. 87 FORSCHUNG
K. Steiner
An Analysis of Baganoff's Shuffle Algorithm
- Nr. 88 FORSCHUNG
W. Freeden, T. Gervens, M. Schreiner
Tensor spherical harmonics and tensor spherical splines
- Nr. 89 FORSCHUNG
M. Hack
Construction of Particlesets to Simulate Rarefied Gases
- Nr. 90 FORSCHUNG
R. Illner, H. Neunzert
Domain decomposition: linking kinetic and aerodynamic descriptions
- Nr. 91 FORSCHUNG
J. Struckmeier, K. Steiner
A Comparison of Simulation Methods for Rarefied Gas Flows
- Nr. 92 FORSCHUNG
J. Fröhlich, K. Schneider
An Adaptive Wavelet Galerkin Algorithm for One and Two Dimensional Flame Computations
- Nr. 93 FORSCHUNG
J. Struckmeier
Fast Generation of Low-Discrepancy Sequences
- Nr. 94 FORSCHUNG
M. Reissel
3D Eddy-Current Computation Using Krylov Subspace Methods
- Nr. 95 FORSCHUNG
J. Franke, T. Subba Rao
Multivariate first-order integer-valued autoregressions
- Nr. 96 FORSCHUNG
H. Neunzert
Modelling and Numerical Simulation of Collisions

- Nr. 97 FORSCHUNG
W. Freeden, M. Schreiner
Nonorthogonal Expansions on the Sphere
- Nr. 98 FORSCHUNG
W. Freeden and R. Franke
Generalized Weighted Spline Approximation on the Sphere
- Nr. 99 FORSCHUNG
A.V. Bobylev
Exact Solutions of Discrete Kinetic Models and Stationary Problems for the Plane Broadwell Model
- Nr. 100 FORSCHUNG
J. Struckmeier
On a Kinetic Model for Shallow Water Waves

1994

- Nr. 101 FORSCHUNG
P. Prasad
A Nonlinear Ray Theory
- Nr. 102 FORSCHUNG
P.A. Fuhrmann, J. Hoffmann
Factorization theory for stable inner functions
- Nr. 103 FORSCHUNG
P.A. Fuhrmann, J. Hoffmann
On balanced realizations of bounded real and positive real functions
- Nr. 104 FORSCHUNG
J. Fröhlich, J. Weickert
Image Processing Using a Wavelet Algorithm for Nonlinear Diffusion
- Nr. 105 FORSCHUNG
M. Hack
Lifetime estimation in the car industry
- Nr. 106 FORSCHUNG
R. v. Sachs, K. Schneider
Wavelet smoothing of evolutionary spectra by non-linear thresholding
- Nr. 107 FORSCHUNG
J. Struckmeier
Generation of Random Variates Using Asymptotic Expansions
- Nr. 108 AUSBILDUNG
J. Struckmeier
Tutorial on Asymptotic Analysis I
- Nr. 109 FORSCHUNG
W. Freeden, M. Schreiner
A: *New Wavelet Methods for Approximating Harmonic Functions*
B: *Satellite Gradiometry - from Mathematical and Numerical Point of View*
- Nr. 110 FORSCHUNG
J. Weickert
Scale-Space Properties of Nonlinear Diffusion Filtering with a Diffusion Tensor
- Nr. 111 FORSCHUNG
Th. Grünholz
On the Computation of Stress in Stationary Loaded Journal Bearings
- Nr. 112 FORSCHUNG
H. Neunzert, J. Struckmeier
Boltzmann Simulation by Particle Methods

