Die Multipolmethode für Randintegralgleichungen

Diplomarbeit von Günther Of

Betreuung:
Dr. habil. O. Steinbach
Prof. Dr.-Ing. Dr. h. c. W. L. Wendland

Mathematisches Institut A
Universität Stuttgart
Oktober 2001

Vorwort

Bei der vorliegenden Arbeit handelt es sich um meine Diplomarbeit, die im Rahmen meines Mathematikstudiums in Stuttgart entstanden ist.

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr. h. c. W. L. Wendland und Herrn Dr. habil. O. Steinbach, die mir die Möglichkeit gegeben haben, mich mit diesem interessanten Thema zu beschäftigen. Außerdem möchte ich ihnen für die umfassende Betreuung und die zahlreichen Anregungen während der Entstehung dieser Arbeit danken.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

In den Naturwissenschaften und im Ingenieurswesen treten bei der Modellbildung vieler Probleme partielle Differentialgleichungen auf. Zur Lösung der Randwertprobleme für elliptische Differentialgleichungen werden hauptsächlich zwei Verfahren verwendet. Dabei handelt es sich um die Methode der finiten Elemente (FEM) und die Randelementmethode (BEM). Diese Methoden werden beispielsweise in [6] und [59] beschrieben.
Bei der Methode der finiten Elemente wird direkt aus der Differentialgleichung eine schwache Formulierung gewonnen. Dabei wird zur Diskretisierung das gesamte Berechnungsgebiet verwendet. Bei der Randelementmethode wird hingegen das Randwertproblem in eine Fredholmsche Integralgleichung erster oder zweiter Art auf dem Rand des betrachteten Gebietes transformiert. Diese Randintegralgleichung kann dann durch das Kollokationsverfahren oder das Galerkin–Verfahren diskretisiert werden. Dabei lassen sich für das Galerkin–Verfahren durch Anwendung der Theorie der finiten Elemente auf den Rand Resultate zur Konvergenz und zur Stabilität gewinnen.
Vorteile der Randelementmethode sind eine effiziente Behandlung von Außenraumproblemen und der einfachere Umgang mit komplizierten Geometrien. Der wesentlichste Vorteil der Randelementmethode liegt aber in der Dimensionsreduktion durch den Übergang vom Gebiet auf den Rand. Für die durch die Verwendung von endlichdimensionalen Ansatzräumen erhaltenen linearen Gleichungssysteme führt dies zu einer erheblich kleineren Dimension als bei der Methode der finiten Elemente.
Während durch die Verwendung lokaler Ansatzfunktionen bei der Methode der finiten Elemente eine schwachbesetzte Matrix entsteht, ist die Steifigkeitsmatrix bei der Randelementmethode vollbesetzt, da mit dem Übergang zu den Randintegralen der lokale Charakter der Differentialgleichungen verloren geht. Außerdem sind zur Bestimmung der einzelnen Matrixeinträge rechenintensive Auswertungen singulärer Integrale notwendig. Der Speicherbedarf für die vollbesetzte Matrix, sowie der hohe Rechenaufwand für ihre Bestimmung und die Lösung des linearen Gleichungssystems schränken die Anwendbarkeit der Randelementmethode für große Dimensionen zunächst wieder ein.
Den Ansatzpunkt zur Lösung dieses Problems bietet die Beobachtung, daß bei der Lösung linearer Gleichungssysteme mittels Iterationsverfahren die Matrix nicht explizit benötigt wird, sondern es genügt deren Wirkung auf einen Vektor. Dabei gilt es, sowohl den Speicherbedarf als auch den Rechenaufwand zu reduzieren. Hierzu gibt es verschiedene Verfahren, wie beispielsweise

1. Mosaik Skeleton (vgl. Tyrtyshnikov [67], Bebendorf [4]),
2. Multiskalenmethode (vgl. z.B. Schneider [60], Breuer [7]),
3. Panel Clustering (vgl. Hackbusch, Nowak [31], Sauter [58]) und
4. Multipolmethode (vgl. Rokhlin und Greengard [27, 28, 52]).

Während sich die Mosaik Skeleton Approximation algebraischer Mittel bedient, wird bei der Multiskalenmethode durch die Konstruktion geeigneter hierarchischer Basisfunktionen die Steifigkeitsmatrix durch eine schwach besetzte Matrix approximiert. Das Panel Clustering und die Multipolmethode erstellen eine hierarchische Unterteilung des Randes in Cluster und unterscheiden daran in Nah– und Fernfeld. Im Fernfeld wird dann der Kern der Randintegraloperatoren durch geeignete Entwicklungen approximiert. Durch eine geschickte Ausnutzung der erzeugten Hierarchie kann somit der gewünschte Geschwindigkeitsgewinn erzielt werden. Die Multipolmethode geht auf Rokhlin [52] zurück und ist ursprünglich ein Verfahren zur Teilchensimulation. Das Verfahren wurde dann in Arbeiten von Greengard und Rokhlin [27, 28, 29] weiterentwickelt und auch auf die Helmholtz–Gleichung ausgeweitet [30]. Bereits in den ersten Arbeiten wurden die verschieden Anwendungsmöglichkeiten des Verfahrens erkannt und auch die Anwendung auf das Nyströmverfahren vorgestellt. Inzwischen gibt es viele Arbeiten zur Multipolmethode. So wurden beispielsweise von Epton und Dembart [21] Fourier–Techniken eingeführt und von Rahola [51] eine Fehleranalysis durchgeführt. Mittlerweile existieren zahlreiche Anwendungen der Multipolmethode auf Integralgleichungen im Dreidimensionalen. So gibt es beispielsweise Anwendungen für die Laplace–Gleichung von Nabors, Korsmeyer, Leighton und White [47], für die Helmholtz–Gleichung von Giebermann [24] und für die Stokes–Gleichungen von Fu und Rodin [23].
Im Rahmen dieser Arbeit soll die Multipolmethode auf die Randelementmethode zur Behandlung gemischter Randwertprobleme mit der symmetrischen Randintegralformulierung angewandt werden. Als Modell dient die Laplace–Gleichung in drei Raumdimensionen. In der vorhandenen Literatur wird zwar immer wieder geschrieben, daß die einzelnen Randintegraloperatoren alle durch die Multipolmethode realisiert werden können, wie dies aber im einzelnen geschieht bleibt unerwähnt. Außerdem wird dann in den Beispielen meist nur das Dirichlet–Problem behandelt. Hier wird nun eine Möglichkeit zur Realisierung des Einfachschichtpotentials, des hypersingulären Operators, sowie des Doppelschichtpotentials und seines adjungierten Operators vorgestellt. Dabei wird der hypersinguläre Operator mittels partieller Integration durch das Einfachschichtpotential ausgedrückt. Die anderen drei Operatoren werden durch Umformungen und Erweiterungen der vorhandene Entwicklungen auf das Problem der Teilchensimulation zurückgeführt. Da für die Multipolmethode bisher nur Fehlerabschätzungen für die Teilchensimulation vorzuliegen scheinen, wird auch eine Konsistenz– und Fehleranalysis für die Approximation mittels der Multipolmethode vorgenommen. Außerdem wurde die Anwendung der Multipolmethode für das gemischte Randwertproblem des Laplace–Operators implementiert. Die erhaltenen numerischen Resultate bestätigen die theoretischen Ergebnisse sowohl in der Genauigkeit als auch in der Effizienz der Berechnungen.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

Im ersten Kapitel wird die Randelementmethode mit den notwendigen Räumen und Operatoren eingeführt. Dabei wird für das gemischte Randwertproblem die symmetrische Formulierung hergeleitet und mit Hilfe des Galerkin–Verfahrens diskretisiert. Außerdem werden einige allgemeine Ergebnisse zur Lösbarkeit und zu Fehlerabschätzungen zusammengestellt.

Die mathematischen Grundlagen der Multipolmethode werden in Kapitel 2 besprochen. Dabei werden insbesondere Reihenentwicklungen mittels der harmonische Kugelfunktionen sowie deren Translation und Konvertierung behandelt.

Daran anschließend erfolgt in Kapitel 3 die Beschreibung des Algorithmus der Multipolmethode für die Teilchensimulation und eine Aufwandsabschätzung.

Im vierten Kapitel werden weitere Eigenschaften der Entwicklungen nach Kugelfunktionen und Fehlerabschätzungen für ihre Versionen mit endlichem Entwicklungsgrad gezeigt. Diese werden für die Anwendung der Multipolmethode auf Randintegraloperatoren benötigt.

Das fünfte Kapitel beschäftigt sich dann mit der Realisierung der einzelnen Randintegraloperatoren mit Hilfe der Multipolmethode. Außerdem werden die notwendigen Anpassungen der Multipolmethode beschrieben.

Im sechsten Kapitel wird eine Konsistenz– und Fehleranalysis für das durch Verwendung der Multipolmethode gestörte Problem durchgeführt. Dabei wird die Konvergenz des Verfahrens und eine entsprechende Fehlerabschätzung gezeigt.

Zum Schluß werden im siebten Kapitel einige numerische Beispiele präsentiert und die theoretischen Erkenntnisse anhand numerischer Ergebnisse überprüft.

Anmerkung zur überarbeiteten Version:

Im wesentlichen wurden in der vorliegenden Version lediglich einige Rechtschreibfehler und kleinere Fehler wie beispielsweise in den Bezeichnungen oder bei der Indizierung korrigiert.

Kapitel 1

Randwertproblem und symmetrische Formulierung

1.1 Gemischtes Randwertproblem und Greensche Formeln

Für ein beschränktes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ mit stückweise glattem Lipschitz–Rand $\Gamma = \partial\Omega$ wird für einen elliptischen Differentialoperator 2. Ordnung

$$Lu(x) := -\sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_j}\left(a_{ji}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}u(x)\right) + \sum_{i=1}^{n} b_i(x)\frac{\partial}{\partial x_i}u(x) + c(x)u(x) \tag{1.1}$$

die lineare partielle Differentialgleichung

$$(Lu)(x) = f(x) \qquad \text{für } x \in \Omega \tag{1.2}$$

betrachtet. Sei $\overline{\Gamma} = \overline{\Gamma}_D \cup \overline{\Gamma}_N$ eine Zerlegung des Randes in disjunkte Teilränder. Gesucht wird die (vektorwertige) Lösung $u(x)$ des *gemischtes Randwertproblems*, d.h. die Funktion $u(x)$, die die partielle Differentialgleichung (1.2) unter Berücksichtigung der Randbedingungen

$$u(x) = g(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma_D, \tag{1.3}$$

$$(T_x u)(x) = p(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma_N \tag{1.4}$$

erfüllt. Dabei ist

$$(T_x u)(x) := \sum_{i,j=1}^{n} n_j(x)a_{ji}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}u(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma \tag{1.5}$$

die *Konormalenableitung* von $u(x)$, unter der Voraussetzung, daß der äußere Normalenvektor $\underline{n}(x)$ für $x \in \Gamma$ fast überall existiert. Mit der Bilinearform

$$\begin{aligned} a(u,v) = &\sum_{i,j=1}^{n} \int_\Omega \left[\frac{\partial}{\partial x_j}v(x)\right]^T a_{ji}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}u(x)dx \\ &+ \sum_{i=1}^{n}\int_\Omega [v(x)]^T b_i(x)\frac{\partial}{\partial x_i}u(x)dx + \int_\Omega [v(x)]^T c(x)u(x)dx \end{aligned} \tag{1.6}$$

gilt die *erste Greensche Formel*

$$a(u,v) = \int_\Omega [v(x)]^T (Lu)(x)dx + \int_\Gamma [v(x)]^T (T_x u)(x) ds_x. \tag{1.7}$$

Weiter ist der zum Differentialoperator L *formal adjungierte Differentialoperator* gegeben durch

$$L^* v(x) = -\sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x_j} v(x) \right) - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} [b_i(x) v(x)] + c(x) v(x) \tag{1.8}$$

mit der zugehörigen *Konormalenableitung*

$$(T_x^* v)(x) = \sum_{i,j=1}^n n_i(x) a_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x_j} v(x) + \sum_{i=1}^n n_i(x) b_i(x) v(x) \tag{1.9}$$

für $x \in \Gamma$ fast überall. Auch für diesen formal adjungierten Differentialoperator gilt die *erste Greensche Formel*

$$a(u,v) = \int_\Omega [u(x)]^T (L^* v)(x)dx + \int_\Gamma [u(x)]^T (T_x^* v)(x) ds_x. \tag{1.10}$$

Zusammen mit der Greenschen Formel (1.7) für den Differentialoperator L ergibt sich dann die *zweite Greensche Formel*:

$$\begin{aligned} \int_\Omega [u(x)]^T (L^* v)(x)dx &+ \int_\Gamma [u(x)]^T (T_x^* v)(x) ds_x \\ &= \int_\Omega [v(x)]^T (Lu)(x)dx + \int_\Gamma [v(x)]^T (T_x u)(x) ds_x. \end{aligned} \tag{1.11}$$

1.2 Darstellungsformel der Lösung der Differentialgleichung

Für Differentialoperatoren mit konstanten Koeffizienten (vgl. [34]) existiert die Lösung v^* der formal adjungierten partiellen Differentialgleichung im distributionellen Sinn,

$$L^* v^*(x) = \delta(0) \qquad \text{für } x \in \mathbb{R}^n,$$

und heißt *Fundamentallösung* von L^*. Setzt man nun

$$v(x) = U^*(y,x) = v^*(x-y) \qquad \text{für } x \in \mathbb{R}^n, y \in \Omega,$$

so gilt

$$\int_\Omega [u(x)]^T L_x^* U^*(y,x) dx = u(y) \qquad \text{für } y \in \Omega.$$

Durch Einsetzen in die zweite Greensche Formel (1.11) erhält man nach Vertauschen von x und y die *Darstellungsformel* für die Lösung $u(x)$ der partiellen Differentialgleichung (1.2) für $x \in \Omega$:

$$u(x) = \int_\Gamma [U^*(x,y)]^T (T_y u)(y) ds_y - \int_\Gamma [u(y)]^T T_y^* U^*(x,y) ds_y + \int_\Omega [U^*(x,y)]^T f(y) dy. \tag{1.12}$$

Sind die *Cauchy-Daten* $[u(x), (T_x u)(x)]$ für $x \in \Gamma$ vollständig bekannt, so ist mit der Darstellungsformel (1.12) die Lösung des Randwertproblems (1.2)–(1.4) vollständig beschrieben. Zu bestimmen bleiben die jeweils unbekannten Randdaten.
Unter Verwendung des *Einfachschichtpotentials*

$$(Vw)(x) := \int_\Gamma [U^*(x,y)]^T w(y) ds_y \qquad \text{für } x \in \Omega, \tag{1.13}$$

des *Doppelschichtpotentials*

$$(Wu)(x) := \int_\Gamma [T_y^* U^*(x,y)]^T u(y) ds_y \qquad \text{für } x \in \Omega, \tag{1.14}$$

des *Newtonpotentials*

$$(N_0 f)(x) := \int_\Omega [U^*(x,y)]^T f(y) dy \qquad \text{für } x \in \Omega \tag{1.15}$$

und der Konormalenableitung

$$t(x) := (T_x u)(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma \text{ fast überall},$$

lautet die Darstellungsformel (1.12):

$$u(x) = (Vt)(x) - (Wu)(x) + (N_0 f)(x) \qquad \text{für } x \in \Omega. \tag{1.16}$$

1.3 Sobolev–Räume

In diesem Abschnitt sollen nur die notwendigsten Definitionen eingeführt werden. Zum Thema Sobolev–Räume gibt es zahlreiche Literatur. So findet man eine ausführliche Darstellung beispielsweise in [1, 43].
Für den Multiindex $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ mit $|\alpha| = \sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i$ und $\alpha_i \geq 0$ für $i = 1, \ldots, n$ definiert

$$D^\alpha u(x) = \frac{\partial^{\alpha_1}}{\partial x_1^{\alpha_1}} \cdots \frac{\partial^{\alpha_n}}{\partial x_n^{\alpha_n}} u(x)$$

die *kartesische Ableitung* einer Funktion $u(x)$ mit $x \in \mathbb{R}^n$.

Definition 1.1 (Sobolev–Räume im Gebiet Ω)**.** Für ein Gebiet $\Omega \in R^n$ wird durch

$$H^m(\Omega) := \{v \in L_2(\Omega) : D^\alpha u \in L_2(\Omega) \text{ für alle } |\alpha| \leq m\}$$

der Sobolev–Raum $H^m(\Omega)$ für $m \in \mathbb{N}_0$ definiert. Als zugehörige Norm dient

$$\|u\|_{H^m(\Omega)} := \left\{ \sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|^2_{L^2(\Omega)} \right\}^{1/2}. \tag{1.17}$$

Für den Rand Γ ist durch

$$y = x + \varphi(x, \underline{t})\underline{n}(x) + \sum_{i=1}^{n-1} t_i \underline{e}_i \qquad \text{mit } \varphi(x, \underline{0}) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t_i}\varphi(x, \underline{t})\bigg|_{\underline{t}=\underline{0}} = 0$$

und den Tangentialvektoren $\underline{e}_i$ eine *lokale Parametrisierung* um den Punkt $x \in \Gamma$ gegeben. Mit den *kovarianten Ableitungen*

$$\partial_t^\alpha u(y) = \partial_t^\alpha u(x, t) = \partial_{t_1}^{\alpha_1} \dots \partial_{t_n}^{\alpha_n} u(x, t)$$

läßt sich die Sobolev–Norm somit auf den Rand übertragen (vgl. [59]).

Definition 1.2 (Sobolev–Räume auf dem Rand Γ)**.** Die Sobolev–Norm auf dem Rand läßt sich für $m \in \mathbb{N}_0$ durch

$$\|u\|_{H^m(\Gamma)} := \left\{ \sum_{|\alpha| \le m} \|\partial_t^\alpha u\|_{L^2(\Gamma)}^2 \right\}^{1/2} \tag{1.18}$$

definieren. Die zugehörigen Sobolev–Räume $H^m(\Gamma)$ auf dem Rand sind dann der Abschluß von $C^\infty(\Gamma)$ bzgl. der jeweiligen Norm $\|\cdot\|_{H^m(\Gamma)}$.

Definition 1.3 (Sobolev–Räume reeller Ordnungen)**.** Für $\Gamma \in C^{k-1,1}$ lassen sich die Sobolev–Räume $H^s(\Gamma)$ für $0 < s \le k$ mittels der Sobolev–Slobodeckii–Norm

$$\|u\|_{H^s(\Gamma)} := \left\{ \|u\|_{H^{[s]}(\Gamma)}^2 + |u|_{H^s(\Gamma)}^2 \right\}^{1/2} \tag{1.19}$$

und der Halbnorm

$$|u|_{H^s(\Gamma)}^2 := \sum_{|\alpha|=[s]} \int_\Gamma \int_\Gamma \frac{|\partial_t^\alpha u(x) - \partial_t^\alpha u(y)|^2}{|x-y|^{n-1+2\sigma}} ds_x ds_y \tag{1.20}$$

mit $s = [s] + \sigma$ und $\sigma \in (0, 1)$ definieren.
Für $0 > s \ge -k$ wird der Sobolev–Raum $H^s(\Gamma)$ über die Dualität des L_2–Skalarprodukts durch

$$H^s(\Gamma) = \left(H^{-s}(\Gamma)\right)'$$

mit der Norm

$$\|u\|_{H^s(\Gamma)} := \sup_{0 \ne v \in H^{-s}(\Gamma)} \frac{\left|\langle u, v \rangle_{L_2(\Gamma)}\right|}{\|v\|_{H^{-s}(\Gamma)}} \tag{1.21}$$

definiert.

Für das gemischte Randwertproblem werden Sobolev–Räume auf den beiden Teilrändern Γ_D und Γ_N benötigt. Daher müssen die bisherigen Definitionen erweitert werden.

Definition 1.4 (Sobolev–Räume auf einem Teilrand Γ_0)**.** Für einen Teilrand $\Gamma_0 \subset \Gamma$ werden die Sobolev–Räume der Ordnung $s \ge 0$ durch

$$H^s(\Gamma_0) := \{u = U_{|\Gamma_0} : U \in H^s(\Gamma)\}, \tag{1.22}$$

$$\widetilde{H}^s(\Gamma_0) := \{u \in H^s(\Gamma_0) \wedge \operatorname{supp} u \subset \overline{\Gamma}_0\} \tag{1.23}$$

mit der Norm

$$\|u\|_{H^s(\Gamma_0)} := \inf \{\|U\|_{H^s(\Gamma)} : U \in H^s(\Gamma) \wedge U_{|\Gamma_0} = u\} \tag{1.24}$$

definiert. Für $s < 0$ wird zur Definition der Sobolev–Räume auf einem Teilrand Γ_0 wieder die Dualität verwendet:

$$\begin{aligned} H^s(\Gamma_0) &:= \left(\widetilde{H}^{-s}(\Gamma_0)\right)', \\ \widetilde{H}^s(\Gamma_0) &:= \left(H^{-s}(\Gamma_0)\right)'. \end{aligned}$$

Lemma 1.1. *Für $\tau \leq \sigma$ sind die Einbettungen*

$$H^\tau(\Omega) \subset H^\sigma(\Omega) \quad \textit{und} \quad H^\tau(\Gamma) \subset H^\sigma(\Gamma) \tag{1.25}$$

stetig.

Beweis. Siehe [1, 43]. □

1.4 Herleitung der symmetrischen Formulierung

Die Cauchy-Daten $[u(x), (T_x u)(x)]$ für $x \in \Gamma$ des gemischten Randwertproblems (1.2)-(1.4) sind nicht vollständig bekannt. Diese lassen sich aber aus *Randintegralgleichungen* bestimmen, die im folgenden aus der Darstellungsformel (1.16) hergeleitet werden.
Zunächst bestimmt man für $\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Gamma$ die Grenzwerte des Einfachschichtpotentials

$$(Vw)(x) := \lim_{\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Gamma} (Vw)(\widetilde{x}) = \int_\Gamma [U^*(x,y)]^T w(y) ds_y, \tag{1.26}$$

des Newtonpotentials

$$(N_0 f)(x) := \lim_{\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Gamma} (N_0 f)(\widetilde{x}) = \int_\Omega [U^*(x,y)]^T f(y) dy \tag{1.27}$$

und des Doppelschichtpotentials

$$\lim_{\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Gamma} (Wu)(\widetilde{x}) = -\frac{1}{2} u(x) + (Ku)(x) \tag{1.28}$$

mit

$$\begin{aligned} (Ku)(x) &:= ⨍_\Gamma [T_y^* U^*(x,y)]^T u(y) ds_y \\ &= \lim_{\rho \to 0} \int_{\|y-x\| \geq \rho,\ y \in \Gamma} [T_y^* U^*(x,y)]^T u(y) ds_y. \end{aligned} \tag{1.29}$$

Dabei handelt es sich bei (1.28) um die Sprungrelation für das Doppelschichtpotential unter der Voraussetzung, daß der Punkt x auf einem glatten Randstück liegt. Beim Grenzübergang $\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Gamma$ für die Darstellungsformel (1.16) erhält man dann die Randintegralgleichung

$$(Vt)(x) = \frac{1}{2} u(x) + (Ku)(x) - (N_0 f)(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma. \tag{1.30}$$

Um den Operator T_x auf die Darstellungsformel (1.16) anwenden und anschließend den Grenzübergang nach Γ durchführen zu können, werden durch

$$\lim_{\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Gamma} T_x(Vw)(\widetilde{x}) = \frac{1}{2} w(x) + (K'w)(x) \tag{1.31}$$

mit

$$(K'w)(x) := \fint_\Gamma [T_x^* U^*(x,y)]^T w(y) ds_y \tag{1.32}$$

das *adjungierte Doppelschichtpotential* für $x \in \Gamma$ und durch

$$\lim_{\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Gamma} T_x(Wu)(x) = T_x \int_\Gamma u(y) T_y^* U^*(x,y) ds_y =: -(Du)(x) \tag{1.33}$$

der *hypersinguläre Integraloperator* für $x \in \Gamma$ definiert. Außerdem sei

$$(N_1 f)(x) := \lim_{\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Gamma} T_x(N_0 f)(\widetilde{x}) \qquad \text{für } x \in \Gamma. \tag{1.34}$$

Die Anwendung des Operators T_x und der anschließende Grenzübergang liefern dann eine zweite (hypersinguläre) Randintegralgleichung:

$$(Du)(x) = \frac{1}{2} t(x) - (K't)(x) - (N_1 f)(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma. \tag{1.35}$$

Gemeinsam beschreiben (1.30) und (1.35) für $x \in \Gamma$ ein System von Randintegralgleichungen

$$\begin{pmatrix} u \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}I - K & V \\ D & \frac{1}{2}I + K' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} N_0 f \\ N_1 f \end{pmatrix} \tag{1.36}$$

mit dem Calderon–Projektor

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}I - K & V \\ D & \frac{1}{2}I + K' \end{pmatrix}. \tag{1.37}$$

Satz 1.2 (Abbildungseigenschaften)**.** *Für ein Gebiet Ω mit einem Lipschitz–Rand $\Gamma = \partial\Omega$ besitzen die Randintegraloperatoren für $|s| \le \frac{1}{2}$ folgende Abbildungseigenschaften*

$$\begin{aligned}
V:&\quad H^{-\frac{1}{2}+s}(\Gamma) \to H^{\frac{1}{2}+s}(\Gamma),\\
K:&\quad H^{\frac{1}{2}+s}(\Gamma) \to H^{\frac{1}{2}+s}(\Gamma),\\
K':&\quad H^{-\frac{1}{2}+s}(\Gamma) \to H^{-\frac{1}{2}+s}(\Gamma),\\
D:&\quad H^{\frac{1}{2}+s}(\Gamma) \to H^{-\frac{1}{2}+s}(\Gamma).
\end{aligned}$$

Beweis. Siehe [14, 68]. □

Zur Vervollständigung der Cauchy–Daten sind $u(x)_{|\Gamma_N}$ und $t(x)_{|\Gamma_D}$ zu bestimmen. Nun gilt es, geeignete Fortsetzungen $\widetilde{g} \in H^{1/2}(\Gamma)$ und $\widetilde{p} \in H^{-1/2}(\Gamma)$ der gegebenen Randdaten auf den gesamten Rand mit

$$\widetilde{g}(x) = g(x) \text{ für } x \in \Gamma_D, \quad \widetilde{p}(x) = p(x) \text{ für } x \in \Gamma_N$$

zu wählen. Mit den Ansätzen

$$u(x) = \widetilde{u}(x) + \widetilde{g}(x), \quad t(x) = \widetilde{t}(x) + \widetilde{p}(x)$$

sind also Funktionen $\widetilde{u} \in \widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)$ und $\widetilde{t} \in \widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)$ zu bestimmen, d.h.

$$\widetilde{u}(x) = 0 \text{ für } x \in \Gamma_D, \quad \widetilde{t}(x) = 0 \text{ für } x \in \Gamma_N.$$

Verwendet man diese Ansätze mit der Randintegralgleichung (1.30) für $x \in \Gamma_D$ und der hypersingulären Randintegralgleichung (1.35) für $x \in \Gamma_N$, so erhält man die *symmetrische Formulierung*:

$$\begin{aligned} (V\widetilde{t})(x) - (K\widetilde{u})(x) &= (\frac{1}{2}I + K)\widetilde{g}(x) - (V\widetilde{p})(x) - (N_0 f)(x) =: f_1(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma_D, \\ (K'\widetilde{t})(x) + (D\widetilde{u})(x) &= (\frac{1}{2}I - K')\widetilde{p}(x) - (D\widetilde{g})(x) - (N_1 f)(x) =: f_2(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma_N. \end{aligned} \tag{1.38}$$

Dabei handelt es sich um ein System von Fredholmschen Integralgleichungen erster Art.

1.5 Variationsformulierung

Sei $(Z, \|\cdot\|_Z)$ ein *Hilbert–Raum*. Gesucht wird die Lösung $u \in Z$ der *Operatorgleichung*

$$Au = f \tag{1.39}$$

für ein gegebenes $f \in Z'$ und einen Operator $A : Z \to Z'$. Diese Gleichung ist äquivalent zur Variationsformulierung

$$a(u, v) = f(v) \qquad \text{für alle } v \in Z \tag{1.40}$$

mit der Bilinearform

$$a(u, v) := \langle Au, v \rangle$$

und der Linearform

$$f(v) := \langle f, v \rangle.$$

Dabei bezeichnet $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das Dualitätsprodukt zwischen Z und Z'.

Definition 1.5. Eine Bilinearform $a : Z \times Z \to \mathbb{R}$ heißt *beschränkt*, wenn

$$|a(u, v)| \le c_2^a \|u\|_Z \|v\|_Z$$

mit einer Konstanten $c_2^a > 0$ für alle $u, v \in Z$ erfüllt ist. Eine Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ heißt *Z-elliptisch*, wenn es eine Konstante $c_1^a > 0$ gibt, so daß

$$a(v, v) \ge c_1^a \|v\|_Z^2 \tag{1.41}$$

für alle $v \in Z$ gilt.

Für die Lösung der Operatorgleichung (1.39) bzw. der Variationsformulierung (1.40) gilt der folgende Satz.

Satz 1.3 (Lax–Milgram). *Für einen Hilbert–Raum Z sei $a : Z \times Z \to \mathbb{R}$ eine beschränkte und Z–elliptische Bilinearform. Dann existiert für die Variationsformulierung (1.40) bzw. die Operatorgleichung (1.39) für jedes $f \in Z'$ eine eindeutige Lösung $u \in Z$, für die gilt:*

$$\|u\|_Z \leq \frac{1}{c_1^a} \|f\|_{Z'} . \tag{1.42}$$

Beweis. Siehe [6, 43, 66]. □

Für den Hilbert–Raum $Z := \widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N) \times \widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)$ mit der Norm

$$\|(v,\tau)\|_Z := \left(\|v\|^2_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} + \|\tau\|^2_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} \right)^{1/2}$$

werden im Fall der symmetrischen Formulierung (1.38) die Funktionen $(\widetilde{u}, \widetilde{t}) \in Z$ als Lösung der *Galerkin–Variationsformulierung*

$$a(\widetilde{u}, \widetilde{t}; v, \tau) = f(v,\tau) \qquad \text{für alle } (v,\tau) \in Z \tag{1.43}$$

gesucht. Dabei sind die Bilinearform als

$$a(\widetilde{u}, \widetilde{t}; v, \tau) = \langle V\widetilde{t}, \tau \rangle_{L_2(\Gamma_D)} - \langle K\widetilde{u}, \tau \rangle_{L_2(\Gamma_D)} + \langle K'\widetilde{t}, v \rangle_{L_2(\Gamma_N)} + \langle D\widetilde{u}, v \rangle_{L_2(\Gamma_N)} \tag{1.44}$$

und die Linearform als

$$\begin{aligned} f(v,\tau) \ &= \langle (\frac{1}{2}I + K)\widetilde{g}, \tau \rangle_{L_2(\Gamma_D)} - \langle V\widetilde{p}, \tau \rangle_{L_2(\Gamma_D)} - \langle N_0 f, \tau \rangle_{L_2(\Gamma_D)} \\ &\quad + \langle (\frac{1}{2}I - K')\widetilde{p}, v \rangle_{L_2(\Gamma_N)} - \langle D\widetilde{g}, v \rangle_{L_2(\Gamma_N)} - \langle N_1 f, v \rangle_{L_2(\Gamma_N)} \end{aligned} \tag{1.45}$$

definiert. Die Randintegraloperatoren V, D und K bzw. K' sind alle auf den jeweiligen Teilrändern beschränkt, d.h. es gilt

$$\begin{aligned} \langle Vt, \tau \rangle_{L_2(\Gamma_D)} &\leq c_2^V \|t\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} \|\tau\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} , \\ \langle Ku, \tau \rangle_{L_2(\Gamma_D)} &\leq c_2^K \|u\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \|\tau\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} , \\ \langle K't, v \rangle_{L_2(\Gamma_N)} &\leq c_2^K \|\tau\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} \|v\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} , \\ \langle Du, v \rangle_{L_2(\Gamma_N)} &\leq c_2^D \|u\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \|v\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \end{aligned}$$

für alle $u, v \in \widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)$ und $t, \tau \in \widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)$ (vgl. [43]). Außerdem sind sowohl das Einfachschichtpotential als auch der hypersinguläre Integraloperator elliptisch, d.h.

$$\begin{aligned} \langle V\tau, \tau \rangle_{L_2(\Gamma_D)} &\geq c_1^V \|\tau\|^2_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} , \\ \langle Dv, v \rangle_{L_2(\Gamma_N)} &\geq c_1^D \|v\|^2_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \end{aligned}$$

für alle $\tau \in \widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)$ bzw. $v \in \widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)$ (vgl. [43, 59]). Aus diesen Eigenschaften der Randintegraloperatoren läßt sich folgendes Resultat gewinnen.

Lemma 1.4. *Für einen selbstadjungierten Differentialoperator $L = L^*$ ist die zur symmetrischen Formulierung gehörende Bilinearform (1.44) beschränkt und Z–elliptisch, d.h. für alle $(u,t), (v,\tau) \in Z$ gilt:*

$$|a(u,t;v,\tau)| \leq 2 \cdot \max\{c_2^V, c_2^D, c_2^K\} \cdot \|(u,t)\|_Z \|(v,\tau)\|_Z , \tag{1.46}$$

$$a(v,\tau;v,\tau) \geq \min\{c_1^V, c_1^D\} \cdot \|(v,\tau)\|^2_Z . \tag{1.47}$$

Beweis. Aus der Beschränktheit der einzelnen Integraloperatoren folgt unter Verwendung der Ungleichung

$$a+b \leq \sqrt{2}\cdot (a^2+b^2)^{1/2} \qquad \text{für alle } 0 \leq a,b \in \mathbb{R}$$

die Beschränktheit der Bilinearform:

$$\begin{aligned}
|a(u,t;v,\tau)| &\leq |\langle Vt,\tau\rangle_{L_2(\Gamma_D)}| + |\langle Ku,\tau\rangle_{L_2(\Gamma_D)}| + |\langle K't,v\rangle_{L_2(\Gamma_N)}| + |\langle Du,v\rangle_{L_2(\Gamma_N)}| \\
&\leq c_2^V \|t\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} \|\tau\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} + c_2^K \|u\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \|\tau\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} \\
&\quad + c_2^K \|v\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \|t\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} + c_2^D \|u\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \|v\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \\
&\leq \max\{c_2^V, c_2^K, c_2^D\} \cdot \left(\|u\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} + \|t\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)}\right) \\
&\qquad \cdot \left(\|v\|_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} + \|\tau\|_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)}\right) \\
&\leq 2\cdot \max\{c_2^V, c_2^K, c_2^D\} \cdot \|(u,t)\|_Z \, \|(v,\tau)\|_Z \,.
\end{aligned}$$

Für den Nachweis der Z–Elliptizität genügt wegen der Schiefsymmetrie der Bilinearform die Elliptizität des Einfachschichtpotentials V und des hypersingulären Integraloperators D:

$$\begin{aligned}
a(v,\tau;v,\tau) &= \langle V\tau,\tau\rangle_{L_2(\Gamma_D)} + \langle Dv,v\rangle_{L_2(\Gamma_N)} \\
&\geq c_1^V \|\tau\|^2_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D)} + c_1^D \|\tau\|^2_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \\
&\geq \min\{c_1^V, c_1^D\} \cdot \|(v,\tau)\|_Z^2 \,.
\end{aligned}$$

□

Gemeinsam mit dem Satz 1.3 von Lax–Milgram liefert dies nun das folgende Resultat.

Folgerung 1.5. *Die Variationsformulierung (1.43) besitzt eine eindeutige Lösung* $(\widetilde{u},\widetilde{t}) \in Z$ *mit*

$$\left\|(\widetilde{u},\widetilde{t})\right\|_Z \leq \frac{1}{c_1^a} \|(g,p)\|_{Z'} \,. \tag{1.48}$$

1.6 Diskretisierung der symmetrischen Formulierung

Sei eine Randdiskretisierung $\Gamma_h = \bigcup_{l=1}^{N} \tau_l$ mit Dreiecken τ_l als Randelementen gegeben. Dabei wird vorausgesetzt, daß benachbarte Dreiecke entweder eine Kante oder einen Knoten gemeinsam haben. Zusätzlich müssen die Dreiecke die Winkelbedingung erfüllen, d.h. es gibt einen Winkel $\theta_0 > 0$, so daß für alle Winkel θ_i der Dreiecke $\theta_0 \leq \theta_i \leq \pi - \theta_0$ gilt. Über die Flächeninhalte Δ_i der Dreiecke läßt sich die Maschenweite

$$h = \Delta_{\max}^{1/2} = \max_{i=1,\ldots,N} \Delta_i^{1/2} \tag{1.49}$$

einführen. Für die vorliegende Randdiskretisierung bezeichne

$$S_h^{d,r}(\Gamma_h) := \operatorname{span}\{\varphi_j\}_{j=1}^m \subset C^{r-1}(\Gamma_h)$$

den Raum der Basisfunktionen φ_j, die lokal auf jedem Randelement τ_l den Polynomgrad $d-1$ besitzen. Die eingeführten Räume besitzen die folgenden wichtigen Eigenschaften.

Lemma 1.6 (inverse Ungleichung). *Für alle $v_h \in S_h^{d,r}(\Gamma)$ gilt die inverse Ungleichung*

$$\|v_h\|_{H^\tau(\Gamma)} \leq c_I h^{s-\tau} \|v_h\|_{H^s(\Gamma)} \tag{1.50}$$

mit $s \leq \tau < r + \frac{1}{2}$.

Beweis. Siehe [59]. □

Lemma 1.7 (Approximationseigenschaft). *Bei einem Ansatzraum $V_h \subset S_h^{d,r}(\Gamma)$ gilt für alle $v \in H^\sigma(\Gamma)$ die Abschätzung*

$$\inf_{v_h \in V_h} \|v - v_h\|_{H^\tau(\Gamma)} \leq c_A h^{\sigma-\tau} \|v\|_{H^\sigma(\Gamma)} \tag{1.51}$$

mit $\tau < r + \frac{1}{2}$ und $\tau \leq \sigma < d$.

Beweis. Siehe [59]. □

Der folgende Satz macht eine Aussage über die Lösbarkeit des diskretisierten Problems.

Satz 1.8 (Ceas Lemma). *Sei Z ein Hilbert–Raum und $a : Z \times Z \to \mathbb{R}$ eine beschränkte und Z–elliptische Bilinearform. Außerdem sei noch f eine beschränkte Linearform auf Z und $Z_h = span\ \{\varphi_j, j = 1, \ldots, N\}$ ein endlichdimensionaler Test– und Ansatzraum. Dann sind die diskrete Variationsformulierung*

$$a(u_h, v_h) = f(v_h) \qquad \text{für alle } v_h \in Z_h$$

und das äquivalente lineare Gleichungssystem

$$A_h \underline{u}_h = \underline{f} \quad \text{mit } A_h[l,k] = a(\varphi_k, \varphi_l),\ \ f_l = f(\varphi_l)$$

eindeutig lösbar. Dabei gilt für die Näherungslösung $u_h \in Z_h \subset Z$

$$\|u_h\|_Z \leq \frac{1}{c_1^a} \|f\|_{Z'}, \tag{1.52}$$

sowie die quasi–optimale Fehlerabschätzung zur Lösung u des Variationsproblems (1.40)

$$\|u - u_h\|_Z \leq \frac{c_2^a}{c_1^a} \inf_{v_h \in Z_h} \|u - v_h\|_Z. \tag{1.53}$$

Für die symmetrische Formulierung (1.38) dient $Z_h := V_h \times W_h$ mit den endlichdimensionalen Räumen

$$\begin{aligned} V_h &= \mathrm{span}\{\psi_k\}_{k=1}^m \subset S_h^{\mu+1,r_2}(\Gamma_h) \subset \widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N), \\ W_h &= \mathrm{span}\{\varphi_l\}_{l=1}^n \subset S_h^{\nu+1,r_1}(\Gamma_h) \subset \widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_D) \end{aligned}$$

mit stückweise polynomialen Ansatzfunktionen vom Grad μ bzw. ν als Test– und Ansatzraum. Daraus ergeben sich die Ansätze

$$\begin{aligned} \widetilde{u}_h(x) &= \sum_{i=1}^m \widetilde{u}_i \psi_i(x), \\ \widetilde{t}_h(x) &= \sum_{k=1}^n \widetilde{t}_k \varphi_k(x). \end{aligned}$$

Somit wird die Lösung $(\widetilde{u}_h, \widetilde{t}_h) \in Z_h$ der *diskreten Galerkin–Variationsformulierung*

$$a(\widetilde{u}_h, \widetilde{t}_h; v_h, \tau_h) = f(v_h, \tau_h) \qquad \text{für alle } (v_h, \tau_h) \in Z_h \tag{1.54}$$

gesucht.

Satz 1.9. *Seien $\widetilde{u} \in H^\varrho(\Gamma)$ und $\widetilde{t} \in H^\alpha(\Gamma)$ die Lösungen der Variationsformulierung (1.43). Für die oben gewählten Ansatzräume V_h und W_h ist die Variationsformulierung (1.54) eindeutig lösbar, und es gilt die Fehlerabschätzung*

$$\|\widetilde{u} - \widetilde{u}_h\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)} + \left\|\widetilde{t} - \widetilde{t}_h\right\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} \leq c \cdot \left\{ h^{2\sigma-1} \|\widetilde{u}\|^2_{H^\sigma(\Gamma)} + h^{2s+1} \left\|\widetilde{t}\right\|^2_{H^s(\Gamma)} \right\} \tag{1.55}$$

für $-1/2 \leq s \leq \min\{\alpha, \nu+1\}$ *und* $1/2 \leq \sigma \leq \min\{\varrho, \mu+1\}$.

Beweis. Aufgrund der bereits in Lemma 1.4 gezeigten Eigenschaften der Bilinearform ist die Variationsformulierung (1.54) nach Ceas Lemma (Satz 1.8) eindeutig lösbar, und es gilt die quasi–optimale Fehlerabschätzung:

$$\left\|(\widetilde{u} - \widetilde{u}_h, \widetilde{t} - \widetilde{t}_h)\right\|_Z \leq c \cdot \inf_{(v_h,\tau_h)\in Z_h} \left\|(\widetilde{u} - v_h, \widetilde{t} - \tau_h)\right\|_Z .$$

Durch Einsetzen der Approximationseigenschaften (1.51) der beiden Ansatzräume erhält man die gesuchte Fehlerabschätzung (1.55). □

Bemerkung 1.1. Falls eine hinreichende Regularität der Lösung gegeben ist, lassen sich maximal $s = \nu + 1$ und $\sigma = \mu + 1$ wählen, und es gilt:

$$\|\widetilde{u} - \widetilde{u}_h\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)} + \left\|\widetilde{t} - \widetilde{t}_h\right\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} \leq c \cdot \left\{ h^{2\mu+1} \|\widetilde{u}\|^2_{H^{\mu+1}(\Gamma)} + h^{2\nu+3} \left\|\widetilde{t}\right\|^2_{H^{\nu+1}(\Gamma)} \right\}. \tag{1.56}$$

Dann erhält man eine optimale Konvergenzrate für $\mu = \nu + 1$. Also kann man z.B. stückweise lineare ($\mu = 1$) und stückweise konstante Ansatzfunktionen ($\nu = 0$) wählen.

Aus der diskreten Variationsformulierung (1.54) erhält man das äquivalente lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} V_h & -K_h \\ K'_h & D_h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\widetilde{t}}_h \\ \underline{\widetilde{u}}_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{f}_1 \\ \underline{f}_2 \end{pmatrix}. \tag{1.57}$$

Dabei gilt für die einzelnen Blöcke mit $k, l = 1, \ldots, m$ und $i, j = 1, \ldots, \widetilde{m}$

$$V_h[l,k] = \langle V\varphi_k, \varphi_l \rangle_{L_2(\Gamma_D)}, \tag{1.58}$$
$$K_h[l,i] = \langle K\psi_i, \varphi_l \rangle_{L_2(\Gamma_D)}, \tag{1.59}$$
$$K'_h[j,k] = \langle K'\varphi_k, \psi_j \rangle_{L_2(\Gamma_N)}, \tag{1.60}$$
$$D_h[j,i] = \langle D\psi_i, \psi_j \rangle_{L_2(\Gamma_N)}. \tag{1.61}$$

Die Matrix V_h geht aus der Diskretisierung des Einfachschichtpotentials auf dem Dirichlet–Rand Γ_D hervor, und die Matrix D_h bezieht sich auf die Diskretisierung des hypersingulären Operators bezüglich des Neumann–Randes Γ_N. Für die Matrix K_h ist das Doppelschichtpotential bezüglich der Ansatzfunktionen ψ_j des Neumann–Randes Γ_N auf dem Dirichlet–Rand Γ_D auszuwerten. Hier zeigt sich nun ein großer Nachteil der Randelementmethode. In den

Randintegraloperatoren geht der lokale Charakter der Differentialgleichung verloren. Daher ist die Matrix des linearen Gleichungssystems (1.57) vollbesetzt. Außerdem gilt $K_h' = K_h^T$:

$$\begin{aligned}
K_h[l,k] &= \langle K\psi_k, \varphi_l\rangle_{L_2(\Gamma_D)} \\
&= \int_{\Gamma_D}\int_{\Gamma_N} T_y U^*(x,y)\psi_k(y)\varphi_l(x)ds_y ds_x \\
&= \int_{\Gamma_N} T_y \left(\int_{\Gamma_D} U^*(x,y)\varphi_l(x)ds_x\right)\psi_k(y)ds_y \\
&= \langle K'\varphi_l, \psi_k\rangle_{L_2(\Gamma_N)} \\
&= K_h'[k,l].
\end{aligned}$$

Für einen selbstadjungierten Differentialoperator $L = L^*$ ist die Steifigkeitsmatrix in (1.57) blockschiefsymmetrisch und positiv definit. Die Dimension des linearen Gleichungssystems ist die Summe der Anzahl m der unbekannten Neumann–Freiheitsgrade und der Anzahl $\widetilde{m}$ der unbekannten Dirichlet–Freiheitsgrade. Der Lastvektor ergibt sich aus

$$f_{1,l} = \langle(\frac{1}{2}I + K)\widetilde{g}(x) - (V\widetilde{p})(x) - (N_0 f)(x), \varphi_l\rangle_{L_2(\Gamma_D)}, \tag{1.62}$$

$$f_{2,j} = \langle(\frac{1}{2}I - K')\widetilde{p}(x) - (D\widetilde{g})(x) - (N_1 f)(x), \psi_j\rangle_{L_2(\Gamma_N)}. \tag{1.63}$$

Approximiert man nun noch mittels eines geeigneten Verfahrens (z.B. Interpolation) die Fortsetzungen $\widetilde{g}(x)$ und $\widetilde{p}(x)$ durch die zugehörigen Ansatzfunktionen auf dem kompletten Rand, so erhält man für $f(x) = 0$ die Darstellung

$$\begin{pmatrix} V_h & -K_h \\ K_h^T & D_h \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \underline{\widetilde{t}}_h \\ \underline{\widetilde{u}}_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\hat{V}_h & \frac{1}{2}I + \hat{K}_h \\ \frac{1}{2}I - \hat{K}_h^T & -\hat{D}_h \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \underline{\widetilde{p}} \\ \underline{\widetilde{g}} \end{pmatrix}. \tag{1.64}$$

Allerdings müssen für die rechte Seite die zugehörigen Potentiale auf jeweils den anderen Teilrändern als bei der Berechnung der Steifigkeitsmatrix ausgewertet werden. Die entsprechenden Blockmatrizen entsprechen daher nicht den Blockmatrizen der Steifigkeitsmatrix.

1.7 Anwendung auf den Laplace–Operator

In den folgenden Kapiteln soll speziell das gemischte Randwertproblem (Zaremba–Problem) des Laplace–Operators mit $L^* = L$

$$\begin{aligned}
(Lu)(x) = -\Delta u(x) = 0 \qquad & \text{für } x \in \Omega, \\
u(x) = g(x) \qquad & \text{für } x \in \Gamma_D, \\
(T_x u)(x) = p(x) \qquad & \text{für } x \in \Gamma_N
\end{aligned} \tag{1.65}$$

mit der Konormalenableitung

$$(T_x u)(x) = \underline{n}(x)\cdot\nabla u(x) = \sum_{i=1}^{n} n_i(x)\frac{\partial}{\partial x_i}u(x) = (T_x^* u)(x) \qquad \text{für } x \in \Gamma. \tag{1.66}$$

betrachtet werden. Die Fundamentallösung für den Laplace–Operator lautet

$$U^*(x,y) = \frac{1}{4\pi}\frac{1}{\|x-y\|}. \tag{1.67}$$

Kapitel 2

Mathematische Grundlagen der Multipolmethode

Entsprechend früherer Überlegungen sind die Steifigkeitsmatrizen der Randintegraloperatoren vollbesetzt. Bei einem Ansatzraum aus N Basisfunktionen ist daher für ihre Erstellung ein Aufwand von $\mathcal{O}(N^2)$ erforderlich. Zur Speicherung der Matrizen werden N^2 Speicherplätze benötigt, und für jede Matrixmultiplikation sind N^2 Multiplikationen notwendig. Dadurch ist die Randelementmethode zunächst nur für relativ kleine Dimensionen N anwendbar.
Dieses Problem soll nun dadurch behoben werden, daß die Randintegraloperatoren bzw. ihre Steifigkeitsmatrizen mit der Multipolmethode realisiert werden. Dadurch reduziert sich der Speicherbedarf auf $\mathcal{O}(N \log^2 N)$, und der Rechenaufwand für eine Matrixmultiplikation geht auf $\mathcal{O}(N \log^2 N)$ zurück. Somit kann das lineare Gleichungssystem (1.64) mit einem Iterationsverfahren erheblich schneller als mit der vollbesetzten Matrix gelöst werden.
Als Grundlage dient die Fast Multipole Method (FMM) von L. Greengard und V. Rokhlin (vgl. [27, 28]). Die Fast Multipole Method ist zunächst ein Verfahren zur Berechnung des Potentialfeldes eines Systems von N Ladungsteilchen.
Die Multipolmethode stellt das Potential der Teilchen durch Reihenentwicklungen dar. Diese lassen sich in andere Entwicklungspunkte verschieben und aufsummieren. Dadurch lassen sich die Potentiale mehrerer Ladungen zusammenfassen. Durch geschicktes Ausnutzen dieser Möglichkeiten und eine geeignete hierarchische Gruppierung der Teilchen gelingt die gewünschte Reduktion des Aufwands. Die Multipolmethode wird zur Berechnung des Potentials, das von weit genug entfernten Ladungsteilchen ausgeht, benützt. Interaktionen zwischen naheliegenden Teilchen werden direkt berechnet.
In diesem Kapitel werden nun die mathematischen Grundlagen der Multipolmethode dargestellt. Der Algorithmus zur Multipolmethode wird dann im Kapitel 3 eingeführt. Dort erfolgt auch die Aufwandsabschätzung. Der Geschwindigkeitsvorteil der Multipolmethode soll später für die Randelementmethode genutzt werden. Die Realisierung der Steifigkeitsmatrizen der Randintegraloperatoren mittels der Multipolmethode wird in Kapitel 5 dargestellt. Da die Multipolmethode nicht direkt für die Realisierung von Randintegraloperatoren entwickelt wurde, müssen einige Erweiterungen vorgenommen werden. Diese werden in Kapitel 4 besprochen.

2.1 Das Potentialfeld einer Ladung und Legendre–Polynome

Im Sinn einer einfachen und klaren Darstellung werden in den Kapiteln zur Multipolmethode Vektoren mit $\underline{x}$ dargestellt. Der zugehörige normierte Vektor wird mit $\underline{\hat{x}}$ bezeichnet. Eine ausführliche Behandlung der Legendre–Polynome findet man in [33].

Lemma 2.1. *Die Legendre–Polynome*

$$\begin{aligned} P_n(u) &:= \sum_{k=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{(2n-2k)!}{2^n (n-k)! k! (n-2k)!} (-1)^k u^{n-2k} && (2.1) \\ &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{du^n} \left(u^2-1\right)^n && (2.2) \end{aligned}$$

sind eine Lösung der Legendre–Differentialgleichung

$$(1-u^2)\frac{d^2}{du^2}v(u) - 2u\frac{d}{du}v(u) + n(n+1)v(u) = 0. \qquad (2.3)$$

Dabei ist (2.2) auch als Rodrigues–Formel bekannt.

Beweis. Die Lösung der Legendre–Gleichung kann mit dem Potenzreihenansatz

$$v = \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j$$

bestimmt werden. Dessen Ableitungen sind

$$v' = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j u^{j-1}, \qquad v'' = \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) a_j u^{j-2}.$$

Setzt man diese Potenzreihen nun in die Legendre–Differentialgleichung ein, so erhält man durch Koeffizientenvergleich die Rekursionsformel

$$a_{j+2} = -\frac{(n-j)(n+j+1)}{(j+1)(j+2)} a_j. \qquad (2.4)$$

Die Koeffizienten a_0 und a_1 sind frei wählbar. Setzt man jeweils einen dieser beiden Koeffizienten Null, so erhält man aus den geraden bzw. den ungeraden Potenzen zwei Reihen, die ein Fundamentalsystem für die Legendre–Gleichung bilden. Wegen des Faktors $(n-j)$ bricht je nachdem, ob n gerade oder ungerade ist, eine der beiden Reihenentwicklungen ab. Es handelt sich dann um ein Polynom vom Grad n. Im folgenden werden nur noch diese Polynome betrachtet. Es wird nun eine geschlossene Darstellung dieser Polynome $P_n(u)$ der Gestalt

$$P_n(u) = \sum_{k=0}^{[\frac{n}{2}]} b_k u^{n-2k}$$

gesucht. Aus Gründen der Eindeutigkeit wird $b_0 = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$ gewählt. Durch rekursives Einsetzen der Formel (2.4) mit $j = n - 2l$ erhält man

$$\begin{aligned} b_k &= \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}(-1)^k \prod_{l=1}^{k} \frac{(n-2l+2)(n-2l+1)}{2l(2n-2l+1)} \\ &= \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}(-1)^k \frac{n!(2n-2k)!2^k n!}{2^k k!(n-k)!(n-2k)!(2n)!} \\ &= \frac{(-1)^k(2n-2k)!}{2^n(n-k)!k!(n-2k)!}. \end{aligned}$$

Die Polynome $P_n(u)$ lassen sich nun durch die binomische Formel in die Darstellung (2.2) bringen:

$$\begin{aligned} P_n(u) &= \frac{1}{2^n n!} \sum_{k=0}^{[\frac{n}{2}]} \binom{n}{k} (-1)^k \frac{(2n-2k)!}{(n-2k)!} u^{n-2k} \\ &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{du^n} \left(\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} u^{2n-2k}(-1)^k \right) \\ &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{du^n} \left(u^2 - 1\right)^n \end{aligned}$$

□

Somit lauten die ersten Legendre–Polynome:

$$\begin{aligned} P_0(u) &= 1, \\ P_1(u) &= u, \\ P_2(u) &= \frac{3}{2}u^2 - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Im folgenden wird ein System von Ladungsteilchen betrachtet, wobei Potential und Kraft nach dem Coulombschen Gesetz als Summe von paarweisen Interaktionen berechnet werden. Sei im Punkt $\underline{y} \in \mathbb{R}^3$ ein Teilchen mit Einheitsladung gegeben. Dann wird für jeden Punkt $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$ mit $R = \|\underline{x} - \underline{y}\|_2 \neq 0$ das Potential durch

$$\Phi(\underline{x}) = \frac{1}{R} \tag{2.5}$$

beschrieben. $\Phi(\underline{x})$ ist eine harmonische Funktion im Dreidimensionalen, d.h. sie erfüllt die homogene Laplacesche Differentialgleichung. Nun soll eine Reihenentwicklung von $\Phi(\underline{x})$ in Termen seines Abstands $\|\underline{x}\|_2$ vom Ursprung hergeleitet werden. Nach dem Kosinussatz gilt

$$R^2 = \|\underline{x}\|_2^2 + \|\underline{y}\|_2^2 - 2\|\underline{x}\|_2\|\underline{y}\|_2(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}).$$

Dabei entspricht das Skalarprodukt dem Kosinus des Winkels zwischen den Ortsvektoren von $\underline{x}$ und $\underline{y}$. Nun läßt sich die Umformung

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{\|\underline{x}\|_2 \sqrt{1 - 2\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2}(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) + \frac{\|\underline{y}\|_2^2}{\|\underline{x}\|_2^2}}} = \frac{1}{\|\underline{x}\|_2\sqrt{1 - 2u\mu + \mu^2}}$$

mit

$$\mu = \frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2} \text{ und } u = \underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}}$$

durchführen. Für den verbliebenden Wurzelterm gibt es eine Reihenentwicklung, die im folgenden Lemma gezeigt wird.

Lemma 2.2. *Für $|\mu| < 1$ und $u \in [-1, 1]$ ist folgende Potenzreihendarstellung gültig:*

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2u\mu + \mu^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(u)\mu^n. \tag{2.6}$$

Dabei bezeichnet $P_n(u)$ das Legendre–Polynom n–ten Grades *aus (2.1).*

Beweis. Zunächst wird die Taylorreihe der Funktion $f(t) = (1-t)^{-\frac{1}{2}}$ mit

$$\frac{1}{\sqrt{1-t}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{f^{(l)}(0)}{l!}(t-0)^l = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} t^l$$

für $|t| < 1$ aufgestellt. Für $|2u\mu - \mu^2| < 1$ gilt dann

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{1 - 2u\mu + \mu^2}} &= \frac{1}{\sqrt{1 - (2u\mu - \mu^2)}} \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} (2u\mu - \mu^2)^l \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} \sum_{k=0}^{l} \binom{l}{k} (2u\mu)^{l-k}(-\mu^2)^k \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l)!}{2^{2l} l!} \sum_{k=0}^{l} \frac{(-1)^k}{k!(l-k)!} 2^{l-k} u^{l-k} \mu^{l+k}.
\end{aligned}$$

Durch die Substitution $l + k = n$ erhält man die Darstellung (2.1) der Legendre–Polynome. Die Gültigkeit dieser Entwicklung kann noch auf $\mu < 1$ ausgeweitet werden (vgl. [33]). □

Damit ist nun für $\|\underline{x}\|_2 > \|\underline{y}\|_2$ die gewünschte *Multipol–Entwicklung*

$$\frac{1}{R} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|\underline{y}\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} P_n(\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}}), \tag{2.7}$$

die das Fernfeld der Ladung beschreibt, gefunden. Analog ergibt sich für $\|\underline{x}\|_2 < \|\underline{y}\|_2$ die Darstellung

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{\|\underline{y}\|_2 \sqrt{1 - 2\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}(\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}}) + \frac{\|\underline{x}\|_2^2}{\|\underline{y}\|_2^2}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^n}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}} P_n(\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}}). \tag{2.8}$$

Diese Entwicklung gilt also nur innerhalb einer Kugel um den Ursprung mit Radius $\|\underline{y}\|_2$ und wird daher als *lokale Entwicklung* bezeichnet.
Nun werden einige Eigenschaften der Legendre–Polynome zusammengetragen.

Lemma 2.3. *Sei $u \in [-1,1]$. Dann gelten für die Legendre–Polynome die Rekursionsformeln*

$$\begin{aligned}(2n+1)uP_n(u) &= (n+1)P_{n+1}(u) + nP_{n-1}(u), && (2.9)\\ P'_{n+1}(u) &= (n+1)P_n(u) + uP'_n(u), && (2.10)\\ (2n+1)P_n(u) &= P'_{n+1}(u) - P'_{n-1}(u). && (2.11)\end{aligned}$$

Außerdem gelten die beiden Abschätzungen:

$$\begin{aligned}|P_n(u)| &\leq 1, && (2.12)\\ \left|P'_n(u)\right| &\leq \frac{1}{2}n(n+1). && (2.13)\end{aligned}$$

Beweis. Die Rekursionsformel (2.9) kann aus der Potenzreihenentwicklung (2.6) hergeleitet werden. Dazu wird (2.6) nach μ abgeleitet und anschließend mit $(1-2u\mu+\mu^2)$ durchmultipliziert. Dadurch erhält man

$$\frac{u-\mu}{\sqrt{1-2u\mu+\mu^2}} = (1-2u\mu+\mu^2)\sum_{n=0}^{\infty} nP_n(u)\mu^{n-1}.$$

Erneutes Anwenden der Reihenentwicklung auf die linke Seite liefert

$$(u-\mu)\sum_{n=0}^{\infty} P_n(u)\mu^n = (1-2u\mu+\mu^2)\sum_{n=0}^{\infty} nP_n(u)\mu^{n-1}.$$

Durch Koeffizientenvergleich folgt daraus die Rekursionsformel (2.9). Zum Beweis der Formel (2.10) wird die Reihenentwicklung (2.6) diesmal nach u abgeleitet. Mit dem gleichen Vorgehen wie oben, ergibt sich dann

$$P_n(u) = P'_{n+1}(u) - 2uP'_n(u) + P'_{n-1}(u). \tag{2.14}$$

Löst man diese Gleichung nach $P'_{n-1}(u)$ auf und setzt sie in die Ableitung

$$(2n+1)\left(P_n(u) + uP'_n(u)\right) = (n+1)P'_{n+1}(u) + nP'_{n-1}(u) \tag{2.15}$$

der Rekursionsformel (2.9) ein, so folgt die Behauptung (2.10). Durch Einsetzen der Formel (2.14) für $P'_{n+1}(u)$ in (2.15) erhält man

$$P'_{n-1}(u) = -nP_n(u) + uP'_n(u).$$

Aus der Differenz mit (2.10) ergibt sich dann die Formel (2.11). Zum Beweis der Abschätzung (2.12) wird u mittels des Winkels γ zwischen den Ortsvektoren $\underline{x}$ und $\underline{x}$ als

$$u = (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) = \cos\gamma = \frac{1}{2}(e^{i\gamma} + e^{-i\gamma})$$

geschrieben. Damit kann nun für die Funktion $(1-2u\mu+\mu^2)^{-1/2}$ eine zweite Reihenentwicklung mit $\alpha_k = (2k)!(2^k k!)^{-2}$ erstellt werden:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{1-2u\mu+\mu^2}} &= \frac{1}{\sqrt{1-\mu e^{i\gamma}}\sqrt{1-\mu e^{-i\gamma}}}\\ &= \left(\sum_{l=0}^{\infty}\alpha_l(e^{i\gamma}\mu)^l\right)\left(\sum_{k=0}^{\infty}\alpha_k(e^{-i\gamma}\mu)^k\right)\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\alpha_k\alpha_{n-k}e^{i(n-k)\gamma}e^{-ik\gamma}\mu^n.\end{aligned}$$

Wegen der Eindeutigkeit der Reihenentwicklung müssen die Reihenglieder mit den Legendre–Polynomen $P_n(u)$ übereinstimmen. Mit der Symmetrie in der inneren Summe gilt dann

$$\begin{aligned} P_n(\cos\gamma) &= \sum_{k=0}^{n} \alpha_k \alpha_{n-k} e^{i(n-2k)\gamma} \\ &= \sum_{k=0}^{[\frac{n}{2}]} \alpha_k \alpha_{n-k} \left(e^{i(n-2k)\gamma} + e^{-i(n-2k)\gamma} \right) \\ &= \sum_{k=0}^{[\frac{n}{2}]} 2\alpha_k \alpha_{n-k} \cos((n-2k)\gamma). \end{aligned}$$

Da die Koeffizienten α_k positiv sind, wird der Betrag von $P_n(\cos\gamma)$ maximal, wenn $\gamma = 0$ und damit $u = \cos\gamma = 1$ ist. Daher genügt es nun, den Funktionswert $P_n(1)$ zu bestimmen. Mit der Reihenentwicklung (2.6) gilt für $\mu < 1$

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(1)\mu^n = \frac{1}{\sqrt{1-2\mu+\mu^2}} = \frac{1}{1-\mu} = \sum_{n=0}^{\infty} \mu^n.$$

Durch Koeffizientenvergleich folgt dann die Behauptung $|P_n(u)| \leq |P_n(1)| = 1$.
Aus der Rekursionsformel (2.10) erhält man mit der Dreiecksungleichung und (2.12):

$$\left|P_n'(u)\right| = \left|nP_{n-1}(u) + tP_{n-1}'(u)\right| \leq n + \left|P_{n-1}'(u)\right|.$$

Da $P_0'(t) = 0$ ist, liefert rekursives Einsetzen die Abschätzung (2.13)

$$\left|P_n'(u)\right| \leq \sum_{j=1}^{n} j = \frac{1}{2}n(n+1).$$

□

Das folgende Lemma liefert Fehlerabschätzungen für die abgeschnittenen Versionen der beiden Entwicklungen (2.7) und (2.8).

Lemma 2.4. *Seien ein Teilchen im Punkt $\underline{y} \in \mathbb{R}^3$ und ein Punkt $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$ mit $R = \|\underline{x} - \underline{y}\|_2$ gegeben. Dann gilt für die Multipol–Entwicklung (2.7) mit $\|\underline{x}\|_2 > \|\underline{y}\|_2$ die Fehlerabschätzung:*

$$\left| \frac{1}{R} - \sum_{n=0}^{p} \frac{\|\underline{y}\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \right| \leq \frac{1}{\|\underline{x}\|_2 - \|\underline{y}\|_2} \left(\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2} \right)^{p+1}. \tag{2.16}$$

Ebenso gilt für die lokale Entwicklung (2.8) mit $\|\underline{x}\|_2 < \|\underline{y}\|_2$ die Fehlerabschätzung:

$$\left| \frac{1}{R} - \sum_{n=0}^{p} \frac{\|\underline{x}\|_2^n}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \right| \leq \frac{1}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} \left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2} \right)^{p+1}. \tag{2.17}$$

Beweis. Für die Multipol–Entwicklung gilt mit (2.12) und der geometrischen Reihe:

$$
\begin{aligned}
\left|\frac{1}{R} - \sum_{n=0}^{p} \frac{\|\underline{y}\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\right| &= \left|\sum_{n=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{y}\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\right| \\
&\leq \sum_{n=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{y}\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} \left|P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\right| \\
&\leq \frac{\|\underline{y}\|_2^{p+1}}{\|\underline{x}\|_2^{p+2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2}\right)^n \\
&= \frac{\|\underline{y}\|_2^{p+1}}{\|\underline{x}\|_2^{p+2}} \left(1 - \frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2}\right)^{-1} \\
&= \frac{1}{\|\underline{x}\|_2 - \|\underline{y}\|_2} \left(\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2}\right)^{p+1}.
\end{aligned}
$$

Die Fehlerabschätzung für die lokale Entwicklung (2.8) läßt sich analog beweisen. □

Bisher wurde nur eine einzelne Ladung betrachtet. Sind nun l Ladungen in den Punkten $\underline{y}_i$ gegeben, dann geht von der i–ten Ladung q_i ein Feld aus, das in $\underline{x}$ durch

$$
\Phi_i(\underline{x}) = q_i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|\underline{y}_i\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}_i)
$$

beschrieben wird. Liegen nun alle Punkte $\underline{y}_i$ auf einer Ursprungsgeraden und gilt $\|\underline{x}\|_2 > \|\underline{y}_i\|_2$ für $i = 1, \ldots, l$, so kann aufgrund des Überlagerungsprinzips die Reihenentwicklung für das von den l Ladungen ausgehende Feld angegeben werden als

$$
\Phi(P) = \sum_{i=1}^{l} \Phi_i(P) = \sum_{i=1}^{l} q_i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|\underline{y}_i\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}_i) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{i=1}^{l} q_i \|\underline{y}_i\|_2^n\right) \frac{P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}}. \tag{2.18}
$$

2.2 Die harmonischen Kugelfunktionen

Um nun Punkte in allgemeiner Lage betrachten zu können, werden die harmonischen Kugelfunktionen zu Hilfe genommen. Ausführliche Darstellungen der in diesem Abschnitt zusammengestellten Sachverhalte kann man in [33] und [69] finden.
Betrachtet wird die Laplacesche Differentialgleichung in Kugelkoordinaten:

$$
\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = 0. \tag{2.19}
$$

Zur Bestimmung der Lösung führt man eine Trennung der Veränderlichen in zwei Schritten durch. Im ersten Schritt setzt man $\Phi(r, \vartheta, \varphi) = R_n(r) Y_n^m(\vartheta, \varphi)$. Nach einer Multiplikation mit $r^2 \Phi^{-1}$ erhält man

$$
\frac{1}{R_n(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_n(r)}{dr}\right) + \frac{1}{Y_n^m(\vartheta, \varphi) \sin^2\vartheta} \left[\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial Y_n^m(\vartheta, \varphi)}{\partial \vartheta}\right) + \frac{\partial^2 Y_n^m(\vartheta, \varphi)}{\partial \varphi^2}\right] = 0.
$$

Beim ersten Summanden handelt es sich um eine Funktion in r, während der zweite Summand eine Funktion in ϑ und φ ist. Somit müssen die beide Summanden konstant sein. Daher wählt man den ersten Summanden gleich $\lambda = n(n+1)$ und den zweiten gleich $-n(n+1)$.
Im zweiten Schritt multipliziert man die aus dem zweiten Summanden hervorgegangene Gleichung mit $\sin^2\vartheta$ und setzt $Y_n^m(\vartheta,\varphi) = \Theta_n^m(\vartheta) g_m(\varphi)$. Daraus ergibt sich die Gleichung

$$\left(\frac{1}{\Theta_n^m(\vartheta)} \sin\vartheta \frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{d\Theta_n^m(\vartheta)}{d\vartheta}\right) + n(n+1)\sin^2\vartheta\right) + \frac{1}{g_m(\varphi)} \frac{d^2 g_m(\varphi)}{d\varphi^2 q} = 0.$$

Erneut sind beide Summanden konstant, da der erste Summand eine Funktion in ϑ und der zweite eine Funktion in φ ist. Man setzt nun den ersten Summanden gleich m^2 und folglich den zweiten gleich $-m^2$.
Insgesamt erhält man durch die Trennung der Veränderlichen folgende drei Differentialgleichungen:

- $R_n(r)$ muß die Eulersche Differentialgleichung

  $$r^2 \frac{d^2 R_n(r)}{dr^2} + 2r \frac{dR_n(r)}{dr} - n(n+1) R_n(r) = 0$$

  erfüllen. Dafür ergeben sich mit dem Ansatz r^ν die Lösungen r^n und $r^{-(n+1)}$.

- Für $g_m(\varphi)$ muß gelten:

  $$\frac{d^2 g_m(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2 g_m(\varphi).$$

  Die allgemeine Lösung dieser Differentialgleichung ist $g_m(\varphi) = a\cos(m\varphi) + b\sin(m\varphi)$. Wegen der gewünschter Eindeutigkeit auf der Kugel muß $m \in \mathbb{Z}$ gelten. Durch Normalisierung erhält man die Lösung $g_m(\varphi) = e^{im\varphi}$.

- Für $\Theta_n^m(\vartheta)$ erhält man nach Multiplikation mit $\Theta_n^m(\vartheta)\sin^{-2}\vartheta$ und der Substitution $\mu = \cos\vartheta$ die Gleichung

  $$\frac{d}{d\mu}\left((1-\mu^2)\frac{d\Theta_n^m(\mu)}{d\mu}\right) + \left(n(n+1) - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right)\Theta_n^m(\mu) = 0.$$

  Deren Lösung kann entweder mittels eines Potenzreihenansatzes (vgl. [33] oder [42]) oder der Faktorisierungsmethode (vgl. [69]) bestimmt werden. Durch den Ansatz $\Theta_n^m(\mu) = (-1)^m(1-\mu^2)^{m/2} v(\mu)$ reduziert sich diese Differentialgleichung auf die zugehörigen Legendre–Gleichungen

  $$(1-\mu^2)\frac{d^2 v(\mu)}{d\mu^2} - 2(m+1)\mu\frac{dv(\mu)}{d\mu} + (n-m)(n+m+1)v(\mu) = 0.$$

  Diese gehen aus der Legendre–Gleichung durch m–maliges Differenzieren hervor. Daher gilt auch $v(\mu) = \dfrac{d^m P_n(\mu)}{d\mu^m}$. Dabei erweist sich auch die Wahl der Konstanten $\lambda = n(n+1)$ als sinnvoll, da nur für ein solches λ beschränkte Lösungen mit $|\Theta_\lambda^m(x)| < \infty$ für $x \in \{0, \pi\}$ existieren.

Die Ergebnisse dieses Vorgehens sind im folgenden Lemma zusammengefaßt.

Lemma 2.5. *Die allgemeine Lösung der Laplaceschen Differentialgleichung (2.19) lautet*

$$\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left(L_n^m r^n + \frac{M_n^m}{r^{n+1}} \right) Y_n^m(\vartheta, \varphi). \tag{2.20}$$

Dabei gilt die Beziehung

$$Y_n^m(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}} \cdot P_n^{|m|}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}, \tag{2.21}$$

und die zugehörigen Legendre–Polynome n–ten Grades und m–ter Ordnung *sind*

$$P_n^m(u) = (-1)^m (1-u^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_n(u)}{du^m}. \tag{2.22}$$

Dabei werden die Terme $Y_n^m(\vartheta, \varphi) \cdot r^n$ als *harmonische Kugelfunktionen n–ten Grades* und die Terme $Y_n^m(\vartheta, \varphi) r^{-n-1}$ als *harmonische Kugelfunktionen $(-n-1)$–ten Grades* bezeichnet. In einer Multipol–Entwicklung (Fernfeld) müssen die Koeffizienten L_n^m Null gesetzt werden, während in einer lokalen Entwicklung die Koeffizienten M_n^m Null gesetzt werden. Da insbesondere das Potential R^{-1} eine Lösung der Laplaceschen Differentialgleichung ist, kann es durch Entwicklungen der harmonische Kugelfunktionen dargestellt werden.

Bemerkung 2.1. Oft werden die Funktionen $Y_n^m(\vartheta, \varphi)$ entgegen der oben implizierten Festlegung mit einem Normalisierungsfaktor $\sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}}$ definiert.

Das folgende Lemma liefert wichtige Hilfsmittel für spätere Fehlerabschätzungen.

Lemma 2.6. *Für die zugehörigen Legendre–Polynome gelten folgende Abschätzungen für $t \in [-1, 1]$:*

$$\left| P_n^1(t) \right| \leq \pi(n+1), \tag{2.23}$$
$$\left| P_n^2(t) \right| \leq 2n(n+1). \tag{2.24}$$

Beweis. Ein Beweis für die Abschätzung (2.23) findet sich in [24]. Setzt man die Legendre–Polynome in die Legendre–Gleichung ein, so erkennt man, daß der Term der zweiten Ableitung dem Polynom P_n^2 entspricht. Dann erhält man mit (2.12) und (2.13) die gesuchte Abschätzung (2.24)

$$\left| P_n^2(t) \right| = \left| (1-t^2) P_n''(t) \right| = \left| 2t P_n'(t) - n(n+1) P_n(t) \right| \leq 2n(n+1).$$

□

Nun werden normierte kartesische Koordinaten mit

$$\hat{x}_1 = \sin\vartheta\cos\varphi,\ \hat{x}_2 = \sin\vartheta\sin\varphi,\ \hat{x}_3 = \cos\varphi \tag{2.25}$$

eingeführt. Daraus ergibt sich eine numerisch effizientere Formel zur Berechnung der Kugelfunktionen. Diese Darstellung findet man beispielsweise auch in [24].

Lemma 2.7. *Die Kugelfunktionen lassen sich für $m \geq 0$ mit*

$$Y_n^{\pm m}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m \frac{d^m}{d\hat{x}_3^m} P_n(\hat{x}_3)(\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^m = Y_n^{\pm m}(\underline{\hat{x}}) \tag{2.26}$$

über die normierten kartesischen Koordinaten berechnen.

Beweis. Diese Darstellung läßt sich mit (2.25) folgendermaßen herleiten

$$\begin{aligned}
Y_n^{\pm m}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(\cos\vartheta) e^{\pm im\varphi} \\
&= \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m (1-\cos^2\vartheta)^{m/2} e^{\pm im\varphi} \frac{d^m}{dt^m} P_n(t)_{|t=\cos\vartheta} \\
&= \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m (\sin\vartheta\cos\varphi \pm i\sin\vartheta\sin\varphi)^m \frac{d^m}{dt^m} P_n(t)_{|t=\cos\vartheta} \\
&= \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m \frac{d^m}{d\hat{x}_3^m} P_n(\hat{x}_3)(\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^m = Y_n^{\pm m}(\underline{\hat{x}}).
\end{aligned}$$

□

Bemerkung 2.2. Im folgenden wird auf die Schreibweise $Y_n^m(\underline{\hat{x}})$ zurückgegriffen, da dadurch eine leichtere Zuordnung der Koordinaten möglich ist als mit den Kugelkoordinaten ϑ und φ.

Lemma 2.8. *Für die Polynome $P_n^{(m)}(t) = (-1)^m \frac{d^m}{dt^m} P_n(t)$ gelten die Rekursionsformeln*

$$P_n^{(m)}(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } n = m = 0 \\ \frac{2n-1}{n-m} t P_{n-1}^{(m)}(t) - \frac{n+m-1}{n-m} P_{n-2}^{(m)}(t) & \text{für } m < n-1 \\ \frac{2n-1}{n-m} t P_{n-1}^{(m)}(t) & \text{für } m = n-1 \\ -(2n-1) P_{n-1}^{(n-1)}(t) & \text{für } m = n. \end{cases} \tag{2.27}$$

Beweis. Der erste Fall entspricht dem Polynom $P_0(t) = 1$. Die letzten beiden Fälle folgen direkt aus der Rekursionsformel (2.9) durch Ableiten. Für den zweiten Fall wird ebenfalls die Rekursionsformel (2.9) m–mal abgeleitet:

$$nP_n^{(m)}(u) = (2n-1)uP_{n-1}^{(m)}(u) + (2n-1)mP_{n-1}^{(m-1)}(u) - (n-1)P_{n-2}^{(m)}(u).$$

Mit der Formel (2.11) für $P_{n-1}^{(m-1)}(u)$ ergibt sich daraus die gesuchte Rekursionsformel

$$(n-m)P_n(u) = (2n-1)uP_{n-1}^{(m)}(u) - (n+m-1)P_{n-2}^{(m)}(u).$$

□

2.3 Additionstheoreme für harmonische Kugelfunktionen

Im folgenden wird zunächst eine Darstellung für die harmonischen Kugelfunktionen negativer Ordnung sowie das Additionstheorem für die Legendre–Polynome angegeben.

Definition 2.1. Die Differentialoperatoren ∂_z,$\partial_{\bar{z}}$ und ∂_{x_3} werden definiert als:

$$\begin{aligned}\partial_z &= \frac{\partial}{\partial x_1} - i\frac{\partial}{\partial x_2}\\ \partial_{\bar{z}} &= \frac{\partial}{\partial x_1} + i\frac{\partial}{\partial x_2}\\ \partial_{x_3} &= \frac{\partial}{\partial x_3}.\end{aligned}$$

Durch eine einfache Rechnung erhält man aus dieser Definition die folgenden Beziehung.

Folgerung 2.9. *Sei f eine harmonische Funktion. Dann gilt*

$$\partial_{\bar{z}}\partial_z(f) = -\partial_{x_3}^2(f). \tag{2.28}$$

Lemma 2.10. *Mit der Definition*

$$A_n^m := \frac{(-1)^n}{\sqrt{(n-m)!(n+m)!}} \tag{2.29}$$

gelten für $m > 0$ die folgenden Beziehungen:

$$\frac{Y_n^0(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} = A_n^0\ \partial_{x_3}^n\left(\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\right), \tag{2.30}$$

$$\frac{Y_n^m(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} = A_n^m\ \partial_{\bar{z}}^m\partial_{x_3}^{n-m}\left(\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\right), \tag{2.31}$$

$$\frac{Y_n^{-m}(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} = A_n^m\ \partial_z^m\partial_{x_3}^{n-m}\left(\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\right). \tag{2.32}$$

Beweis. Siehe [33, 69]. □

Satz 2.11 (Additionstheorem fr Legendre–Polynome)**.** *Für zwei Punkte $\underline{x}$, $\underline{y} \in \mathbb{R}^3$ gilt für die Legendre–Polynome die Darstellung*

$$P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) = \sum_{m=-n}^{n} Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})Y_n^m(\hat{\underline{x}}). \tag{2.33}$$

Beweis. Siehe [33, 69]. □

Durch diese Zerlegung der Legendre–Polynome in Terme von $\hat{\underline{y}}$ und $\hat{\underline{x}}$ können nun die Entwicklungen (2.7) und (2.8) für beliebige Ladungsanordnungen aufsummiert werden. Die folgenden Additionstheoreme entsprechen denen aus [27]. Der erste Satz liefert eine Formel für die Entwicklung einer harmonischen Kugelfunktion negativer Ordnung um ein verschobenes Zentrum.

Satz 2.12 (Erstes Additionstheorem)**.** *Sei $\underline{y}$ das Zentrum der Entwicklung einer beliebigen harmonischen Kugelfunktion negativer Ordnung. Weiter seien $\underline{x}$ mit $\|\underline{x}\|_2 > \|\underline{y}\|_2$ und $\underline{w} = \underline{x} - \underline{y}$ gegeben. Dann gilt:*

$$\frac{Y_{n'}^{m'}(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} i^{|m+m'|-|m|-|m'|}\frac{A_n^m A_{n'}^{m'}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})}{A_{n+n'}^{m+m'}}\frac{Y_{n+n'}^{m+m'}(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}}. \tag{2.34}$$

Beweis. Mittels der Entwicklung (2.7) und des Additionstheorems (2.33) für die Legendre–Polynome läßt sich schreiben:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = \frac{1}{\|\underline{x}-\underline{y}\|_2} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\|\underline{y}\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}}P_n(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}})\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})\frac{Y_n^m(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}}.\end{aligned}$$

Dann liefert Lemma 2.10 die Hilfsaussage

$$\begin{aligned}\frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = \sum_{n=0}^{\infty}\Bigg(&\sum_{m=-n}^{0}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})A_n^m\partial_z^{|m|}\partial_{x_3}^{n-|m|}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\\ &+\sum_{m=1}^{n}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})A_n^m\partial_{\bar{z}}^{m}\partial_{x_3}^{n-m}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\Bigg).\end{aligned} \tag{2.35}$$

Zunächst sind drei Fälle zu unterscheiden:

1.) $m' = 0$: Unter Verwendung von (2.30) und (2.35) ergibt sich

$$\begin{aligned}\frac{Y_{n'}^0(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} &= A_{n'}^0\ \partial_{x_3}^{n'}\frac{1}{\|\underline{w}\|_2}\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\Bigg(\sum_{m=-n}^{0}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})A_{n'}^0 A_n^m\partial_z^{|m|}\partial_{x_3}^{n+n'-|m|}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\\ &\qquad+\sum_{m=1}^{n}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})A_{n'}^0 A_n^m\partial_{\bar{z}}^{m}\partial_{x_3}^{n+n'-m}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\Bigg).\end{aligned}$$

Wendet man nun nochmals Lemma 2.10 an, diesmal aber umgekehrt mit $n+n'$ und m, so erhält man

$$\frac{Y_{n'}^0(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}\frac{A_{n'}^0 A_n^m\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})}{A_{n+n'}^m}\frac{Y_{n+n'}^m(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}}.$$

Dies entspricht der Aussage (2.34) für $m' = 0$.

2.) $m' < 0$: Mit Lemma 2.10 und (2.35) gilt

$$\begin{aligned}
\frac{Y_{n'}^{m'}(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} &= A_{n'}^{m'} \ \partial_z^{|m'|}\partial_{x_3}^{n'-|m'|}\frac{1}{\|\underline{w}\|_2} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\sum_{m=-n}^{0} \|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}}) A_{n'}^{m'} A_n^m \partial_z^{|m'|+|m|}\partial_{x_3}^{n+n'-|m|-|m'|}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\right. \\
&\qquad \left. + \sum_{m=1}^{n} \|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}}) A_{n'}^{m'} A_n^m \partial_z^{|m'|}\partial_{\bar{z}}^{m}\partial_{x_3}^{n+n'-m-|m'|}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\right).
\end{aligned}$$

Die Summanden für $m \leq 0$ lassen sich wieder direkt mittels Lemma 2.10 umformen. Bei den Summanden für $m > 0$ muß zunächst unter Verwendung des Lemmas 2.9 von den beiden Operatoren ∂_z und $\partial_{\bar{z}}$ der mit der niedrigeren Potenz eliminiert werden, bevor Lemma 2.10 angewendet werden kann. Dazu ist erneut eine Fallunterscheidung für $m > 0$ nötig:

(i) $m \geq |m'|$:

$$\begin{aligned}
\partial_z^{|m'|}\partial_{\bar{z}}^{m}\partial_{x_3}^{n+n'-m-|m'|}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} &= (-1)^{|m'|}\partial_{\bar{z}}^{m-|m'|}\partial_{x_3}^{n+n'-m-|m'|+2|m'|}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} \\
&= (-1)^{|m'|}\partial_{\bar{z}}^{m-|m'|}\partial_{x_3}^{n+n'-(m-|m'|)}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} \\
&= (-1)^{|m'|}\frac{Y_{n+n'}^{m-|m'|}(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}A_{n+n'}^{m-|m'|}} \\
&= (-1)^{|m'|}\frac{Y_{n+n'}^{m+m'}(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}A_{n+n'}^{m+m'}}.
\end{aligned}$$

(ii) $m < |m'|$:

$$\begin{aligned}
\partial_z^{|m'|}\partial_{\bar{z}}^{m}\partial_{x_3}^{n+n'-m-|m'|}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} &= (-1)^{m}\partial_{z}^{|m'|-m}\partial_{x_3}^{n+n'-m-|m'|+2m}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} \\
&= (-1)^{m}\partial_{z}^{|m'|-m}\partial_{x_3}^{n+n'-(|m'|-m)}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} \\
&= (-1)^{m}\frac{Y_{n+n'}^{-(|m'|-m)}(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}A_{n+n'}^{|m'|-m}} \\
&= (-1)^{m}\frac{Y_{n+n'}^{m+m'}(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}A_{n+n'}^{m+m'}}.
\end{aligned}$$

Für $m' < 0$ erhält man somit

$$\frac{Y_{n'}^{m'}(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} i^{|m+m'|-|m|-|m'|}\frac{A_{n'}^{m'}A_n^m\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})}{A_{n+n'}^{m+m'}}\,\frac{Y_{n+n'}^{m+m'}(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}}.$$

3.) $m' > 0$: Das Lemma 2.10 und die Hilfsaussage (2.35) liefern diesmal

$$\begin{aligned}
\frac{Y_{n'}^{m'}(\underline{\hat{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} &= A_{n'}^{m'}\ \partial_{\bar{z}}^{m'}\partial_{x_3}^{n'-m'}\frac{1}{\|\underline{w}\|_2} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\sum_{m=-n}^{-1}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\underline{\hat{y}})A_{n'}^{m'}A_n^m\partial_z^{|m|}\partial_{\bar{z}}^{m'}\partial_{x_3}^{n+n'-|m|-m'}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\right. \\
&\qquad \left. + \sum_{m=0}^{n}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\underline{\hat{y}})A_{n'}^{m'}A_n^m\partial_{\bar{z}}^{m+m'}\partial_{x_3}^{n+n'-m-m'}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}\right).
\end{aligned}$$

Erneut können die Summanden für $m \geq 0$ direkt mittels Lemma 2.10 mit $n + n'$ und $m + m'$ umformen werden . Bei den Summanden für $m < 0$ muß zunächst wieder mittels Lemma 2.9 von den beiden Operatoren ∂_z und $\partial_{\bar{z}}$ der weniger häufig auftretende eliminiert werden. Erst dann kann Lemma 2.10 angewendet werden. Dabei erhält man die folgende Fallunterscheidung für $m < 0$:

(i) $|m| \geq m'$:

$$\begin{aligned}
\partial_z^{|m|}\partial_{\bar{z}}^{m'}\partial_{x_3}^{n+n'-|m|-m'}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} &= (-1)^{m'}\partial_{\bar{z}}^{|m|-m'}\partial_{x_3}^{n+n'-(|m|-m')}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} \\
&= (-1)^{m'}\frac{Y_{n+n'}^{-(|m|-m')}(\underline{\hat{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}A_{n+n'}^{|m|-m'}} \\
&= (-1)^{m'}\frac{Y_{n+n'}^{m+m'}(\underline{\hat{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}A_{n+n'}^{m+m'}}.
\end{aligned}$$

(ii) $|m| < m'$:

$$\begin{aligned}
\partial_z^{|m|}\partial_{\bar{z}}^{m'}\partial_{x_3}^{n+n'-|m|-m'}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} &= (-1)^{|m|}\partial_{z}^{m'-|m|}\partial_{x_3}^{n+n'-(m'-|m|)}\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} \\
&= (-1)^{|m|}\frac{Y_{n+n'}^{m'-|m|)}(\underline{\hat{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}A_{n+n'}^{m'-|m|}} \\
&= (-1)^{|m|}\frac{Y_{n+n'}^{m+m'}(\underline{\hat{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}A_{n+n'}^{m+m'}}.
\end{aligned}$$

Auch für $m' > 0$ erhält man also

$$\frac{Y_{n'}^{m'}(\underline{\hat{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} i^{|m+m'|-|m|-|m'|}\frac{A_{n'}^{m'}A_n^m\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\underline{\hat{y}})}{A_{n+n'}^{m+m'}}\ \frac{Y_{n+n'}^{m+m'}(\underline{\hat{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}}.$$

□

Der nächste Satz liefert eine Formel, um eine harmonische Kugelfunktion negativer Ordnung, also einen Multipol–Term bezüglich eines Zentrums in eine lokale Entwicklung um ein verschobenes Zentrum zu konvertieren.

Satz 2.13 (Zweites Additionstheorem). *Sei $\underline{y} \in \mathbb{R}^3$ das Zentrum der Entwicklung einer beliebigen harmonischen Kugelfunktion negativer Ordnung. Auch sei $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$ mit $\|\underline{x}\|_2 < \|\underline{y}\|_2$ und $\underline{w} = \underline{x} - \underline{y}$ gegeben. Dann gilt:*

$$\frac{Y_{n'}^{m'}(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} (-1)^{n'} i^{|m-m'|-|m|-|m'|} \frac{A_n^m A_{n'}^{m'} Y_{n+n'}^{m'-m}(\hat{\underline{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1} A_{n+n'}^{m-m'}} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \|\underline{x}\|_2^n. \tag{2.36}$$

Beweis. Wegen

$$\|\underline{w}\|_2 = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2}$$

gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_1} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} &= -\frac{\partial}{\partial y_1} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} \\
\frac{\partial}{\partial x_2} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} &= -\frac{\partial}{\partial y_2} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} \\
\frac{\partial}{\partial x_3} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} &= -\frac{\partial}{\partial y_3} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2}.
\end{aligned}$$

Außerdem wird die Definition 2.1 der Differentialoperatoren so erweitert, daß der zugehörige Punkt angefügt wird, also $\partial_{\bar{z}_{\underline{x}}}, \partial_{z_{\underline{x}}}, \partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}$ und $\partial_{z_{\underline{y}}}$. Dann gilt auch

$$\partial_{\bar{z}_{\underline{x}}} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = -\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2}, \qquad \partial_{z_{\underline{x}}} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = -\partial_{z_{\underline{y}}} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2}.$$

Die Entwicklung (2.8) und das Additionstheorem für die Legendre–Polynome (2.33) liefern

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = \frac{1}{\|\underline{x} - \underline{y}\|_2} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^n}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}} Y_n^m(\hat{\underline{x}})\ \|\underline{x}\|_2^n.
\end{aligned}$$

Mit Lemma 2.10 erhält man die Hilfsaussage

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = \sum_{n=0}^{\infty} \Bigg(& \sum_{m=-n}^{0} A_n^m \partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{|m|} \partial_{y_3}^{n-|m|} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \|\underline{x}\|_2^n \\
& + \sum_{m=1}^{n} A_n^m \partial_{z_{\underline{y}}}^m \partial_{y_3}^{n-m} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \|\underline{x}\|_2^n \Bigg).
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Analog zum Beweis des ersten Additionstheorems sind wieder drei Fälle zu unterscheiden:

1.) $m' = 0$: Mittels der Beziehung (2.30) und durch Einsetzen von (2.37) erhält man

$$\begin{aligned}
\frac{Y_{n'}^0(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} &= A_{n'}^0\ \partial_{x_3}^{n'} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = (-1)^{n'} A_{n'}^0\ \partial_{y_3}^{n'} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \Bigg(\sum_{m=-n}^{0} (-1)^{n'} A_{n'}^0 A_n^m \partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{|m|} \partial_{y_3}^{n+n'-|m|} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \|\underline{x}\|_2^n \\
&\qquad + \sum_{m=1}^{n} (-1)^{n'} A_{n'}^0 A_n^m \partial_{z_{\underline{y}}}^m \partial_{y_3}^{n+n'-m} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \|\underline{x}\|_2^n \Bigg).
\end{aligned}$$

Umgekehrtes Anwenden von Lemma 2.10 mit $n+n'$ und $|m|$ liefert dann

$$\frac{Y_{n'}^{0}(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} \frac{(-1)^{n'} A_{n'}^{0} A_n^m Y_{n+n'}^{-m}(\hat{\underline{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1} A_{n+n'}^{m}}\, Y_n^m(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^n.$$

Dies entspricht der Aussage (2.36) für $m'=0$.

2.) $m' < 0$: Mit Lemma 2.10 und Hilfsaussage (2.37) lassen sich folgende Umformungen durchführen:

$$\begin{aligned}
\frac{Y_{n'}^{m'}(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} &= A_{n'}^{m'}\, \partial_{-P}^{|m'|}\partial_{x_3}^{n'-|m'|}\frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = (-1)^{n'} A_{n'}^{m'}\, \partial_{z_{\underline{y}}}^{|m'|}\partial_{y_3}^{n'-|m'|}\frac{1}{\|\underline{w}\|_2}\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\sum_{m=-n}^{-1}(-1)^{n'}A_{n'}^{m'}A_n^m \partial_{z_{\underline{y}}}^{|m'|}\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{|m|}\partial_{y_3}^{n+n'-|m|-|m'|}\frac{1}{\|\underline{y}\|_2}Y_n^m(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^n\right.\\
&\qquad\left. + \sum_{m=0}^{n}(-1)^{n'}A_{n'}^{m'}A_n^m \partial_{z_{\underline{y}}}^{|m'|+m}\partial_{y_3}^{n+n'-|m'|-m}\frac{1}{\|\underline{y}\|_2}Y_n^m(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^n\right).
\end{aligned}$$

Bei den Summanden für $m \geq 0$ erhält man wieder direkt mittels Lemma 2.10 die gewünschte Darstellung. Für $m<0$ muß in den Summanden zunächst unter Verwendung des Lemmas 2.9 von den beiden Operatoren $\partial_{z_{\underline{y}}}$ und $\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}$ der weniger häufig auftretende eliminiert werden. Anschließend kann Lemma 2.10 angewendet werden. Dazu ist erneut eine Fallunterscheidung für $m<0$ nötig:

(i) $|m| \geq |m'|$:

$$\begin{aligned}
\partial_{z_{\underline{y}}}^{|m'|}\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{|m|}\partial_{y_3}^{n+n'-|m|-|m'|}\frac{1}{\|\underline{y}\|_2} &= (-1)^{|m'|}\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{|m|-|m'|}\partial_{y_3}^{n+n'-(|m|-|m'|)}\frac{1}{\|\underline{y}\|_2}\\
&= (-1)^{|m'|}\frac{Y_{n+n'}^{|m|-|m'|}(\hat{\underline{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1}A_{n+n'}^{|m|-|m'|}}\\
&= (-1)^{|m'|}\frac{Y_{n+n'}^{m'-m}(\hat{\underline{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1}A_{n+n'}^{m-m'}}.
\end{aligned}$$

(ii) $|m| < |m'|$:

$$\begin{aligned}
\partial_{z_{\underline{y}}}^{|m'|}\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{|m|}\partial_{y_3}^{n+n'-|m|-|m'|}\frac{1}{\|\underline{y}\|_2} &= (-1)^{|m|}\partial_{z_{\underline{y}}}^{|m'|-|m|}\partial_{y_3}^{n+n'-(|m'|-|m|)}\frac{1}{\|\underline{y}\|_2}\\
&= (-1)^{|m|}\frac{Y_{n+n'}^{-(|m'|-|m|)}(\hat{\underline{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1}A_{n+n'}^{|m'|-|m|}}\\
&= (-1)^{|m|}\frac{Y_{n+n'}^{m'-m}(\hat{\underline{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1}A_{n+n'}^{m-m'}}.
\end{aligned}$$

Somit erhält man für $m'<0$

$$\frac{Y_{n'}^{m'}(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^{n'} i^{|m-m'|-|m|-|m'|}\frac{A_{n'}^{m'}A_n^m Y_{n+n'}^{m'-m}(\hat{\underline{y}})}{A_{n+n'}^{m-m'}\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1}}\, Y_n^m(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^n.$$

3.) $m' > 0$: Das Lemma 2.10 und die Hilfsaussage (2.37) ergeben nun

$$\begin{aligned}
\frac{Y_{n'}^{m'}(\underline{\hat{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} &= A_{n'}^{m'}\ \partial_{\bar{z}_{\underline{x}}}^{m'} \partial_{x_3}^{n'-m'} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} = (-1)^{n'} A_{n'}^{m'}\ \partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{m'} \partial_{y_3}^{n'-m'} \frac{1}{\|\underline{w}\|_2} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{m=-n}^{0} (-1)^{n'} A_{n'}^{m'} A_n^m \partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{m'-m} \partial_{y_3}^{n+n'-(m'-m)} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} Y_n^m(\underline{\hat{x}}) \|\underline{x}\|_2^n \right. \\
&\qquad \left. + \sum_{m=1}^{n} (-1)^{n'} A_{n'}^{m'} A_n^m \partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{m'} \partial_{z_{\underline{y}}}^{m} \partial_{y_3}^{n+n'-m-m'} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} Y_n^m(\underline{\hat{x}}) \|\underline{x}\|_2^n \right).
\end{aligned}$$

Diesmal lassen sich die Summanden für $m \le 0$ direkt mittels Lemma 2.10 mit $n+n'$ und $m'-m$ umformen. Aber bei den Summanden für $m > 0$ muß zunächst unter Verwendung des Lemmas 2.9 von den beiden Operatoren $\partial_{z_{\underline{y}}}$ und $\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}$ der mit der niedrigeren Potenz eliminiert werden, bevor dann Lemma 2.10 das gewünschte Ergebnis liefert. Dabei sind für $m > 0$ folgende Fälle zu unterscheiden:

(i) $m \le m'$:

$$\begin{aligned}
\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{m'} \partial_{z_{\underline{y}}}^{m} \partial_{y_3}^{n+n'-m-m'} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} &= (-1)^m \partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{m'-m} \partial_{y_3}^{n+n'-(m'-m)} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} \\
&= (-1)^m \frac{Y_{n+n'}^{m'-m}(\underline{\hat{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1} A_{n+n'}^{m-m'}}.
\end{aligned}$$

(ii) $m > m'$:

$$\begin{aligned}
\partial_{\bar{z}_{\underline{y}}}^{m'} \partial_{z_{\underline{y}}}^{m} \partial_{y_3}^{n+n'-m-m'} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} &= (-1)^{m'} \partial_{z_{\underline{y}}}^{m-m'} \partial_{y_3}^{n+n'-(m-m')} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2} \\
&= (-1)^{m'} \frac{Y_{n+n'}^{m'-m}(\underline{\hat{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n+n'+1} A_{n+n'}^{m-m'}}.
\end{aligned}$$

Somit erhält man also

$$\frac{Y_{n'}^{m'}(\underline{\hat{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} (-1)^{n'} i^{|m-m'|-|m|-|m'|} \frac{A_{n'}^{m'} A_n^m Y_{n+n'}^{m'-m}(\underline{\hat{y}})}{A_{n+n'}^{m-m'}\ \|\underline{y}\|_2^{n+n'+1}} \ \frac{Y_n^m(\underline{\hat{x}})}{\|\underline{x}\|_2^n}.$$

Setzt man nun die einzelnen Fälle wieder zusammen, so erhält man die Behauptung (2.36). □

Das folgende Additionstheorem beschreibt eine Formel zur Entwicklung einer harmonischen Kugelfunktion nichtnegativer Ordnung um ein verschobenes Zentrum.

Satz 2.14 (Drittes Additionstheorem)**.** *Sei $\underline{y} \in \mathbb{R}^3$ das Zentrum der Entwicklung einer beliebigen harmonischen Kugelfunktion nichtnegativer Ordnung. Mit dem Punkt $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$ gilt für $\underline{w} = \underline{x} - \underline{y}$:*

$$Y_{n'}^{m'}(\underline{\hat{w}}) \|\underline{w}\|_2^{n'} = \sum_{n=0}^{n'} \sum_{m=-n}^{n} (-1)^n i^{|m'|-|m|-|m'-m|} \frac{A_n^m A_{n'-n}^{m'-m} \|\underline{y}\|_2^n Y_n^m(\underline{\hat{y}})}{A_{n'}^{m'}} Y_{n'-n}^{m'-m}(\underline{\hat{x}}) \|\underline{x}\|_2^{n'-n}. \tag{2.38}$$

Beweis. Siehe [15, 54]. □

2.4 Multipol–Entwicklung und Translationsoperatoren

Wie bereits erwähnt ist das Potential harmonisch und kann daher durch eine Entwicklung mittels der harmonischen Kugelfunktionen dargestellt werden. Die im vorherigen Abschnitt behandelten Additionstheoreme bilden die Grundlage zur Translation und Konvertierung dieser Entwicklungen. Die folgenden Ergebnisse stammen aus [27, 28, 29]. Der erste Satz liefert eine Multipol–Entwicklung, die das Fernfeld einer Teilchenansammlung beschreibt.

Satz 2.15 (Multipol–Entwicklung). *Seien l Teilchen mit Ladungen $\{q_i, i = 1, \ldots, l\}$ in den Punkten $\underline{y}_i$ mit $\|\underline{y}_i\|_2 < a$ und $0 < a \in \mathbb{R}$ gegeben. Dann gilt für jeden Punkt $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$ mit $\|\underline{x}\|_2 > a$:*

$$\Phi(\underline{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{M_n^m}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \tag{2.39}$$

mit

$$M_n^m = \sum_{i=1}^{l} q_i \|\underline{y}_i\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}}_i). \tag{2.40}$$

Außerdem gilt für jedes $p \geq 1$ die Fehlerabschätzung:

$$\left| \Phi(\underline{x}) - \sum_{n=0}^{p} \sum_{m=-n}^{n} \frac{M_n^m}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \right| \leq \frac{\sum_{i=1}^{l} |q_i|}{\|\underline{x}\|_2 - a} \left(\frac{a}{\|\underline{x}\|_2} \right)^{p+1}. \tag{2.41}$$

Beweis. Zunächst wird der Beitrag Φ_i eines Teilchens q_i betrachtet. Dafür gilt mittels der Entwicklung (2.7) und dem Additionstheorem (2.33) für die Legendre–Polynome

$$\begin{aligned} \Phi_i(\underline{x}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q_i \|\underline{y}_i\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{q_i \|\underline{y}_i\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}}_i)}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} Y_n^m(\hat{\underline{x}}). \end{aligned}$$

Wegen des Überlagerungsprinzips erhält man die Entwicklung (2.39) mit den Koeffizienten (2.40) aus

$$\begin{aligned} \Phi(\underline{x}) &= \sum_{i=1}^{l} \Phi_i(\underline{x}) \\ &= \sum_{i=1}^{l} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{q_i \|\underline{y}_i\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}}_i)}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left(\sum_{i=1}^{l} q_i \|\underline{y}_i\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}}_i) \right) \frac{Y_n^m(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{M_n^m}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} Y_n^m(\hat{\underline{x}}). \end{aligned}$$

Der Fehler durch eine $(p+1)$–gliedrige Entwicklung läßt sich zunächst mittels des Additionstheorems (2.33) für Legendre–Polynome und der Dreiecksungleichung abschätzen zu

$$\begin{aligned} \left| \Phi(\underline{x}) - \sum_{n=0}^{p} \sum_{m=-n}^{n} \frac{M_n^m}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \right| &= \left| \sum_{i=1}^{l} \Phi_i(\underline{x}) - \sum_{n=0}^{p} \sum_{i=1}^{k} q_i \|\underline{y}_i\|_2^n \frac{P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}_i)}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^{l} \left| \Phi_i(\underline{x}) - \sum_{n=0}^{p} \frac{q_i \|\underline{y}_i\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} P_n(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}_i) \right| . \end{aligned}$$

Mittels der Fehlerabschätzung (2.16) für einzelne Teilchen aus Lemma 2.4 ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} \left| \Phi(\underline{x}) - \sum_{n=0}^{p} \sum_{m=-n}^{n} \frac{M_n^m}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} Y_n^m(\hat{\underline{x}}) \right| &\leq \sum_{i=1}^{l} \frac{|q_i|}{\|\underline{x}\|_2 - \|\underline{y}_i\|_2} \left(\frac{\|\underline{y}_i\|_2}{\|\underline{x}\|_2} \right)^{p+1} \\ &\leq \frac{\sum_{i=1}^{l} |q_i|}{\|\underline{x}\|_2 - a} \left(\frac{a}{\|\underline{x}\|_2} \right)^{p+1} . \end{aligned}$$

□

Der nächsten Satz liefert nun einen Verschiebungsoperator für Multipol–Entwicklungen.

Satz 2.16 (Translation einer Multipol–Entwicklung)**.** *Seien l Teilchen mit den Ladungen $\{q_i, i = 1, \ldots, l\}$ innerhalb der Kugel $K_{\underline{y}}$ mit dem Radius a und dem Mittelpunkt $\underline{y}$ gegeben. Außerdem sei für jeden Punkt $\underline{x}$ außerhalb der Kugel $K_{\underline{y}}$ das von den Ladungen ausgehende Potential durch die Multipol–Entwicklung*

$$\Phi(\underline{x}) = \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \frac{O_{n'}^{m'}}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}} Y_{n'}^{m'}(\hat{\underline{w}}) \tag{2.42}$$

gegeben, wobei $\underline{w} = \underline{x} - \underline{y}$ und $O_{n'}^{m'}$ Koeffizienten wie aus (2.40) sind. Dann gilt für jeden Punkt $\underline{x}$ außerhalb der Kugel $K_{a+\|\underline{y}\|_2}$ um den Ursprung mit Radius $a + \|\underline{y}\|_2$:

$$\Phi(\underline{x}) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=-j}^{j} \frac{M_j^k}{\|\underline{x}\|_2^{j+1}} Y_j^k(\hat{\underline{x}}), \tag{2.43}$$

mit

$$M_j^k = \sum_{n=0}^{j} \sum_{m=-n}^{n} i^{|k|-|m|-|k-m|} \frac{O_{j-n}^{k-m} A_n^m A_{j-n}^{k-m} \|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})}{A_j^k}. \tag{2.44}$$

Darüberhinaus gilt für jedes $p \geq 1$ die Fehlerabschätzung

$$\left| \Phi(\underline{x}) - \sum_{j=0}^{p} \sum_{k=-j}^{j} \frac{M_j^k}{\|\underline{x}\|_2^{j+1}} Y_j^k(\hat{\underline{x}}) \right| \leq \frac{\sum_{i=1}^{l} |q_i|}{\|\underline{x}\|_2 - (a + \|\underline{y}\|_2)} \left(\frac{a + \|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2} \right)^{p+1} . \tag{2.45}$$

Beweis. Durch Anwenden des ersten Additionstheorems (2.34) auf die einzelnen Summanden erhält man

$$\begin{aligned} \Phi(\underline{x}) &= \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} O_{n'}^{m'} \frac{Y_{n'}^{m'}(\hat{\underline{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n+1}} \\ &= \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} O_{n'}^{m'} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} i^{|m+m'|-|m|-|m'|} \frac{A_n^m A_{n'}^{m'} \|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}})}{A_{n+n'}^{m+m'}} \cdot \frac{Y_{n+n'}^{m+m'}(\hat{\underline{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{n+n'+1}} . \end{aligned}$$

Bei einer Indexsubstitution mit $k := m + m'$ und $j := n + n'$ ergibt sich

$$\begin{aligned}\Phi(\underline{x}) &= \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{k=-j}^{j}\sum_{n=0}^{j}\sum_{m=-n}^{n} i^{|k|-|m|-|k-m|}\frac{O_{j-n}^{k-m}A_n^m A_{j-n}^{k-m}\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\underline{\hat{y}})}{A_j^k}\cdot\frac{Y_j^k(\underline{\hat{x}})}{\|\underline{x}\|_2^{j+1}}\\ &= \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{k=-j}^{j}\frac{M_j^k}{\|\underline{x}\|_2^{j+1}}Y_j^k(\underline{\hat{x}}).\end{aligned}$$

Da die M_j^k die Koeffizienten der eindeutigen Multipol–Entwicklung um den Ursprung sind, folgt die Fehlerabschätzung (2.45) direkt aus Satz 2.15 zur Multipol–Entwicklung, wobei a durch $a + \|\underline{y}\|_2$ zu ersetzen ist:

$$\left|\Phi(\underline{x}) - \sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j}\frac{M_j^k}{\|\underline{x}\|_2^{j+1}}Y_j^k(\underline{\hat{x}})\right| \le \frac{\sum_{i=1}^{l}|q_i|}{\|\underline{x}\|_2 - (a+\|\underline{y}\|_2)}\left(\frac{a+\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2}\right)^{p+1}.$$

□

Nun läßt sich das zweite Additionstheorem dazu verwenden, die Multipol–Entwicklung einer Ladungsansammlung in eine lokale Entwicklung zu konvertieren.

Satz 2.17 (Konvertieren einer Multipol–Entwicklung in eine lokale Entwicklung).
Seien l Teilchen mit den Ladungen $\{q_i, i = 1, \dots, l\}$ innerhalb der Kugel $K_{\underline{y}}$ mit dem Radius a und dem Mittelpunkt $\underline{y}$ gegeben, wobei $\|\underline{y}\|_2 > (d+1)a$ mit $d > 1$ gelte. Dann konvergiert die zugehörige Multipol–Entwicklung

$$\Phi(\underline{x}) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}\frac{O_n^m}{\|\underline{w}\|_2^{n'+1}}Y_n^m(\underline{\hat{w}}) \tag{2.46}$$

innerhalb einer Kugel K_0 um den Ursprung mit Radius a, wobei $\underline{w} = \underline{x} - \underline{y}$ ist. Das von den Ladungen ausgehende Potential läßt sich dann innerhalb dieser Kugel K_0 durch die lokale Entwicklung

$$\Phi(\underline{x}) = \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{k=-j}^{j}L_j^k Y_j^k(\underline{\hat{x}})\|\underline{x}\|_2^j, \tag{2.47}$$

mit

$$L_j^k = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^n i^{|k-m|-|k|-|m|}\frac{O_n^m A_n^m A_j^k Y_{j+n}^{m-k}(\underline{\hat{y}})}{A_{j+n}^{m-k}\|\underline{y}\|_2^{j+n+1}}, \tag{2.48}$$

beschreiben. Fr alle $p \ge 1$ gilt die Fehlerabschätzung

$$\left|\Phi(\underline{x}) - \sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j}L_j^k Y_j^k(\underline{\hat{x}})\|\underline{x}\|_2^j\right| \le \frac{\sum_{i=1}^{l}|q_i|}{da-a}\left(\frac{1}{d}\right)^{p+1}. \tag{2.49}$$

Beweis. Die lokale Entwicklung erhält man durch Anwendung des zweiten Additionstheorems (2.36) auf die einzelnen Summanden der Multipol–Entwicklung (2.46):

$$\begin{aligned}\Phi(\underline{x}) &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}O_n^m\frac{Y_n^m(\underline{\hat{w}})}{\|\underline{w}\|_2^{n+1}}\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}O_n^m\sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{m'=-n'}^{n'}(-1)^n i^{|m'-m|-|m'|-|m|}\frac{A_{n'}^{m'}A_n^m Y_{n'+n}^{m-m'}(\underline{\hat{y}})}{\|\underline{y}\|_2^{n'+n+1}A_{n'+n}^{m'-m}}Y_{n'}^{m'}(\underline{\hat{x}})\|\underline{x}\|_2^{n'}.\end{aligned}$$

Substituiert man nun $k := m'$ und $j := n'$ und verwendet die Beziehung $A_{j+n}^{k-m} = A_{j+n}^{m-k}$, so erhält man die gewünschte Darstellung

$$\begin{aligned}\Phi(\underline{x}) &= \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{k=-j}^{j}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^n i^{|k-m|-|k|-|m|}\frac{O_n^m A_j^k A_n^m Y_{j+n}^{m-k}(\hat{\underline{y}})}{A_{j+n}^{m-k}\|\underline{y}\|_2^{j+n+1}} Y_j^k(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{k=-j}^{j} L_j^k Y_j^k(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^j.\end{aligned}$$

Wegen der Eindeutigkeit der Legendre–Entwicklung gilt

$$\sum_{j=0}^{\infty}\sum_{k=-j}^{j} L_j^k Y_j^k(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^j = \sum_{j=0}^{\infty}\left(\sum_{i=1}^{l}\frac{q_i}{\|\underline{y}_i\|_2^{j+1}}P_j(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}}_i)\right)\|\underline{x}\|_2^j.$$

Daher stimmen die Koeffizienten überein, und fr den Fehler ergibt sich durch Verwenden der Dreiecksungleichung:

$$\begin{aligned}\left|\Phi(\underline{x}) - \sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j} L_j^k Y_j^k(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^j\right| &= \left|\sum_{i=1}^{l}\Phi_i(\underline{x}) - \sum_{j=0}^{p}\sum_{i=1}^{l}\frac{q_i\|\underline{x}\|_2^j}{\|\underline{y}_i\|_2^{j+1}}P_j(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}}_i)\right| \\ &\leq \sum_{i=1}^{l}\left|\frac{q_i}{\|\underline{w}_i\|_2} - \sum_{j=0}^{p}\frac{q_i\|\underline{x}\|_2^j}{\|\underline{y}_i\|_2^{j+1}}P_j(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}}_i)\right|.\end{aligned}$$

Mit der Abschätzung (2.17) für einzelne Teilchen aus Lemma 2.4 und den beiden Abschätzungen $\|\underline{x}\|_2 \leq a$ und $\|\underline{y}_i\|_2 > (d+1)a - a = da > \|\underline{x}\|_2$ erhält man dann die gesuchte Fehlerabschätzung

$$\begin{aligned}\left|\Phi(\underline{x}) - \sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j} L_j^k Y_j^k(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^j\right| &\leq \sum_{i=1}^{l}\frac{|q_i|}{\|\underline{y}_i\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}_i\|_2}\right)^{p+1} \\ &\leq \frac{\sum_{i=1}^{l}|q_i|}{da-a}\left(\frac{1}{d}\right)^{p+1}.\end{aligned}$$

□

Der folgenden Satz liefert eine Formel, um das Zentrum einer abgeschnittenen lokalen Entwicklung ohne Fehler zu verschieben.

Satz 2.18 (Translation einer lokalen Entwicklung)**.** *Sei $\underline{y} \in \mathbb{R}^3$ das Zentrum der lokalen Entwicklung*

$$\Phi(\underline{x}) = \sum_{n=0}^{p}\sum_{m=-n}^{n} O_n^m Y_n^m(\hat{\underline{w}})\|\underline{w}\|_2^n, \tag{2.50}$$

mit $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$, $\underline{w} = \underline{x} - \underline{y}$ und den Koeffizienten O_n^m, die beispielsweise aus (2.48) stammen können. Dann gilt:

$$\Phi(\underline{x}) = \sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j} L_j^k Y_j^k(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^j \tag{2.51}$$

mit

$$L_j^k = \sum_{n=j}^{p} \sum_{m=-n}^{n} (-1)^{n+j} i^{|m|-|m-k|-|k|} \frac{O_n^m A_{n-j}^{m-k} A_j^k Y_{n-j}^{m-k}(\underline{\hat{y}}) \|\underline{y}\|_2^{n-j}}{A_n^m}. \tag{2.52}$$

Beweis. Zunächst läßt sich das dritte Additionstheorem (2.38) auf die einzelnen Summanden von (2.50) anwenden:

$$\begin{aligned}
\Phi(\underline{x}) &= \sum_{n=0}^{p} \sum_{m=-n}^{n} O_n^m Y_n^m(\underline{\hat{w}}) \|\underline{w}\|_2^n \\
&= \sum_{n=0}^{p} \sum_{m=-n}^{n} O_n^m \sum_{n'=0}^{n} \sum_{m'=-n'}^{n'} i^{|m|-|m'|-|m-m'|} \frac{A_{n'}^{m'} A_{n-n'}^{m-m'} \|\underline{y}\|_2^{n'} Y_{n'}^{m'}(\underline{\hat{y}})}{(-1)^{n'} A_n^m} Y_{n-n'}^{m-m'}(\underline{\hat{x}}) \|\underline{x}\|_2^{n-n'}.
\end{aligned}$$

Setzt man nun $j := n - n'$ und $k := m - m'$ und eliminiert somit n' und m', so erhält man

$$\begin{aligned}
\Phi(\underline{x}) &= \sum_{j=0}^{p} \sum_{k=-j}^{j} \sum_{n=j}^{p} \sum_{m=-n}^{n} i^{|m|-|m-k|-|k|} \frac{O_n^m A_{n-j}^{m-k} A_j^k \|\underline{y}\|_2^{n-j} Y_{n-j}^{m-k}(\underline{\hat{y}})}{(-1)^{n+j} A_n^m} Y_j^k(\underline{\hat{x}}) \|\underline{x}\|_2^j \\
&= \Phi(\underline{x}) = \sum_{j=0}^{p} \sum_{k=-j}^{j} L_j^k Y_j^k(\underline{\hat{x}}) \|\underline{x}\|_2^j.
\end{aligned}$$

□

Bemerkung 2.3. Diese Translation einer abgeschnittenen lokalen Entwicklung ist exakt. Daher wird dafür keine Fehlerabschätzung benötigt.

Kapitel 3

Der Multipol–Algorithmus

Nachdem nun geeignete Reihenentwicklungen sowie zugehörige Translations– und Konvertierungsoperatoren zur Verfügung stehen, wird in diesem Kapitel ein Algorithmus zur Berechnung des von einer Ladungsverteilung ausgehenden Potentials vorgestellt. Dieser Algorithmus wird als Fast Multipole Method bezeichnet. Die hier beschriebene Version geht auf L. Greengard [27] und V. Rokhlin [52] zurück.

3.1 Einführung einiger Grundbegriffe

Wesentliche Elemente der Multipolmethode sind das Zusammenfassen der Teilchen in Gruppen und die Berechnung der Interaktionen mit anderen weit genug entfernten Teilchen durch Multipol–Entwicklungen. Interaktionen zwischen naheliegenden Teilchen werden direkt berechnet. Damit ergibt sich also eine Zerlegung des Potentials in

$$\Phi = \Phi_{Fernfeld} + \Phi_{Nahbereich}.$$

Zunächst muß eine hierarchische Clusterstruktur aufgebaut werden. Dabei bezeichnet ein Cluster eine durch diese Struktur zusammengefaßte Teilchengruppe. Es wird nun ein Würfel der Seitenlänge 1 mit dem Ursprung als Mittelpunkt betrachtet, in dem sich alle N betrachteten Teilchen befinden sollen. Dieser Würfel wird schrittweise verfeinert. Stufe 0 bezeichnet den gesamten Berechnungswürfel, und Stufe $l+1$ erhält man aus Stufe l, indem man jeden Würfel aus Stufe l in acht gleiche Würfel zerlegt. Dabei empfiehlt es sich, für die Implementierung eine Baumstruktur zu verwenden. Würfel, die keine Teilchen enthalten, können weggelassen werden. Dadurch reduziert sich der notwendige Aufwand bei nicht uniformen Ladungsverteilungen. Diese Würfel werden als Cluster identifiziert.
Der Mittelpunkt eines Clusters j wird mit Z_j bezeichnet. Der Radius eines Clusters sei a_j. Er ergibt sich aus der Größe der kleinsten Kugel, die alle im Cluster enthaltenen Teilchen beinhaltet. Solange nur eine Teilchenmenge betrachtet wird, können alle diese Radien durch den Umkreisradius des Würfels abgeschätzt werden. Erst bei der Realisierung der Randintegraloperatoren spielt der Radius der einzelnen Cluster eine größere Rolle. Für Cluster gröberer Level ist bei der Bestimmung des Radius darauf zu achten, daß ihre Kugeln die Kugeln ihrer Söhne komplett beinhalten.
Für die Wahl des Nahbereichs gibt es verschieden Möglichkeiten. Die Fast Multipole Method von L. Greengard und V. Rokhlin wählt als Nahbereich eines Würfels i alle Würfel, die mit diesem Würfel i mindestens einen Punkt gemeinsam haben. In einer weiteren Variante wird noch

ein zusätzlicher Ring von Würfeln hinzugenommen, so daß alle Würfel die nicht mindestens zwei Würfel Abstand zum Würfel i haben, zum Nahbereich gehören. Für die Randelementmethode sollen nicht einzelne Punkte sondern die Dreiecke geclustert werden. Dadurch liegen einzelne Punkte außerhalb des zugehörigen Würfels. Daher sind die Cluster keine aneinanderliegende Würfel mehr, sondern können nur als teilweise überlappende Kugeln, die die Dreiecke enthalten, aufgefaßt werden. Daher wird hier ein anderer Weg eingeschlagen. Es wird anhand der Radien der einzelnen Cluster entschieden, ob sie gegenseitig im Nahbereich liegen. Mit $d > 1$ ist das Kriterium für den Nahbereich:

$$\|Z_i - Z_j\|_2 \leq (d+1)\max\{a_i, a_j\}. \tag{3.1}$$

Dabei wird gewährleistet, daß die Symmetrie durch die Realisierung der Multipolmethode nicht zerstört wird. Allerdings muß bei dieser Variante der Nahbereich für jeden Cluster abgespeichert werden. Dieser zusätzliche Speicherbedarf ändert aber nichts an der Asymptotik des Gesamtbedarfs. Cluster, die nicht im Nahbereich liegen, heißen *wohlgetrennt*.
Nun werden noch einige Bezeichnungen eingeführt:

- $\Phi_{l,i}$ bezeichnet die Multipol–Entwicklung p–ter Ordnung (um das Clusterzentrum) des Potentialfeldes, das von den Teilchen ausgeht, die innerhalb des Clusters i auf Stufe l liegen.

- $\Psi_{l,i}$ bezeichnet die lokale Entwicklung um den Mittelpunkt des Clusters i in der Stufe l, die das Potentialfeld beschreibt, das von allen Teilchen außerhalb des Nahbereichs des Clusters i ausgeht.

- $\widetilde{\Psi}_{l,i}$ bezeichnet die lokale Entwicklung um den Mittelpunkt des Clusters i in der Stufe l, die das Potentialfeld beschreibt, das von allen Teilchen außerhalb des Nahbereichs des Vaters von Cluster i hervorgerufen wird.

- Die *Interaktionsliste* für den Cluster i in Stufe l bezeichnet die Menge der Cluster, die Söhne der Cluster aus dem Nahbereich des Vaters von Cluster i sind und nicht im Nahbereich des Clusters i liegen.

3.2 Beschreibung des Algorithmus

Bei den Bildern dieses Abschnitts werden die Sachverhalte für eine bessere Übersicht ins Zweidimensionale übertragen. Außerdem wird der Nahbereich als einfacher Ring dargestellt. Der Algorithmus gliedert sich in drei Phasen, die teilweise noch aus mehreren Schritten bestehen. Diese werden nun beschrieben.

Initialisierung:

Zunächst werden eine maximale Verfeinerungsstufe n, der Entwicklungsgrad p und der Abstandparameter d gewählt. Die geeignete Wahl dieser Parameter wird in Abschnitt 3.3 erläutert. Dann wird noch die oben beschriebene hierarchische Clusterstruktur durch schrittweise Verfeinerung erzeugt.

Aufwärtsdurchlauf:

Hier erfolgt die Berechnung der Multipol–Entwicklungen für die Cluster jeder Stufe.

1. Schritt: Unter Verwendung von Satz 2.15 wird für jeden Cluster i der maximalen Verfeinerungsstufe die Multipol–Entwicklung $\Phi_{n,i}$ des Potentialfeldes, das von den im Cluster enthaltenen Teilchen ausgeht, berechnet.

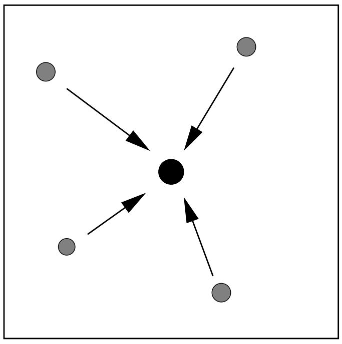

Abbildung 3.1: Erstellen der Multipolentwicklung

2. Schritt: Durch levelweises Aufsteigen in der Baumstruktur werden für alle Cluster die Multipolentwicklungen bezüglich ihrer Mittelpunkte auf allen gröberen Verfeinerungsstufen bestimmt. Dazu wird für jeden Cluster i seine Multipolentwicklung $\Phi_{l,i}$ als Summe der mittels Satz 2.16 in sein Zentrum verschobenen Entwicklungen seiner Söhne berechnet. Jede dieser Entwicklungen beschreibt das Potentialfeld, das von allen Teilchen im zugehörigen Cluster ausgeht.

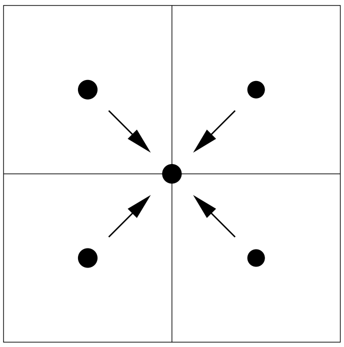

Abbildung 3.2: Translation der Multipolentwicklung auf den Vater

Abwärtsdurchlauf:

Nun werden die Interaktionen stets auf der feinstmöglichen Stufe berechnet. Für einen gegebenen Cluster werden dazu die Interaktionen mit den wohlgetrennten Clustern, deren Interaktionen nicht schon in einer der Väterstufen hineingerechnet wurden, hinzugefügt.

3. Schritt: Nun wird die *lokale Entwicklung* bezüglich des Mittelpunktes jedes Clusters in jeder Verfeinerungsstufe bestimmt. Diese beschreibt das Feld, das von den Teilchen ausgeht, die nicht im aktuellen Cluster und dessen Nahbereich liegen. Dies geschieht bei einem Durchlaufen der Verfeinerungsstufen von 1 nach n.

Auf einer Verfeinerungsstufe l wird dazu für alle Cluster i die Multipolentwicklung $\Phi_{l,j}$ jedes Clusters j aus der Interaktionsliste des Clusters i mittels Satz 2.17 in eine lokale Entwicklung um den Mittelpunkt des Clusters i konvertiert. Dessen lokale Entwicklung $\Psi_{l,i}$ berechnet sich als Summe dieser lokalen Entwicklungen und seiner Initialisierung $\widetilde{\Psi}_{l,i}$. Auf dem gröbsten Level ($l = 1$) sind diese Initialisierungen $\widetilde{\Psi}_{1,i}$ zu Beginn Null zu setzen. In Abbildung 3.3 besteht der Nahbereich aus den weißen Quadraten. Die außerhalb dieses Nahbereichs liegenden und grau gekennzeichneten Quadrate sind die Elemente der Interaktionsliste.

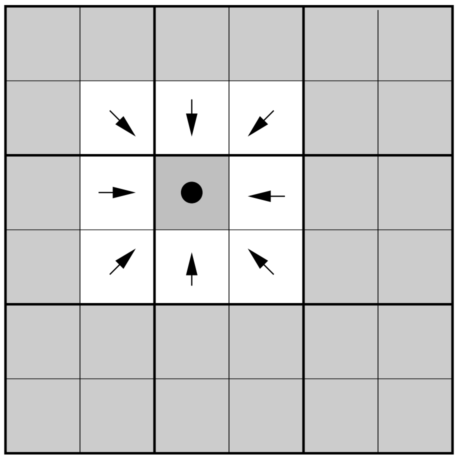

Abbildung 3.3: Konvertierung in lokale Entwicklungen

Sofern nicht das feinste Level n bereits erreicht ist, müssen nun noch die lokalen Entwicklungen des nächsten Levels initialisiert werden. Dazu werden die soeben berechneten lokalen Entwicklungen der Cluster des aktuellen Levels mittels Satz 2.18 in die Mittelpunkte ihrer Söhne verschoben. Diese bilden dann die Initialisierungsentwicklungen für die nächste Stufe.

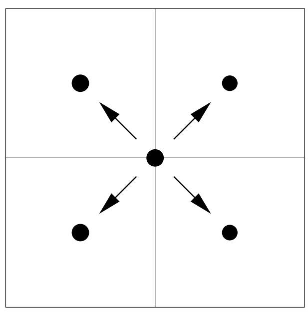

Abbildung 3.4: Translation der lokalen Entwicklung auf die Söhne

4. Schritt: Nun stehen die lokalen Entwicklungen auf dem feinsten Level zur Verfügung. Damit kann nun das Potential, das von allen Teilchen außerhalb des Nahbereichs ausgeht, berechnet werden. Dazu werden für alle Teilchen j jedes Clusters i des feinsten Levels die lokalen Entwicklungen $\Psi_{Fernfeld}(P_j) = \Psi_{n,i}(P_j)$ in den Teilchenpositionen P_j ausgewertet.

5. Schritt: Für alle Teilchen wird das von den im Nahbereich liegenden Teilchen ausgehende Potential $\Psi_{Nahbereich}(P_j)$ direkt berechnet und zum Multipolanteil hinzuaddiert:

$$\Psi(P_j) = \Psi_{Fernfeld}(P_j) + \Psi_{Nahbereich}(P_j).$$

Bemerkung 3.1. Soll nun eine geeignete Matrixmultiplikation mit der Multipolmethode durchgeführt werden, muß diese in eine Berechnungsvorschrift umgeformt werden, auf die die Potentialberechnung der Multipolmethode anwendbar ist. Dazu müssen in Schritt 4 die einzelnen Auswertungen der lokalen Entwicklungen entsprechend der jeweils hergeleiteten Berechnungsvorschrift kombiniert werden.
Der Nahbereichsanteil wird dann nicht für jede Multiplikation wieder neu berechnet, sondern es wird zu Beginn eine Nahbereichsmatrix erstellt. Dann wird in Schritt 5 statt der direkten Berechnung das Ergebnis der Multiplikation mit dieser Nahbereichsmatrix zum Ergebnis der Multipolmethode addiert.

3.3 Komplexitätsanalyse

Um eine Berechnung des Konvergenzverhaltens möglich zu machen, wird der Parameter d, der die Größe des Nahbereichs steuert, als konstant angenommen. Allerdings darf der Parameter a, der als Radius die Größe eines Clusters beschreibt, nicht konstant sein. Mit steigender Elementzahl würden sonst für eine effiziente Realiserung zu viele Elemente im Nahbereich liegen. Daher muß die Tiefe der Baumstruktur mit zunehmender Elementzahl gesteigert werden. Damit die Asymptotik des Rechenaufwands und der Speicherbedarf für die Multipolmethode nicht durch den Aufwand zur Berechnung des Nahbereichs und der Speicherung einer eventuellen Nahbereichsmatrix gestört wird, dürfen höchstens $\mathcal{O}(\log^2 N)$ Elemente im Nahbereich jedes Elements liegen. Dieser besteht je nach Lage aus einem Volumen, das ungefähr $\frac{4}{3}\pi((d+1)a)^3$ groß ist, oder aus einer Fläche von etwa $\pi((d+1)a)^2$, falls der Nahbereich wie bei der Randelementmethode komplett auf einer Fläche des Körpers liegt. Die Größe F_C der Cluster erhält man für $d = 0$. Die Anzahl der Elemente im Nahbereich kann also mit dem Parameter a gesteuert werden. F_{ges} bezeichne die entsprechende Größe der Gesamtstruktur. Aufgrund der vorgenommenen Wahl des Nahbereiches gilt für die Anzahl M der Cluster des feinsten Levels

$$M = \frac{F_{ges}}{F_C} \sim \frac{N}{\log^2 N}. \tag{3.2}$$

Bei einer durchschnittlichen Anzahl von $b \in [2, 8]$ Söhnen pro Cluster kann die Gesamtzahl an Clustern in der Baumstruktur mit

$$\sum_{l=0}^{n} \frac{M}{b^{n-l}} = M \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{b^k} = M \frac{1 - \frac{1}{b^k}}{1 - \frac{1}{b}} \leq 2M$$

nur höchstens $2M$ betragen. Die Anzahl der Cluster in der Interaktionsliste kann mit einer Konstanten c_d abgeschätzt werden, da d als konstant angenommen wurde. Da die Größe F_{ges}

der betrachteten Struktur konstant ist, kann in (3.2) der Radius a so gewählt werden, daß gilt

$$a \geq cN^{-\frac{1}{2}} \log N. \tag{3.3}$$

Die steigende Zahl der in einem Cluster enthaltenen Elemente macht auch bezüglich eines wachsenden Polynomgrads Sinn. Da bei zunehmender Gesamtzahl der Elemente auch der Polynomgrad für die gleiche Genauigkeit ansteigen muß, würde bei konstanter Elementzahl in einem Cluster eine direkte Berechnung irgendwann günstiger als die Ausführung der einzelnen Multipoloperationen (vgl. auch [47]). Betrachtet man die Fehlerabschätzung (2.49) der Multipolmethode und schätzt die Summe der Ladungen aller Teilchen mit qN ab, so zeigt die Fehlerschranke

$$\frac{qN}{(d-1)a}\left(\frac{1}{d}\right)^{p+1},$$

daß auch der Parameter a einen Einfluß auf die Genauigkeit hat und somit bei der Wahl des Polynomgrades berücksichtigt werden muß. Soll der Fehler kleiner als ein festgewählter Wert sein und setzt man die oben festgestellten Abhängigkeiten ein, so erhält man

$$d^{p+1} \sim \frac{N^{\frac{3}{2}}}{\log N} \qquad \text{und} \qquad p \in \mathcal{O}(log_d N). \tag{3.4}$$

Damit kann nun die Aufwandsabschätzung für die Multipolmethode durchgeführt werden. Eine Entwicklung vom Grad p wird durch $(p+1)^2$ Koeffizienten beschrieben. In der Tabelle 3.3 wird der Aufwand für jeden einzelnen Schritt des Algorithmus kurz erklärt.

Schrittnummer	Aufwandsordnung	Erklärung
1	Np^2	Für alle Teilchen muß eine Entwicklung aus $(p+1)^2$ Koeffizienten berechnet werden.
2	$2Mp^4$	Für alle Cluster muß je eine Translationen auf den Vater mit dem Aufwand $\mathcal{O}(p^4)$ durchgeführt werden.
3	$c_d 2Mp^4$	Eine Interaktionsliste enthält höchstens c_d Elemente. Für jeden der $2M$ Cluster müssen also höchstens c_d Konvertierungen und eine Initialisierung ausgeführt werden. Jede dieser Operationen hat einen Aufwand von $\mathcal{O}(p^4)$.
4	Np^2	Für jedes Teilchen muß eine Entwicklung p–ter Ordnung ausgewertet werden.
5	$N \log^2 N$	Der Nahbereich des Clusters jedes Teilchens enthält $\mathcal{O}(\log^2 N)$ Teilchen.

Tabelle 3.1: Aufwandsanalyse der einzelnen Schritte

Setzt man nun noch die Abhängigkeiten des Parameters M ein, so läßt sich die Komplexität des Algorithmus mit $\mathcal{O}(N \log^2 N)$ angeben. Dabei liegt der größte Aufwand im dritten Schritt.
Es müssen die Entwicklungen $\Phi_{l,j}$ und $\Psi_{l,j}$ p–ter Ordnung mit $(p+1)^2$ Koeffizienten und der Nahbereich für jeden Cluster in jeder Verfeinerungsstufe gespeichert werden. Für jedes Teilchen muß die entsprechende Position und der umschließende Cluster gespeichert werden. Somit läßt sich der Speicherbedarf mit $\mathcal{O}(N \log^2 N)$ angeben.
Inzwischen gibt es verbesserte Versionen dieses Verfahrens, die hier aber nicht betrachtet werden. Ein schnellerer Algorithmus wird in [29] beschrieben. Dessen adaptive Version findet man in [10]. Darüber hinaus gibt es weitere Möglichkeiten das Verfahren zusätzlich zu beschleunigen. Solche Ideen finden sich beispielsweise in [47].

Bemerkung 3.2. Im Gegensatz zu diesen Überlegungen empfiehlt es sich, in der Anwendung des Verfahrens die Größe des Nahbereichs und die Genauigkeit des Verfahrens auch über den Parameter d zu steuern. Gründe dafür sind, daß aufgrund der Baumstruktur der Clusterradius a nur in großen Sprüngen angepaßt werden kann, und durch die sprunghafte Erhöhung des Polynomgrades $p \in \mathbb{N}$ das asymptotische Verhalten bzgl. des Zeitaufwands schwer zu erreichen ist.

Kapitel 4

Erweiterungen der Multipolmethode

4.1 Symmetrie der Multipolmethode

Satz 4.1. *Die Multipolmethode ist auch bei Verwendung eines endlichen Entwicklungsgrades für zwei Punkte P_1 und P_2 mit Einheitsladung symmetrisch, sofern die Wege der jeweiligen Entwicklungen abgesehen von der Richtung übereinstimmen. Es gilt also:*

$$\Psi_{P_1}(P_2) = \Psi_{P_2}(P_1). \tag{4.1}$$

Beweis. Die Umkehrbarkeit der Konvertierung der Multipolentwicklung läßt sich noch recht leicht erkennen. Um diese aber zwischen den Translationen einer Multipolentwicklung und einer lokalen Entwicklung zeigen zu können, muß eine Konvertierung eingefügt werden. Der von den Entwicklungen zurückgelegte Weg ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

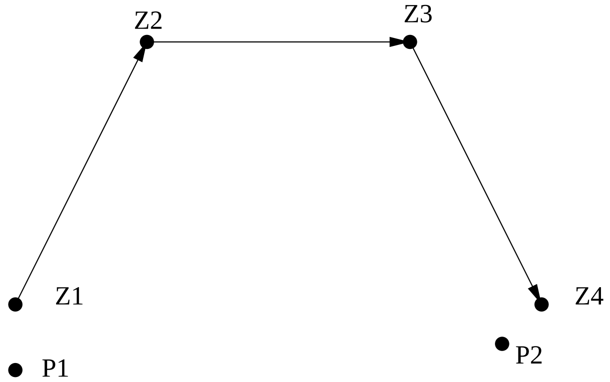

Abbildung 4.1: Weg einer Entwicklung

$\underline{x}_1$ und $\underline{y}$ bezeichnen die lokalen Koordinaten der Punkte P_2 und P_1 bezüglich Z_1. Nach Satz 2.15 lautet die Multipolentwicklung des Potentials einer Einheitsladung aus dem Punkt P_1 um Z_1

$$\Psi_{P_1}(\underline{x}_1) = \sum_{n=0}^{p} \sum_{m=-n}^{n} \|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{y}}) \frac{Y_n^m(\hat{\underline{x}}_1)}{\|\underline{x}_1\|_2^{n+1}}.$$

Weiter sei $\underline{x}_2$ die lokale Darstellung des Punktes P_2 bezüglich Z_2, und $\underline{w}_1 = Z_1 - Z_2$ eine Verschiebung. Eine Translation der Multipolentwicklung mit Satz 2.16 von Z_1 nach Z_2 liefert

$$\begin{aligned}\Psi_{P_1}(\underline{x}_2) &= \sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j}\sum_{n=0}^{j}\sum_{m=-n}^{n} i^{|k|-|m|-|k-m|}\frac{A_n^m A_{j-n}^{k-m}\|\underline{w}_1\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{w}}_1)}{A_j^k}\\ &\qquad \|\underline{y}\|_2^{j-n} Y_{j-n}^{-k+m}(\hat{\underline{y}})\frac{Y_j^k(\hat{\underline{x}}_2)}{\|\underline{x}_2\|_2^{j+1}}.\end{aligned}$$

Nun wird diese Multipolentwicklung in eine lokale Entwicklung konvertiert. Dabei findet eine Verschiebung von Z_2 nach Z_3 statt. Die lokale Darstellung des Punktes P_2 bezüglich Z_3 wird mit $\underline{x}_3$ bezeichnet. Mit $\underline{w}_2 = Z_2 - Z_3$ gilt dann nach Satz 2.17

$$\begin{aligned}\Psi_{P_1}(\underline{x}_3) &= \sum_{t=0}^{p}\sum_{s=-t}^{t}\sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j}(-1)^j i^{|s-k|-|s|-|k|}\frac{A_j^k A_t^s Y_{t+j}^{k-s}(\hat{\underline{w}}_2)}{A_{t+j}^{k-s}\|\underline{w}_2\|_2^{t+j+1}}\\ &\left(\sum_{n=0}^{j}\sum_{m=-n}^{n} i^{|k|-|m|-|k-m|}\frac{A_n^m A_{j-n}^{k-m}\|\underline{w}_1\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{w}}_1)}{A_j^k}\|\underline{y}\|_2^{j-n} Y_{j-n}^{-k+m}(\hat{\underline{y}})\right) Y_t^s(\hat{\underline{x}}_3)\|\underline{x}_3\|_2^t.\end{aligned}$$

Abschließend wird noch eine Translation dieser lokalen Entwicklung von Z_3 nach Z_4 mit $\underline{w}_3 = Z_3 - Z_4$ durchgeführt. $\underline{x}$ steht nun für die entsprechenden lokalen Koordinaten von P_2. Mit Satz 2.18 ergibt sich dann

$$\begin{aligned}\Psi_{P_1}(\underline{x}) &= \sum_{u=0}^{p}\sum_{v=-u}^{u}\left(\sum_{t=u}^{p}\sum_{s=-t}^{t}(-1)^{t+u} i^{|s|-|s-v|-|v|}\frac{A_{t-u}^{s-v}A_u^v Y_{t-u}^{s-v}(\hat{\underline{w}}_3)\|\underline{w}_3\|_2^{t-u}}{A_t^s}\right.\\ &\left(\sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j}(-1)^j i^{|s-k|-|s|-|k|}\frac{A_j^k A_t^s Y_{t+j}^{k-s}(\hat{\underline{w}}_2)}{A_{t+j}^{k-s}\|\underline{w}_2\|_2^{t+j+1}}\left(\sum_{n=0}^{j}\sum_{m=-n}^{n} i^{|k|-|m|-|k-m|}\right.\right. \\ &\left.\left.\left.\frac{A_n^m A_{j-n}^{k-m}\|\underline{w}_1\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{w}}_1)}{A_j^k}\|\underline{y}\|_2^{j-n}Y_{j-n}^{-k+m}(\hat{\underline{y}})\right)\right)\right) Y_u^v(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^u.\end{aligned} \tag{4.2}$$

Diese Summe entspricht der durch das Multipolverfahren durchgeführten Berechnung. Gelingt es nun, sie in die entsprechende Summe für $\Psi_{P_2}(\underline{y})$ umzuformen, ist die Symmetrie gezeigt. Sie besteht aus zwei Vierfachsummen, die jede für sich eine Abhängigkeit der einzelnen Summanden beinhaltet. Mit den Substitutionen $a = t-u$, $-b = s-v$ bzw. $c = j-n$, $-d = k-m$ erhält man unter Berücksichtigung von $A_n^{-m} = A_n^m$

$$\begin{aligned}\Psi_{P_1}(\underline{x}) &= \sum_{a=0}^{p}\sum_{b=-a}^{a}\sum_{t=a}^{p}\sum_{s=-t}^{t}(-1)^{2t-a} i^{|s|-|b|-|s-b|}\frac{A_a^b A_{t-a}^{s-b} Y_a^{-b}(\hat{\underline{w}}_3)\|\underline{w}_3\|_2^a}{A_t^s}\\ &\left(\sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j}(-1)^j i^{|s-k|-|s|-|k|}\frac{A_j^k A_t^s Y_{t+j}^{s-k}(\hat{\underline{w}}_2)}{A_{t+j}^{k-s}\|\underline{w}_2\|_2^{t+j+1}}\left(\sum_{c=0}^{p}\sum_{d=-c}^{c} i^{|k|-|k-d|-|d|}\right.\right.\\ &\left.\left.\frac{A_{j-c}^{k-d}A_c^d\|\underline{w}_1\|_2^{j-c}Y_{j-c}^{k-d}(\hat{\underline{w}}_1)}{A_j^k}\|\underline{y}\|_2^c Y_c^{-d}(\hat{\underline{y}})\right)\right) Y_{t-a}^{b-s}(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^{t-a}.\end{aligned}$$

Ein Vertauschen der Vierfachsummen liefert

$$\Psi_{P_1}(\underline{x}) = \sum_{j=0}^{p}\sum_{k=-j}^{j}\sum_{c=0}^{p}\sum_{d=-c}^{c} i^{|k|-|k-d|-|d|}\frac{A_{j-c}^{k-d}A_c^d\|\underline{w}_1\|_2^{j-c}Y_{j-c}^{k-d}(\underline{\hat{w}}_1)}{A_j^k}$$
$$\Bigg(\sum_{a=0}^{p}\sum_{b=-a}^{a}\sum_{t=a}^{p}\sum_{s=-t}^{t}(-1)^j i^{|s-k|-|s|-|k|}\frac{A_j^kA_t^sY_{t+j}^{s-k}(\underline{\hat{w}}_2)}{A_{t+j}^{k-s}\|\underline{w}_2\|_2^{t+j+1}}$$
$$(-1)^{2t-a}i^{|s|-|b|-|s-b|}\frac{A_a^bA_{t-a}^{s-b}Y_a^{-b}(\underline{\hat{w}}_3)\|\underline{w}_3\|_2^a}{A_t^s}Y_{t-a}^{s-b}(\underline{\hat{x}})\|\underline{x}\|_2^{t-a}\Bigg)\|\underline{y}\|_2^cY_c^d(\underline{\hat{y}}).$$

Vertauscht man nun die internen Sumationsreihenfolgen und fügt $(-1)^{2(j+a)} = 1$ ein, so gilt

$$\Psi_{P_1}(\underline{x}) = \sum_{c=0}^{p}\sum_{d=-c}^{c}\sum_{j=c}^{p}\sum_{k=-j}^{j}(-1)^{j+c} i^{|k|-|k-d|-|d|}\frac{A_{j-c}^{k-d}A_c^d(-1)^{j-c}Y_{j-c}^{k-d}(\underline{\hat{w}}_1)\|\underline{w}_1\|_2^{j-c}}{A_j^k}$$
$$\Bigg(\sum_{t=0}^{p}\sum_{s=-t}^{t}(-1)^t i^{|s-k|-|s|-|k|}\frac{A_j^kA_t^s(-1)^{t+j}Y_{t+j}^{s-k}(\underline{\hat{w}}_2)}{A_{t+j}^{k-s}\|\underline{w}_2\|_2^{t+j+1}}$$
$$\sum_{a=0}^{t}\sum_{b=-a}^{a}i^{|s|-|b|-|s-b|}\frac{A_a^bA_{t-a}^{s-b}(-1)^aY_a^{-b}(\underline{\hat{w}}_3)\|\underline{w}_3\|_2^a}{A_t^s}Y_{t-a}^{b-s}(\underline{\hat{x}})\|\underline{x}\|_2^{t-a}\Bigg)\|\underline{y}\|_2^cY_c^d(\underline{\hat{y}}).$$

Mit $Y_n^m(-\underline{\hat{w}}) = (-1)^nY_n^m(\underline{\hat{w}})$ lassen sich abschließend noch die Richtungen der Verschiebungsvektoren umkehren:

$$\Psi_{P_1}(\underline{x}) = \sum_{c=0}^{p}\sum_{d=-c}^{c}\sum_{j=c}^{p}\sum_{k=-j}^{j}(-1)^{j+c} i^{|k|-|k-d|-|d|}\frac{A_{j-c}^{k-d}A_c^dY_{j-c}^{k-d}(-\underline{\hat{w}}_1)}{A_j^k}\|\underline{w}_1\|_2^{j-c}$$
$$\Bigg(\sum_{t=0}^{p}\sum_{s=-t}^{t}(-1)^t i^{|k-s|-|s|-|k|}\frac{A_j^kA_t^sY_{t+j}^{s-k}(-\underline{\hat{w}}_2)}{A_{t+j}^{s-k}\|\underline{w}_2\|_2^{t+j+1}}$$
$$\sum_{a=0}^{t}\sum_{b=-a}^{a}i^{|s|-|b|-|s-b|}\frac{A_a^bA_{t-a}^{s-b}Y_a^{-b}(-\underline{\hat{w}}_3)\|\underline{w}_3\|_2^a}{A_t^s}Y_{t-a}^{b-s}(\underline{\hat{x}})\|\underline{x}\|_2^{t-a}\Bigg)\|\underline{y}\|_2^cY_c^d(\underline{\hat{y}}).$$

Diese Summe entspricht der Summe (4.2) für $\Psi_{P_2}(\underline{y})$. Werden mehrere Translationen nacheinander ausgeführt, so lassen sich diese genauso in die entsprechende Umkehrung transformieren. Somit wurde die Symmetrie gezeigt. □

4.2 Möglichkeiten zur Zeitersparnis

Der wesentlichste Schritt für eine schnellere Realisierung der Operatoren der Multipolmethode erfolgt durch den Übergang von der Darstellung (2.21) zur Formel (2.26). Der enorme Zeitgewinn durch diese neue Darstellung folgt hauptsächlich aus der Einsparung der Auswertungen der trigonometrischen Funktionen. Ein wesentliches Merkmal der Entwicklungen der Multipolmethode ist, daß die Koeffizienten M_n^m komplexwertig sind. Daher werden pro Koeffizient M_n^m zwei Speicherplätze benötigt. Allerdings muß nur etwas mehr als die Hälfte der Koeffizienten gespeichert werden, da es konjugiert–komplexe Paare gibt.

Korollar 4.2. *Für die Koeffizienten jeder Entwicklung während der Multipolmethode gilt*

$$M_n^{-m} = \overline{M_n^m}.$$

Beweis. Für die Koeffizienten bei der Erstellung der Multipolentwicklung gilt nach Satz 2.15 und (2.26) mit $m \geq 0$

$$M_n^m = \|\underline{x}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{\underline{x}}) = \|\underline{x}\|_2^n \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m P_n^{(m)}(\hat{x}_3)(\hat{x}_1 - i\hat{x}_2)^m$$

und damit

$$M_n^{-m} = \|\underline{x}\|_2^n Y_n^{m}(\hat{\underline{x}}) = \|\underline{x}\|_2^n \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m P_n^{(m)}(\hat{x}_3)(\hat{x}_1 + i\hat{x}_2)^m = \overline{M_n^m}.$$

Für die Koeffizienten nach einer Konvertierung oder einer Translation läßt sich mit den Formeln der entsprechenden Sätze die Übertragung dieser Eigenschaft von den alten auf die neuen Koeffizienten nachweisen. □

Diese Eigenschaft sorgt nicht nur für eine Reduzierung des Speicherbedarfs, sondern ermöglicht auch Einsparungen bei der Berechnung.

Eine weitere Möglichkeit zur Beschleunigung der Operationen zur Translation und Konvertierung der Entwicklungen kann durch die Realisierung der komplexen Multiplikation mit drei Fließkommamultiplikationen erzielt werden. Darüber hinaus können die Operationen durch geschicktes Aufschlüsseln der Formeln noch erheblich beschleunigt werden. So läßt sich beispielsweise die Konvertierung gegenüber der direkten Auswertung der Summen mindestens noch um den Faktor fünf beschleunigen. Dies soll hier allerdings nicht ausgeführt werden.

4.3 Ableitung der harmonischen Kugelfunktionen

Um später das Doppelschichtpotential und seinen adjungierten Operator mittels der Multipolmethode berechnen zu können, werden die Normalenableitungen der Kugelfunktionen benötigt. Entsprechende Formeln für die Reihenentwicklungen zur Helmholtz–Gleichung finden sich in [24].

Lemma 4.3. *Für einen Vektor $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$ gilt für die Normalenableitung der Kugelfunktionen mit $m \geq 0$*

$$\begin{aligned}\partial_{\underline{n}}(Y_n^{\pm m}(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^n) = (-1)^m \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}} \Big\{ \Big(n\gamma P_n^{(m)}(\hat{x}_3) - (n_3(\underline{x}) - \hat{x}_3\gamma) P_n^{(m+1)}(\hat{x}_3)\Big) (\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^m \\ + m((n_1(\underline{x}) - \hat{x}_1\gamma) \pm i(n_2(\underline{x}) - \hat{x}_2\gamma)) P_n^{(m)}(\hat{x}_3)(\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^\alpha \Big\} \|\underline{x}\|_2^{n-1}, \quad (4.3)\end{aligned}$$

wobei $P_n^{(n+1)} = 0$, $\alpha = \max\{m-1, 0\}$ und $\gamma = n_1(\underline{x})\hat{x}_1 + n_2(\underline{x})\hat{x}_2 + n_3(\underline{x})\hat{x}_3$ sind.

Beweis. Zur Vereinfachung der Schreibweise wird nun stets Y_n^m statt $Y_n^m(\underline{\hat{x}})$ verwendet. Aus Darstellung (2.26) läßt sich direkt nachrechnen, daß für $m > 0$ gilt

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} Y_n^{\pm m}(\underline{\hat{x}}) &= \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m m(\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^\alpha \frac{d^m}{d\hat{x}_3^m} P_n(\hat{x}_3), \\
\frac{\partial}{\partial \hat{x}_2} Y_n^{\pm m}(\underline{\hat{x}}) &= \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m m(\pm i)(\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^\alpha \frac{d^m}{d\hat{x}_3^m} P_n(\hat{x}_3), \\
\frac{\partial}{\partial \hat{x}_3} Y_n^{\pm m}(\underline{\hat{x}}) &= \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}(-1)^m (\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^m \frac{d^{m+1}}{d\hat{x}_3^{m+1}} P_n(\hat{x}_3).
\end{aligned}$$

Verwendet man dann noch die Ableitungen

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_1} \|\underline{x}\|_2^n &= n x_1 \|\underline{x}\|_2^{n-2}, \\
\frac{\partial}{\partial x_1} \hat{x}_1 &= \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{x_1}{\|\underline{x}\|_2}\right) = \frac{1}{\|\underline{x}\|_2} - \frac{x_1^2}{\|\underline{x}\|_2^3}, \\
\frac{\partial}{\partial x_1} \hat{x}_2 &= \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{x_2}{\|\underline{x}\|_2}\right) = -\frac{x_1 x_2}{\|\underline{x}\|_2^3},
\end{aligned}$$

so erhält man für $m \geq 0$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_1}(Y_n^{\pm m}\|\underline{x}\|_2^n) &= n x_1 \|\underline{x}\|_2^{n-2} Y_n^{\pm m} + \|\underline{x}\|_2^n \left\{ \left(\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} - \frac{x_1^2}{\|\underline{x}\|_2^3}\right) \frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} Y_n^{\pm m} \right. \\
&\qquad \left. - \frac{x_1 x_2}{\|\underline{x}\|_2^3} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_2} Y_n^{\pm m} - \frac{x_1 x_3}{\|\underline{x}\|_2^3} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_3} Y_n^{\pm m} \right\} \\
&= \|\underline{x}\|_2^{n-1} \left\{ n\hat{x}_1 Y_n^{\pm m} + (1-\hat{x}_1^2)\frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} Y_n^{\pm m} - \hat{x}_1\hat{x}_2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}_2} Y_n^{\pm m} - \hat{x}_1\hat{x}_3 \frac{\partial}{\partial \hat{x}_3} Y_n^{\pm m} \right\} \\
\frac{\partial}{\partial x_2}(Y_n^{\pm m}\|\underline{x}\|_2^n) &= \|\underline{x}\|_2^{n-1} \left\{ n\hat{x}_2 Y_n^{\pm m} - \hat{x}_1\hat{x}_2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} Y_n^{\pm m} + (1-\hat{x}_2^2)\frac{\partial}{\partial \hat{x}_2} Y_n^{\pm m} - \hat{x}_2\hat{x}_3 \frac{\partial}{\partial \hat{x}_3} Y_n^{\pm m} \right\} \\
\frac{\partial}{\partial x_3}(Y_n^{\pm m}\|\underline{x}\|_2^n) &= \|\underline{x}\|_2^{n-1} \left\{ n\hat{x}_3 Y_n^{\pm m} - \hat{x}_1\hat{x}_3 \frac{\partial}{\partial \hat{x}_1} Y_n^{\pm m} + \hat{x}_2\hat{x}_3 \frac{\partial}{\partial \hat{x}_2} Y_n^{\pm m} - (1-\hat{x}_3^2)\frac{\partial}{\partial \hat{x}_3} Y_n^{\pm m} \right\}
\end{aligned}$$

Dann gilt mit $\gamma := n_1(\underline{x})\hat{x}_1 + n_2(\underline{x})\hat{x}_2 + n_3(\underline{x})\hat{x}_3$ die Formel

$$\begin{aligned}
\partial_{\underline{n}}(Y_n^{\pm m}\|\underline{x}\|_2^n) &= n_1(\underline{x})\frac{\partial}{\partial x_1}(Y_n^{\pm m}\|\underline{x}\|_2^n) + n_2(\underline{x})\frac{\partial}{\partial x_2}(Y_n^{\pm m}\|\underline{x}\|_2^n) + n_3(\underline{x})\frac{\partial}{\partial x_3}(Y_n^{\pm m}\|\underline{x}\|_2^n) \\
&= \|\underline{x}\|_2^{n-1}\left\{ n\gamma Y_n^{\pm m} + \sum_{r=1}^{3}(n_r(\underline{x}) - \hat{x}_r\gamma)\frac{\partial}{\partial \hat{x}_r} Y_n^{\pm m} \right\} \\
&= (-1)^m \sqrt{\frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}} \left\{ \left(n\gamma P_n^{(m)}(\hat{x}_3) - (n_3(\underline{x}) - \hat{x}_3\gamma) P_n^{(m+1)}(\hat{x}_3) \right) (\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^m \right. \\
&\qquad \left. + m((n_1(\underline{x}) - \hat{x}_1\gamma) \pm i(n_2(\underline{x}) - \hat{x}_2\gamma)) P_n^{(m)}(\hat{x}_3)(\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^\alpha \right\} \|\underline{x}\|_2^{n-1}
\end{aligned}$$

mit $P_n^{(n+1)} = 0$ und $\alpha = \max\{m-1, 0\}$. □

Bemerkung 4.1. Auch für Entwicklungskoeffizienten, die aus der Normalenableitung der harmonischen Kugelfunktionen bestehen, gilt wieder

$$\overline{M_n^m} = \overline{\underline{n}_{\underline{x}} \cdot \nabla_{\underline{x}}(Y_n^{-m}(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^n)} = \underline{n}_{\underline{x}} \cdot \nabla_{\underline{x}}(Y_n^m(\hat{\underline{x}})\|\underline{x}\|_2^n) = M_n^{-m}.$$

Dies folgt aus der hergeleiteten Darstellung (4.3) und

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(Y_n^{-m}\|\underline{x}\|_2^n) = \overline{\frac{\partial}{\partial x_i}(Y_n^m\|\underline{x}\|_2^n)}.$$

4.4 Fehlerabschätzung für den Gradienten der Entwicklungen

Zunächst werden einige Hilfsmittel zusammengestellt, die anschließend bei der Herleitung der Fehlerabschätzungen häufig verwendet werden. Es gelten die Relationen

$$\nabla_{\underline{x}}\|\underline{x}\|_2^n = n\|\underline{x}\|_2^{n-1}\hat{\underline{x}}, \tag{4.4}$$

$$\nabla_{\underline{x}}\left(\frac{\underline{x}\cdot\underline{y}}{\|\underline{x}\|_2\cdot\|\underline{y}\|_2}\right) = \frac{\underline{y}\|\underline{x}\|_2\|\underline{y}\|_2 - (\underline{x}\cdot\underline{y})\|y\|_2\|\underline{x}\|_2^{-1}\underline{x}}{\|\underline{x}\|_2^2\|\underline{y}\|_2^2} = (\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}})\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} \tag{4.5}$$

und

$$\|\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}}\|_2^2 = (\hat{\underline{y}}\cdot\hat{\underline{y}}) - 2(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}})^2 + (\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}})^2(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{x}}) = 1 - \hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}}. \tag{4.6}$$

Korollar 4.4. *Für die verschiedene Potenzen der geometrischen Reihe gelten mit* $\|\underline{x}\|_2 < \|\underline{y}\|_2$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^n = \frac{1}{1-\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}}, \tag{4.7}$$

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^n\right)^2 = \sum_{n=0}^{\infty}(n+1)\left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^n, \tag{4.8}$$

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^n\right)^3 = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2}(n+1)(n+2)\left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^n. \tag{4.9}$$

Beweis. Bei der Relation (4.7) handelt es sich um die bekannte geometrische Reihe. Die beiden andere Beziehungen erhält man aus dem Cauchy–Produkt. □

Im folgenden werde die Differenz des Potentials und ihrer lokalen Entwicklung bzw. ihrer Multipolentwicklung bezeichnet als

$$D_l := \frac{1}{\|\underline{x}-\underline{y}\|_2} - \sum_{n=0}^{p}\frac{\|\underline{x}\|_2^n}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}}P_n(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}}), \tag{4.10}$$

$$D_M := \frac{1}{\|\underline{x}-\underline{y}\|_2} - \sum_{n=0}^{p}\frac{\|\underline{y}\|_2^n}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}}P_n(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}}). \tag{4.11}$$

Satz 4.5. *Seien $\underline{x}$, $\underline{y} \in \mathbb{R}^3$. Dann gelten für den Gradienten der Differenz des Potentials und seiner lokalen Entwicklung bzw. Multipolentwicklung die folgenden Fehlerabschätzungen:*

$$\|\nabla_{\underline{x}} D_l\|_2 \leq (1+\pi)\frac{1}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\left(p+1+\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\right)\frac{\|\underline{x}\|_2^p}{\|\underline{y}\|_2^{p+1}}, \tag{4.12}$$

$$\|\nabla_{\underline{x}} D_M\|_2 \leq (1+\pi)\frac{1}{\|\underline{x}\|_2 - \|\underline{y}\|_2}\left(p+1+\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{x}\|_2 - \|\underline{y}\|_2}\right)\frac{\|\underline{y}\|_2^{p+1}}{\|\underline{x}\|_2^{p+2}}. \tag{4.13}$$

Beweis. Mit (4.4) und (4.5) gilt fr den Gradienten der Differenz (4.10) bzgl. $\underline{x}$

$$\begin{aligned}
\|\nabla_{\underline{x}} D_l\|_2 &= \left\|\nabla_{\underline{x}} \sum_{n=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^n}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}} P_n(\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}})\right\|_2 \\
&= \left\|\sum_{n=p+1}^{\infty} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}}\left\{n\|\underline{x}\|_2^{n-1}\underline{\hat{x}}P_n(\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}}) + \|\underline{x}\|_2^n P_n'(\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}})\frac{1}{\|\underline{x}\|_2}(\underline{\hat{y}} - (\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}})\underline{\hat{x}})\right\}\right\|_2 \\
&\leq \sum_{n=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{n-1}}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}}\left\{n\|\underline{\hat{x}}\|_2|P_n(\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}})| + |P_n'(\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}})|\|\underline{\hat{y}} - (\underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{y}})\underline{\hat{x}}\|_2\right\}.
\end{aligned}$$

Unter Verwendung der Relation (4.6) und der Definition (2.22) der zugehörigen Legendre–Polynome sowie den Abschätzungen (2.12) und (2.23) ergibt sich

$$\begin{aligned}
\|\nabla_x D_l\|_2 &\leq \sum_{n=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{n-1}}{\|\underline{y}\|_2^{n+1}}\{n + \pi(n+1)\} \\
&= \frac{\|\underline{x}\|_2^p}{\|\underline{y}\|_2^{p+2}} \sum_{n=0}^{\infty} ((1+\pi)(p+n+1)+\pi)\left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^n.
\end{aligned}$$

Zur Vereinfachung der Ausdrücke wird weiter abgeschätzt

$$\|\nabla_x D_l\|_2 \leq (1+\pi)\frac{\|\underline{x}\|_2^p}{\|\underline{y}\|_2^{p+2}} \sum_{n=0}^{\infty} ((n+1)+(p+1))\left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^n.$$

Ersetzt man nun die verschiedenen Potenzen (4.7) und (4.8) der geometrischen Reihe durch ihre äquivalenten Brüche, so erhält man

$$\begin{aligned}
\|\nabla_{\underline{x}} D_l\|_2 &\leq (1+\pi)\frac{\|\underline{x}\|_2^p}{\|\underline{y}\|_2^{p+2}}\left\{\frac{p+1}{1-\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}} + \frac{1}{\left(1-\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^2}\right\} \\
&= (1+\pi)\frac{1}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\left(p+1+\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\right)\frac{\|\underline{x}\|_2^p}{\|\underline{y}\|_2^{p+1}}.
\end{aligned}$$

Mit den gleichen Mitteln läßt sich für die Differenz des Potentials und seiner Multipolentwicklung die entsprechende Abschätzung zeigen:

$$\begin{aligned}\|\nabla_{\underline{x}} D_M\|_2 &\leq (1+\pi)\frac{\|\underline{y}\|_2^{p+1}}{\|\underline{x}\|_2^{p+3}}\sum_{n=0}^{\infty}((n+1)+(p+1))\left(\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{x}\|_2}\right)^n \\ &= (1+\pi)\frac{1}{\|\underline{x}\|_2-\|\underline{y}\|_2}\left(p+1+\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{x}\|_2-\|\underline{y}\|_2}\right)\frac{\|\underline{y}\|_2^{p+1}}{\|\underline{x}\|_2^{p+2}}.\end{aligned}$$

□

Bemerkung 4.2. Durch Vertauschen der Vektoren $\underline{x}$ und $\underline{y}$ erhält man die entsprechenden Ergebnisse für den Gradienten bzgl. $\underline{y}$. Dabei vertauschen sich allerdings die Rollen der lokalen Entwicklung und der Multipolentwicklung.

Folgerung 4.6. *Seien $\|\underline{x}\|_2 < a$ und $\|\underline{y}\|_2 > da$ mit $a > 0$ sowie $d > 1$. Dann gelten für die Gradienten der Differenz zwischen dem Potential und seiner lokalen Entwicklung die Fehlerabschätzungen*

$$\|\nabla_{\underline{x}} D_l\|_2 \leq (1+\pi)\frac{1}{(d-1)a^2}\left(p+1+\frac{d}{d-1}\right)\left(\frac{1}{d}\right)^{p+1}, \tag{4.14}$$

$$\|\nabla_{\underline{y}} D_l\|_2 \leq (1+\pi)\frac{1}{(d-1)a^2}\left(p+1+\frac{d}{d-1}\right)\left(\frac{1}{d}\right)^{p+2}. \tag{4.15}$$

Beweis. Zunächst wendet man für die Abschätzung (4.15) obige Bemerkung auf (4.11) an und erhält

$$\|\nabla_{\underline{y}} D_l\|_2 \leq (1+\pi)\frac{1}{\|\underline{y}\|_2-\|\underline{x}\|_2}\left(p+1+\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2-\|\underline{x}\|_2}\right)\frac{\|\underline{x}\|_2^{p+1}}{\|\underline{y}\|_2^{p+2}}.$$

Daraus und aus (4.12) folgen dann die gewünschten Abschätzungen unter Berücksichtigung der Voraussetzungen, sowie

$$\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2-\|\underline{x}\|_2} = 1+\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2-\|\underline{x}\|_2} \leq 1+\frac{a}{da-a} = \frac{d}{d-1}. \tag{4.16}$$

□

Bemerkung 4.3. Vergleicht man diese Fehlerabschätzungen mit der Standardabschätzung (2.49) so deuten die zusätzlichen Konstanten, die quadratische Potenz von a und das Auftreten des Polynomgrads p als Faktor darauf hin, daß dieser höher gewählt werden muß, um die gleiche Genauigkeit zu erzielen.

4.5 Fehlerabschätzung des Gradienten der Normalenableitung

Im folgenden werde die Differenz der Normalenableitungen des Potentials und deren lokalen Entwicklung bezeichnet mit

$$N_{\underline{x}} := \underline{n}_{\underline{x}} \cdot \nabla_{\underline{x}}\left(\frac{1}{\|\underline{x}-\underline{y}\|_2} - \sum_{l=0}^{p}\frac{\|\underline{x}\|_2^l}{\|\underline{y}\|_2^{l+1}}P_l(\hat{\underline{x}}\cdot\hat{\underline{y}})\right). \tag{4.17}$$

Satz 4.7. *Für die lokale Entwicklung des Potentials von $\underline{y} \in \mathbb{R}^3$ im Punkt $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$ gelten für den Gradienten der Normalenableitungen die Fehlerabschätzungen*

$$\begin{aligned}\|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{x}}\|_2 \quad &\leq \quad \left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^{p-1} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2^2} \frac{4+2\pi}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} \left\{2\left(\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\right)^2\right. \\ &\qquad \left. + 2p \frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} + p(p+1)\right\}, \end{aligned} \tag{4.18}$$

$$\begin{aligned}\|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{y}}\|_2 \quad &\leq \quad \left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^{p} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2^2} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} \left\{4(2+\pi)\left(\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\right)^2\right. \\ &\qquad \left. + 2((2+\pi)p+\pi)\left(2\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} + (p+1)\right)\right\}. \end{aligned} \tag{4.19}$$

Beweis. Ausgehend von der Normalenableitung bzgl. $\underline{x}$ der Differenz zwischen dem Potential und dessen Entwicklung

$$\begin{aligned} N_{\underline{x}} \quad &= \quad \underline{n}_{\underline{x}} \cdot \nabla_{\underline{x}} \left(\frac{1}{\|\underline{x} - \underline{y}\|_2} - \sum_{l=0}^{p} \frac{\|\underline{x}\|_2^l}{\|\underline{y}\|_2^{l+1}} P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \right) \\ &= \quad \sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{l-1}}{\|\underline{y}\|_2^{l+1}} \left\{ l(\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}}) P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) + (\underline{n} \cdot \hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})(\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}})) P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \right\} \end{aligned}$$

gilt mit (4.4) und (4.5) für deren Gradienten

$$\begin{aligned} \nabla_{\underline{x}} N_{\underline{x}} = &\sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2^{l+1}} \Big\{ (l-1)\|\underline{x}\|_2^{l-2} \hat{\underline{x}} \left\{ l(\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}}) P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) + (\underline{n} \cdot \hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})(\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}})) P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \right\} \\ &+ \|\underline{x}\|_2^{l-1} \Big\{ l \frac{1}{\|\underline{x}\|_2} \left[(\underline{n} - (\hat{\underline{x}} \cdot \underline{n})\hat{\underline{x}}) P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) + (\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}}) P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})(\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}}) \right] \\ &+ (\underline{n} \cdot \hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})(\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}})) P_l''(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \frac{1}{\|\underline{x}\|_2} (\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}}) \\ &- P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \left[\frac{1}{\|\underline{x}\|_2} (\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}})(\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}}) + (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \frac{1}{\|\underline{x}\|_2} (\underline{n} - (\hat{\underline{x}} \cdot \underline{n})\hat{\underline{x}}) \right] \Big\} \Big\}. \end{aligned}$$

Durch Umsortieren und Zusammenfassen erhlt man daraus

$$\begin{aligned} \nabla_{\underline{x}} N_{\underline{x}} \quad = \quad \sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{l-2}}{\|\underline{y}\|_2^{l+1}} &\left\{ P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \left[l(l-2)\hat{\underline{x}}(\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}}) + l\underline{n} \right] \right. \\ &+ P_l''(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \quad \underline{n} \cdot (\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}})(\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}}) \\ &+ P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})(l-1) \left[\underline{n} \cdot (\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}})\hat{\underline{x}} + (\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})\hat{\underline{x}})(\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}}) \right] \\ &\left. - P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})(\underline{n} - (\hat{\underline{x}} \cdot \underline{n})\hat{\underline{x}})(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \right\}. \end{aligned}$$

Der Betrag dieses Gradienten läßt sich dann mittels der Dreiecksungleichung abschätzen und mit (4.6) und der Definition (2.22) der zugehörigen Legendre–Polynomen umformen zu

$$\begin{aligned} \|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{x}}\|_2 \quad \leq \quad \sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{l-2}}{\|\underline{y}\|_2^{l+1}} &\left\{ l(l-1)|P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})| + |P_l^2(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})| \right. \\ &\left. + 2(l-1)|P_l^1(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})| + 2|P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})| \right\}. \end{aligned}$$

Mit den Abschätzungen (2.12), (2.13), (2.23) und (2.24) ergibt sich daraus

$$\begin{aligned}
\|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{x}}\|_2 &\leq \sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{l-2}}{\|\underline{y}\|_2^{l+1}} \{l(l-1) + 2l(l+1) + 2(l-1)\pi(l+1) + l(l+1)\} \\
&\leq \frac{\|\underline{x}\|_2^{p-1}}{\|\underline{y}\|_2^{p+2}} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^l \{(4+2\pi)(l+p+1)(l+p+2)\} \\
&= \frac{\|\underline{x}\|_2^{p-1}}{\|\underline{y}\|_2^{p+2}} (4+2\pi) \sum_{l=0}^{\infty} \{(l+1)(l+2) + 2p(l+1) + p(p+1)\} \left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^n .
\end{aligned}$$

Die Reihenentwicklungen (4.7) bis (4.9) der verschiedenen Potenzen der geometrischen Reihe liefern dann das gesuchte Ergebnis

$$\begin{aligned}
\|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{x}}\|_2 &\leq (4+2\pi) \frac{\|\underline{x}\|_2^{p-1}}{\|\underline{y}\|_2^{p+2}} \left\{ \frac{2}{\left(1 - \frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^3} + \frac{2p}{\left(1 - \frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^2} + \frac{p(p+1)}{\left(1 - \frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)} \right\} \\
&= \frac{\|\underline{x}^{p-1}\|_2}{\|\underline{y}\|_2^{p+1}} \frac{4+2\pi}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} \left\{ 2 \left(\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\right)^2 + 2p \frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} + p(p+1) \right\} .
\end{aligned}$$

Aus der Normalenableitung der Differenz des Potentials und seiner Entwicklung bzgl. $\underline{y}$

$$\begin{aligned}
N_{\underline{y}} &= \underline{n}_{\underline{y}} \cdot \nabla_{\underline{y}} \left(\frac{1}{\|\underline{x} - \underline{y}\|_2} - \sum_{l=0}^{p} \frac{\|\underline{x}\|_2^l}{\|\underline{y}\|_2^{l+1}} \right) \\
&= \sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^l}{\|\underline{y}\|_2^{l+2}} \left\{ -(l+1)(\underline{n} \cdot \hat{\underline{y}}) P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) + (\underline{n} \cdot \hat{\underline{x}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})(\underline{n} \cdot \hat{\underline{y}})) P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \right\}
\end{aligned}$$

läßt sich erneut mit (4.4), (4.5) und einigen Umformungen deren Gradient

$$\begin{aligned}
\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{y}} = \sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{l-1}}{\|\underline{y}\|_2^{l+2}} \Big\{ & -P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \; l(l+1)(\underline{n} \cdot \hat{\underline{y}}) \hat{\underline{x}} \\
& + P_l''(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \quad \underline{n} \cdot (\hat{\underline{x}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \hat{\underline{y}})(\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \hat{\underline{x}}) \\
& + P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \big[l \underline{n} \cdot (\hat{\underline{x}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \hat{\underline{y}}) \hat{\underline{x}} + (\underline{n} - (\hat{\underline{x}} \cdot \underline{n}) \hat{\underline{x}}) \\
& \qquad - (l+2)(\underline{n} \cdot \hat{\underline{y}})(\hat{\underline{y}} - (\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}}) \hat{\underline{x}}) \big] \Big\}
\end{aligned}$$

berechnen. Die Abschätzungen (2.12), (2.13), (2.23) und (2.24) sowie (2.22) liefern diesmal

$$\begin{aligned}
\|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{y}}\|_2 &\leq \sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{l-1}}{\|\underline{y}\|_2^{l+2}} \Big\{ l(l+1) |P_l(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})| + |P_l^2(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})| \\
&\qquad + 2(l+1) |P_l^1(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})| + 2 |P_l'(\hat{\underline{x}} \cdot \hat{\underline{y}})| \Big\} . \\
&\leq \sum_{l=p+1}^{\infty} \frac{\|\underline{x}\|_2^{l-1}}{\|\underline{y}\|_2^{l+2}} \left\{ 4l(l+1) + 2(l+1)^2 \pi \right\} .
\end{aligned}$$

Durch eine Indexverschiebung folgt

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\|\underline{x}\|_2^p}{\|\underline{y}\|_2^{p+3}} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^l \{(4+2\pi)(l+p+1)(l+p+2) + 2\pi(l+p+2)\} \\
&\leq \frac{\|\underline{x}\|_2^p}{\|\underline{y}\|_2^{p+3}} \sum_{l=0}^{\infty} \{(4+2\pi)(l+1)(l+2) + ((4+2\pi)2p+4\pi)(l+1) \\
&\qquad + ((4+2\pi)p+2\pi)(p+1)\} \left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^l .
\end{aligned}
$$

Mit den Reihenentwicklungen (4.7) bis (4.9) der verschiedenen Potenzen der geometrischen Reihe erhält man das gewünschte Resultat

$$
\begin{aligned}
\|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{y}}\|_2 &\leq \frac{\|\underline{x}\|_2^p}{\|\underline{y}\|_2^{p+3}} \left\{ \frac{4(2+\pi)}{\left(1-\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^3} + 2\frac{(4+2\pi)p+2\pi}{\left(1-\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^2} + \frac{((4+2\pi)p+2\pi)(p+1)}{\left(1-\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)} \right\} \\
&= \left(\frac{\|\underline{x}\|_2}{\|\underline{y}\|_2}\right)^p \frac{1}{\|\underline{y}\|_2^2} \frac{1}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} \left\{ 4(2+\pi) \left(\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2}\right)^2 \right. \\
&\qquad \left. + 2((2+\pi)p+\pi) \left(2\frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{y}\|_2 - \|\underline{x}\|_2} + (p+1)\right) \right\} .
\end{aligned}
$$

□

Bemerkung 4.4. Für die Multipolentwicklungen des Potentials lassen sich mit dem gleichen Vorgehen entsprechende Fehlerabschätzungen herleiten.

Folgerung 4.8. *Seien $\|\underline{x}\|_2 < a$ und $\|\underline{y}\|_2 > da$ mit $a > 0$ sowie $d > 1$. Dann gelten für den Gradienten der Normalenableitungen des Potentials die folgenden Fehlerabschätzungen:*

$$
\|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{x}}\|_2 \leq \left(\frac{1}{d}\right)^{p+1} \frac{4+2\pi}{(d-1)a^3} \left\{ 2\left(\frac{d}{d-1}\right)^2 + 2p\frac{d}{d-1} + p(p+1) \right\} \tag{4.20}
$$

$$
\begin{aligned}
\|\nabla_{\underline{x}} N_{\underline{y}}\|_2 &\leq \left(\frac{1}{d}\right)^{p+2} \frac{1}{(d-1)a^3} \left\{ 4(2+\pi)\left(\frac{d}{d-1}\right)^2 \right. \qquad (4.21) \\
&\qquad \left. + 2((2+\pi)p+\pi)\left(2\frac{d}{d-1} + (p+1)\right) \right\} .
\end{aligned}
$$

Beweis. Dieses Resultat erhält man aus den Abschätzungen (4.18) und (4.19) unter Berücksichtigung der Voraussetzungen und (4.16). □

Kapitel 5

Realisierung der Integraloperatoren und der Matrixmultiplikation mittels des Multipolmethode

Nachdem durch das Galerkin–Verfahren und die Diskretisierung aus dem gemischten Randwertproblem (1.65) das lineare Gleichungssystem (1.57) gewonnen wurde, muß dieses numerisch gelöst werden. Dazu werden in der Regel Iterationsverfahren verwendet. Werden alle Einträge der vollbesetzten Steifigkeitsmatrix berechnet und abgespeichert, so benötigt man N^2 Speicherplätze, und sowohl die Berechnung der Einträge als auch eine einzelne Matrixmultiplikation führen zu einem Aufwand von $\mathcal{O}(N^2)$. Realisiert man aber die Matrixmultiplikation durch das Multipolverfahren, so muß nur ein kleiner Teil der Matrix erstellt werden, so daß nur ein Speicherbedarf von $\mathcal{O}(N \log^2 N)$ auftritt. Außerdem reduziert sich der Aufwand für eine Matrixmultiplikation auf $\mathcal{O}(N \log^2 N)$.
Zunächst gilt es, den Zusammenhang zwischen der Randelementmethode und der Multipolmethode herzustellen. Dieser besteht vor allem darin, daß die Fundamentallösung des Laplace–Operators

$$U^*(x,y) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\|x-y\|_2}$$

bis auf den Faktor dem Potential von Ladungsteilchen entspricht. Erfolgt die Berechnung der Elementeinträge durch numerische Integrationsformeln, so kann man deren Integrationspunkte mit den Teilchen der Multipolmethode bzw. deren Positionen identifizieren. Die Ladungen der Teilchen setzen sich zusammen aus den Integrationsgewichten und den Einträgen des Vektors aus der Matrixmultiplikation. Im folgenden werden die einzelnen Integraloperatoren im Detail besprochen. Dabei wird jeweils über den zugehörigen Teilrand summiert, ohne daß dies extra gekennzeichnet wird.
Zur Vereinfachung der Schreibweise werden noch einige Mengen eingeführt. Die Indexmenge $\mathcal{N}(i)$ enthält die Indizes der Knoten des Dreiecks i, und mit $\mathcal{P}(j)$ wird die Menge der Indizes aller Dreiecke, die zum Knoten j gehören, bezeichnet. Im folgenden wird die Integration auf den Dreiecken durch eine numerische Integrationsformel realisiert:

$$\int_{\tau_k} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N_g} \Delta_k \omega_{k,i} f(x_{k,i}).$$

5.1 Realisierung des Einfachschichtpotentials

Für das Einfachschichtpotential

$$(Vt)(x) = \int_\Gamma U^*(x,y)t(y)ds_y \qquad \text{für } x \in \Gamma \tag{5.1}$$

liefern das Galerkin–Verfahren und die Diskretisierung gemäß Abschnitt 1.6 die zugehörige Matrix V_h mit

$$V_h[l,k] = \langle V\varphi_k, \varphi_l \rangle_{L_2(\Gamma)}.$$

Diese wird nur für den Nahbereich der Multipolmethode (bezüglich l) erstellt. Daher muß nur eine dünn besetzte Matrix gespeichert werden. Zusammen mit dem Speicherbedarf für die Multipolmethode werden dann bei geeigneter Wahl des Nahbereiches nur $\mathcal{O}(N \log^2 N)$ Speicherplätze benötigt. Im folgenden wird mit konstanten Ansatzfunktionen

$$\varphi_k(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \in \tau_k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

auf den Dreiecken gearbeitet. Es lassen sich aber auch Ansatzfunktionen mit höherem Polynomgrad verwenden. Für diesen Fall wäre nur etwas zusätzlicher Aufwand nötig, um alle Funktionen, deren Träger das jeweilige Dreieck beinhalten, aufzusummieren. Betrachtet man die l–te Zeile der Matrixmultiplikation $V_h\underline{t}$ und spaltet diese in Nah– und Fernbereich der Multipolmethode bezüglich der Dreiecke τ_l auf, so erhält man

$$\begin{aligned}(V_h\underline{t})_l &= \sum_{\substack{k=1\\ Nahbereich}}^{n} V_h[l,k]t_k + \sum_{\substack{k=1\\ Fernfeld}}^{n} V_h[l,k]t_k \\ &= \sum_{\substack{k=1\\ Nahbereich}}^{n} V_h[l,k]t_k + \sum_{\substack{k=1\\ Fernfeld}}^{n} t_k \langle V\varphi_k, \varphi_l\rangle_{L_2(\Gamma)}.\end{aligned}$$

Nun realisiert man im Fernfeld das $L_2(\Gamma)$–Skalarprodukt auf τ_l mit einer geeigneten numerische Integrationsformel aus N_g Integrationspunkten

$$\begin{aligned}(V_h\underline{t})_l &= \sum_{\substack{k=1\\ Nahbereich}}^{n} V_h[l,k]t_k + \sum_{\substack{k=1\\ Fernfeld}}^{n} t_k \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_l \omega_{l,j} (V\varphi_k)(x_{l,j}) \\ &= \sum_{\substack{k=1\\ Nahbereich}}^{n} V_h[l,k]t_k + \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_l \omega_{l,j} \sum_{\substack{k=1\\ Fernfeld}}^{n} t_k \int_{\tau_k} \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\|x_{l,j}-y\|_2} ds_y.\end{aligned}$$

Auch die Integration für das Einfachschichtpotential wird durch eine numerische Integrationsformel realisiert. Dabei muß es sich nicht um eine andere wie oben handeln, da durch die Aussparung des Nahbereichs keine Singularitäten auftreten können. Wählt man die gleiche Formel, ist die Symmetrie der Matrix gewährleistet. Daher wird nun die gleiche numerische Integrationsformel wie oben gewählt.

$$(V_h\underline{t})_l = \sum_{\substack{k=1\\ Nahbereich}}^{n} V_h[l,k]t_k + \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_l \omega_{l,j} \sum_{\substack{k=1\\ Fernfeld}}^{n} \sum_{i=1}^{N_g} t_k \Delta_k \omega_{k,i} \frac{1}{\|x_{l,j}-x_{k,i}\|}. \tag{5.2}$$

Die Integrationspunkte werden nun mit den Ladungsteilchen der Multipolmethode identifiziert. Die Ladung eines Teilchen im Punkt $x_{i,k}$ ist $q_{i,k} = t_k \Delta_k \omega_{k,i}$. Somit läßt sich auf diese Darstellung die Multipolmethode nun problemlos anwenden. Für jede Zeile der Matrixmultiplikation sind N_g Auswertungen lokaler Entwicklungen nötig. Die Multipolmethode ermöglicht nur die Ausführung der Matrixmultiplikation $V_h \underline{t}$ oder, wenn man die äußere Integration wegläßt, die Auswertung des Einfachschichtpotentials in einzelnen Punkten. Die Matrix wird aber nicht explizit aufgestellt. Für jede Matrixmultiplikation muß das Multipolverfahren komplett neu gestartet werden, da sich bei einem neuen Vektor die Ladungen ändern. Die Gesamtzahl der Teilchen bei der Multipolmethode ist $N_g N$. Damit liegt der Aufwand für eine Matrixmultiplikation bei $\mathcal{O}(N \log^2 N)$. Dabei ist N die Gesamtzahl der vorhandenen Randelemente. Bei der Realisierung der Multipolmethode muß beachtet werden, daß nicht punktweise sondern elementweise über Nah– und Fernfeld entschieden wurde.

5.2 Realisierung des Doppelschichtpotential

Auch für das Doppelschichtpotential

$$\begin{aligned} (Ku)(x) &:= \;⨎_{\Gamma} [T_y^* U^*(x,y)] u(y) ds_y \\ &= \lim_{\rho \to 0} \int_{\|y-x\| \geq \rho,\ y \in \Gamma} [T_y^* U^*(x,y)] u(y) ds_y . \end{aligned} \tag{5.3}$$

führen das Galerkin–Verfahren auf dem Dirichlet–Rand und die Diskretisierung gemäß Abschnitt 1.6 zu einer Matrix mit

$$K_h[l,k] = \langle K\psi_k, \varphi_l \rangle_{L_2(\Gamma)} .$$

Nun werden speziell stückweise lineare und stetige Basisfunktionen über den Neumann-Knoten mit

$$\psi_k(x_j) = \delta_{kj}$$

betrachtet. Andere Funktionen lassen sich durch entsprechendes Umsortieren ähnlich behandeln. Für die Matrixmultiplikation $K_h \underline{u}$ wird zunächst die Summation bezüglich der Dreiecke umgeordnet:

$$\begin{aligned} (K_h \underline{u})_l &= \sum_{k=1}^{m} K_h[l,k] u_k = \sum_{k=1}^{m} \sum_{s \in \mathcal{P}(k)} u_k \langle K\psi_{k|\tau_s}, \varphi_l \rangle_{L_2(\Gamma)} \\ &= \sum_{s=1}^{\widetilde{m}} \sum_{k \in \mathcal{N}(s)} u_k \langle K\psi_{k|\tau_s}, \varphi_l \rangle_{L_2(\Gamma)} . \end{aligned}$$

Nun kann anhand der Dreiecke wieder in Nah– und Fernfeld unterteilt werden. Der Nahbereich wird erneut in einer dünn besetzten Matrix realisiert. Allerdings können sich deren Einträge von denen der Matrix aus dem Standardverfahren unterscheiden, da nicht anhand der Träger der Ansatzfunktionen sondern anhand der einzelnen Dreiecke in Nah– und Fernfeld unterschieden wurde. Im folgenden bezeichnet *Nb.* den Nahbereichsanteil der Matrixmultiplikation. Realisiert man wie beim Einfachschichtpotential die Integrationen mit einer numerische Integrationsformel, so erhält man

$$
\begin{aligned}
(K_h\underline{u})_l &= Nb. + \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_l \omega_{l,j} \sum_{\substack{s=1\\ Fernfeld}}^{\widetilde{m}} \sum_{k\in\mathcal{N}(s)} u_k (K\psi_{k|\tau_s})(x_{l,j}) \\
&= Nb. + \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_l \omega_{l,j} \sum_{\substack{s=1\\ Fernfeld}}^{\widetilde{m}} \sum_{k\in\mathcal{N}(s)} u_k \int_{\tau_s} \underline{n}_y \cdot \nabla_y \left(\frac{1}{\|x_{l,j}-y\|} \right) \psi_{k|\tau_s}(y) ds_y \\
&= Nb. + \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_l \omega_{l,j} \sum_{\substack{s=1\\ Fernfeld}}^{\widetilde{m}} \sum_{i=1}^{N_g} \Delta_s \omega_{s,i} \Bigg(\sum_{k\in\mathcal{N}(s)} u_k \psi_{k|\tau_s}(x_{s,i}) \Bigg) \left(\underline{n}_y \cdot \nabla_y \frac{1}{\|x_{l,j}-y\|} \right) \Bigg|_{y=x_{s,i}} \qquad (5.4)
\end{aligned}
$$

Ersetzt man nun das Potential eines einzelnen Punktes durch seine Multipoldarstellung

$$
\begin{aligned}
q_y \underline{n}_y \cdot \nabla_y \frac{1}{\|x-y\|} &= \underline{n}_y \cdot \nabla_y \left(\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} (q_y \|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{y})) \frac{Y_n^m(\hat{x})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}} \right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} q_y \underline{n}_y \cdot \nabla_y (\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{y})) \frac{Y_n^m(\hat{x})}{\|\underline{x}\|_2^{n+1}}, \qquad (5.5)
\end{aligned}
$$

so lassen sich die Initialisierungskoeffizienten

$$
M_n^m = q_y \underline{n}_y \cdot \nabla_y (\|\underline{y}\|_2^n Y_n^{-m}(\hat{y}))
$$

dieses Punktes mit der Formel (4.3) berechnen. Die zugehörigen Ladungen sind

$$
q_{s,i} = \Delta_s \omega_{s,i} \Bigg(\sum_{k\in\mathcal{N}(s)} u_k \psi_{k|\tau_s}(x_{s,i}) \Bigg).
$$

Damit läßt sich die Multipolmethode auch für das Doppelschichtpotential anwenden. Es muß lediglich die Initialisierung nach Satz 2.15 durch die Formel (5.5) ersetzt werden. Durch die neue Formel steigt der Aufwand zwar etwas an, dies fällt aber nicht ins Gewicht. Daher wird auch die Matrixmultiplikation für das Doppelschichtpotential mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(N \log^2 N)$ durchgeführt.

5.3 Realisierung des adjungierten Doppelschichtpotentials

Beim adjungierten Doppelschichtpotential

$$
(K't)(x) := \fint_{\Gamma} [T_x^* U^*(x,y)]^T t(y) ds_y \qquad (5.6)
$$

erhält man durch das Galerkin–Verfahren auf dem Neumann–Rand und die Diskretisierung für die Matrix K'_h die Darstellung

$$
K'_h[l,k] = \langle K'\varphi_k, \psi_l \rangle_{L_2(\Gamma)} = \langle K\psi_l, \varphi_k \rangle_{L_2(\Gamma)}.
$$

Die Doppelschichtmatrix kann nun nicht transponiert werden, da sie bei Verwendung der Multipolmethode nicht explizit erstellt wird, und die Summation nicht entsprechend vertauscht werden kann. Somit kann das Fernfeld des adjungierten Doppelschichtpotentials nicht auf das Doppelschichtpotential zurückgeführt werden. Folglich muß nun die Matrixmultiplikation $K_h'\underline{t}$ entsprechend umgeformt werden, bis sie mittels der Multipolmethode realisierbar ist. Dazu wird die Ansatzfunktion $\psi_l(x)$ auf die einzelnen Dreiecke des Trägers aufgespaltet und dann in Nah– und Fernfeld unterschieden. Der Nahbereich wird wieder mir $Nb.$ abgekürzt.

$$\begin{aligned}
(K_h'\underline{t})_l &= \sum_{k=1}^{n} K_h'[l,k]t_k = \sum_{k=1}^{n} \langle K'\varphi_k, \psi_l\rangle_{L_2(\Gamma)} t_k \\
&= \sum_{r\in\mathcal{P}(l)} \sum_{k=1}^{n} t_k \langle K'\varphi_k, \psi_{l|\tau_r}\rangle_{L_2(\Gamma)} \\
&= Nb. + \sum_{r\in\mathcal{P}(l)} \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_r \omega_{r,j} \psi_{l|\tau_r}(x_{r,j}) \sum_{\substack{k=1 \\ Fernfeld}}^{n} t_k (K'\varphi_k)(x_{r,j}).
\end{aligned}$$

Dabei wurde im letzten Umformungsschritt die Integration durch eine geeignete numerische Integrationsformel ersetzt. Realisiert man nun noch das Integral beim adjungierten Doppelschichtpotential durch die numerische Integrationsformel und zieht dann die Konormalenableitung nach vorne, so erhält man

$$\begin{aligned}
(K_h'\underline{t})_l &= Nb. + \sum_{r\in\mathcal{P}(l)} \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_r \omega_{r,j} \psi_{l|\tau_r}(x_{r,j}) \sum_{\substack{k=1 \\ Fernfeld}}^{n} \sum_{i=1}^{N_g} \Delta_k \omega_{k,i} t_k \left(\underline{n}_x \cdot \nabla_x \frac{1}{\|x - x_{k,i}\|} \right) \Bigg|_{x=x_{r,j}} \\
&= Nb. + \sum_{r\in\mathcal{P}(l)} \sum_{j=1}^{N_g} \Delta_r \omega_{r,j} \psi_{l|\tau_r}(x_{r,j})\ \underline{n}_x \cdot \nabla_x \left(\sum_{\substack{k=1 \\ Fernfeld}}^{n} \sum_{i=1}^{N_g} \Delta_k \omega_{k,i} t_k \frac{1}{\|x - x_{k,i}\|} \right) \Bigg|_{x=x_{r,j}}.
\end{aligned}$$

Nun kann für den Klammerterm die Multipolmethode genau wie beim Einfachschichtpotential durchgeführt werden, allerdings muß die Konormalenableitung bei der Auswertung der lokalen Entwicklungen mit

$$\begin{aligned}
\underline{n}_x \cdot \nabla_x \frac{1}{\|x - y\|} &= \underline{n}_x \cdot \nabla_x \left(\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} L_n^m Y_n^m(\hat{x}) \|\underline{x}\|_2^{n+1} \right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} L_n^m\ \underline{n}_x \cdot \nabla_x \left(Y_n^m(\hat{x}) \|\underline{x}\|_2^{n+1} \right) \qquad (5.7)
\end{aligned}$$

berücksichtigt werden. Dies erfolgt mittels der Formel (4.3). Da diesmal nur die Formel für die Auswertung einer lokalen Entwicklung verändert wurde, arbeitet die Multipolmethode auch hier mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(N \log^2 N)$.

5.4 Realisierung des hypersingulären Operators

Für den hypersingulären Operator

$$\lim_{\Omega \ni \widetilde{x} \to x \in \Omega} T_x(Wu)(\widetilde{x}) = T_x \int_\Gamma u(y) T_y^* U^*(x,y) u(y) ds_y =: -(Du)(x) \tag{5.8}$$

könnte man nun die Formeln für das Doppelschichtpotential und seinen adjungierten Operator kombinieren und die Normalenableitungen bei der Erstellung der Koeffizienten und der Auswertung der lokalen Entwicklung anwenden. Allerdings deuten die Fehlerabschätzungen der Multipolmethode darauf hin, daß der Polynomgrad p der Multipolentwicklung für jede Realisierung einer Normalenableitung erhöht werden muß. Da der Aufwand der Multipolmethode den Anteil p^4 enthält, würde sich diese Erhöhung bei den realisierbaren Dimensionen noch sehr stark auswirken.
Daher wird hier ein anderes Vorgehen gewählt. Das Galerkin–Verfahren auf dem Neumann–Rand und die Diskretisierung nach Abschnitt 1.6 liefern die Matrixdarstellung

$$D_h[l,k] = \langle D\psi_k, \psi_l \rangle_{L_2(\Gamma)}.$$

Die Idee ist nun, den hypersingulären Operator durch partielle Integration auf das Einfachschichtpotential zurückzuführen. Sie geht auf Arbeiten von Maue [44] und Nédélec [19, 48] zurück. Da die hier vorliegenden Funktionen und die Randfläche den dortigen Voraussetzungen nicht genügen, muß dieser Zugang erweitert werden.

Definition 5.1 (Oberflächenrotation)**.** Sei Γ ein glattes Flächenstück im $\mathbb{R}^3$. Dann wird einer Funktion $u \in C^1(\Gamma)$ mit

$$\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u(x) := \underline{n}_x \times \nabla u_\Gamma^*(x) \tag{5.9}$$

für $x \in \Gamma$ ein tangentiales Vektorfeld zugeordnet. Dabei bezeichnet $u_\Gamma^*(x)$ die konstante Fortsetzung der Funktion $u(x)$ entlang der Normalen $\underline{n}_x$ in eine genügend kleine Umgebung von Γ.

Damit läßt sich nun der folgende Satz formulieren.

Satz 5.1. *Sei Γ eine Lipschitz–Fläche im $\mathbb{R}^3$ mit $\overline{\Gamma} = \bigcup_{i=1}^N \overline{\Gamma}_i$ und $\Gamma_i \cap \Gamma_j = 0$ für $i \neq j$. Jede Teilfläche Γ_i sei glatt und besitze einen stückweise glatten Rand $\partial\Gamma_i$. Weiter seien die Funktionen u und v stetig auf Γ und auf jeder Teilfläche Γ_i glatt. Dann gilt:*

$$\langle Du, v \rangle_{L_2(\Gamma)} = \langle V \, \underline{curl}_\Gamma u, \underline{curl}_\Gamma v \rangle_{L_2(\Gamma)}. \tag{5.10}$$

Beweis. Eine ausführliche Darstellung der Zusammenhänge und der Beweis dieses Satzes finden sich in [7]. □

Um nun die Multipolmethode für das Einfachschichtpotential ohne Änderungen verwenden zu können, ist es notwendig, den Ansatzraum W_h so zu wählen, daß die Oberflächenrotation seiner Ansatzfunktionen ψ_j im Ansatzraum V_h liegen. Für die hier gewählten stückweise linearen und stückweise konstanten Ansatzfunktionen ist dies mit

$$\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma \psi_k \big|_{\tau_i} = konst$$

der Fall. Ansonsten müßte die Durchführung der Multipolmethode für das Einfachschichtpotential noch auf die entsprechenden Funktionen erweitert werden.
Im vorliegenden Fall kann nun der Satz 5.1 auf die Matrixmultiplikation $D_h\underline{u}$ angewandt werden. Für die l–te Zeile der Matrixmultiplikation gilt damit

$$\begin{aligned}(D_h\underline{u})_l &= \sum_{k=1}^{m} D_h[l,k]u_k = \sum_{k=1}^{m} u_k \langle D\psi_k, \psi_l\rangle_{L_2(\Gamma)} \\ &= \sum_{k=1}^{m} u_k \langle V\,\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_k, \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_l\rangle_{L_2(\Gamma)}.\end{aligned}$$

Schränkt man die Ansatzfunktionen auf ihre einzelnen Formfunktionen auf dem jeweiligen Dreieck ein, so sind die Oberflächenrotationen der Formfunktionen stückweise konstant. Somit kann das Skalarprodukt aus den Oberflächenrotationen vorgezogen werden. Summiert man dann noch über die Dreiecke statt über die Knoten bzw. die entsprechenden Formfunktionen, so erhält man

$$\begin{aligned}(D_h\underline{u})_l &= \sum_{k=1}^{m} u_k \sum_{i\in\mathcal{P}(k)} \sum_{j\in\mathcal{P}(l)} (\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_{k|\tau_i}\cdot\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_{l|\tau_j})\langle V\varphi_i,\varphi_j\rangle_{L_2(\Gamma)} \\ &= \sum_{j\in\mathcal{P}(l)} \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_{l|\tau_j}\cdot \sum_{s=1}^{\widetilde{m}} \sum_{k\in\mathcal{N}(s)} u_k\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_{k|\tau_s}\langle V\varphi_s,\varphi_j\rangle_{L_2(\Gamma)}.\end{aligned}$$

Nun lassen sich mit

$$q_s^{(r)} := \sum_{k\in\mathcal{N}(s)} u_k \left(\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_{k|\tau_s}\right)_r$$

die Vektoren $\underline{q}^{(r)}$ für $r = 1,2,3$ für die Matrixmultiplikationen mit V_h ablesen, und es gilt

$$\begin{aligned}(D_h\underline{u})_l &= \sum_{j\in\mathcal{P}(l)} \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_{l|\tau_j}\cdot\left(\sum_{s=1}^{\widetilde{m}} V_h[j,s]q_s^{(r)}\right)_{r=1,2,3} \\ &= \sum_{j\in\mathcal{P}(l)} \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma\psi_{l|\tau_j}\cdot\Big((V_h\underline{q}^{(r)})_j\Big)_{r=1,2,3}.\end{aligned} \tag{5.11}$$

Somit ist es nun gelungen, die Matrixmultiplikation mit D_h auf drei Matrixmultiplikationen mit V_h zurückzuführen. Da der Aufwand zur Erstellung der Vektoren $\underline{q}^{(r)}$ und die Berechnung der Skalarprodukte jeweils von linearem Aufwand sind, beläuft sich der Gesamtaufwand wie beim Einfachschichtpotential auf $\mathcal{O}(N\log^2 N)$.

5.5 Anmerkungen zur Realisierung

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, den Nahbereich zu wählen. Anders als hier beschrieben, kann auch jeder Integrationsknoten einzeln einem Cluster zuzuordnen werden. Dann könnten einzelne Integrationsknoten eines Dreiecks in verschiedenen Clustern liegen. Somit wären Korrekturterme notwendig, damit im Nahbereich nur komplette Dreiecke enthalten sind, so daß der Nahbereich auf herkömmliche Weise berechnet werden kann.

Bei dem hier gewählten Vorgehen, werden alle Integrationspunkte eines Dreiecks nur einem Cluster zugeordnet. Dadurch fransen die Cluster etwas aus und die Clusterradien und der Nahbereich werden etwas größer. Dadurch steigt der Aufwand etwas an. Dies geschieht aber auch bei der Verwendung der Korrekturterme. Die Vorteile dieses Vorgehens liegen darin, daß bei der Ausführung keine Korrekturterme benötigt werden, und alle Integrationspunkte eines Dreiecks von der Multipolmethode gleich behandelt werden. Außerdem stellen die Dreiecke eine erste natürliche Clusterung dar.

Bisher wurde immer davon ausgegangen, daß es sich bei den Randelementen um Dreiecke handelt. Für die Multipolmethode spielt die Geometrie der Teilflächen allerdings keine Rolle. Sie muß lediglich bei der Wahl der numerische Integrationsformeln und bei der Clusterung beachtet werden.

Auch beim Multipolverfahren lohnt es sich, nur den jeweils relevanten Teilbereich des Randes und den damit verbunden Teilbaum der Clusterstruktur zu berücksichtigen. Dadurch wird das Verfahren deutlich schneller, aber es kommt zu keiner Änderung des asymptotischen Verhaltens.

Bei geschickter Realisierung läßt sich die Blockschiefsymmetrie der Matrix aus (1.57) gewährleisten.

Satz 5.2. *Wird bei den zuvor beschriebenen Realisierungen der Teilmatrizen jeweils für beide Integrationen die gleiche numerische Integrationsformel verwendet, und wird bei der Multipolmethode die Entscheidung über das Nahfeld symmetrisch getroffen, dann ist die Matrix*

$$\begin{pmatrix} V_h & -K_h \\ K_h^T & D_h \end{pmatrix}$$

des linearen Gleichungssystems (1.57) blockschiefsymmetrisch, und eine Matrixmultiplikation erfordert einen Aufwand von $\mathcal{O}(N \log^2 N)$.

Beweis. Um die Symmetrie des Multipolverfahrens untersuchen zu können, werden jeweils nur die Integrationsknoten der zu den jeweiligen Matrixeinträgen gehörenden Träger berücksichtigt. Da für die beide Integrationen die gleiche numerische Integrationsformel verwendet wurde, sind die Punkte für die zu vergleichenden Fälle identisch. Aufgrund des Überlagerungsprinzips folgt die Symmetrie der Matrix V_h für das Einfachschichtpotential dann direkt aus Satz 4.1. Die symmetrische Wahl des Nahbereichs gewährleistet, daß die Wege der Transformationen bei der Multipolmethode bis auf die umgekehrte Richtung übereinstimmen und der Satz 4.1 anwendbar ist.
Die Symmetrie der Matrix D_h folgt dann direkt aus der Rückführung auf die Matrixmultiplikation mit V_h.
Läßt man das Vorzeichen außer acht, so bleibt nur noch die Symmetrie zwischen K_h und K_h' zu zeigen. Dies geschieht gleich wie bei der Symmetrie der Matrix V_h. Es muß nur jeweils die Normalenableitung an der entsprechenden Stelle eingefügt werden. Dann lassen sich die Entwicklungen wie im Beweis zu Satz 4.1 ineinander überführen.
Die Aufwandsabschätzungen für die einzelnen Teilblöcke erfolgten schon in den vorangegangenen Abschnitten, als ihre Realisierung besprochen wurde. Diese sind hier nur noch zusammenzufassen. □

Kapitel 6

Konvergenzanalysis und Fehlerabschätzungen

Die Multipolmethode realisiert die einzelnen Integraloperatoren aufgrund des endlichen Polynomgrades der verwendeten Entwicklungen nur näherungsweise. Daraus ergeben sich Fragen nach dem Erhalt der Eindeutigkeit der Lösung, dem zusätzlichen Fehler und dem Einfluß auf das Konvergenzverhalten. Außerdem sind Aussagen über die Wahl der Parameter der Multipolmethode interessant. Ein durch die Multipolmethode approximierter Integraloperator A wird im folgenden mit $\widetilde{A}$ bezeichnet. Außerdem wird stets die Gültigkeit der inversen Ungleichung (1.50) vorausgesetzt. Soll die Lösung u eines Variationsproblems

$$a(u,v) = f(v) \qquad \text{für alle } v \in Z \tag{6.1}$$

wie in (1.43) bestimmt werden, so lassen sich im allgemeinen die Bilinearform $a(\cdot,\cdot)$ und die Linearform $f(\cdot)$ nicht wirklich exakt berechnen. Stattdessen kann nur ein gestörtes Variationsproblem

$$\widetilde{a}(\widetilde{u}_h, v_h) = \widetilde{f}(v_h) \qquad \text{für alle } v_h \in Z_h \in Z \tag{6.2}$$

betrachtet werden, dessen Lösung $\widetilde{u}_h \in Z_h$ ist. Dabei sorgen beispielsweise die numerische Integration, das Multipolverfahren und die Interpolation der Randbedingungen durch die gewählten Ansatzfunktionen für zusätzliche Fehlerquellen. Ein wesentliches Hilfsmittel zur Fehlerabschätzung eines gestörten Problems ist der folgende Satz.

Satz 6.1 (Strang–Lemma)**.** *Sei die gestörte Bilinearform aus (6.2) Z_h–elliptisch. Dann gilt für des gestörte Variationsproblem (6.2) die Fehlerabschätzung*

$$\begin{aligned} \|u - \widetilde{u}_h\|_Z \;\leq\; & \frac{1}{c_1^{\widetilde{a}}} \left(\inf_{v_h \in Z_h} \left\{ (c_1^{\widetilde{a}} + c_2^{a}) \, \|u - v_h\|_Z + \sup_{w_h \in Z_h} \frac{|a(v_h,w_h) - \widetilde{a}(v_h,w_h)|}{\|w_h\|_Z} \right\} \right. \\ & \left. + \sup_{w_h \in Z_h} \frac{|f(w_h) - \widetilde{f}(w_h)|}{\|w_h\|_Z} \right). \end{aligned} \tag{6.3}$$

Beweis. siehe [12]. □

Um nun die Fehler bei der Approximation der Bilinearform und der Linearform aus der Variationsformulierung (1.43) für die symmetrischen Formulierung abschätzen zu können, werden nun die Fehler bei der Approximation der einzelnen Integraloperatoren untersucht.

Für das Einfachschichtpotential kann die Wahl der Parameter aus der Anwendung der Multipolmethode für die Teilchensimulation übernommen werden. Diese wurde in Abschnitt 3.3 beschrieben. Für das Doppelschichtpotential ist hingegen die Fehlerabschätzung (4.15) für den Gradienten der Entwicklungen der Multipolmethode interessant. Bei der Realisierung des Doppelschichtpotentials soll die Abschätzung

$$\sum_{i=1}^{NN_g} \|\nabla_{\underline{y}} D_{l,i}\|_2 \leq (1+\pi)\frac{cN}{(d-1)a^2}\left(p+1+\frac{d}{d-1}\right)\left(\frac{1}{d}\right)^{p+2} < konst.$$

gelten. Dies wird durch

$$d^{p+2} \sim N^2$$

auch für (3.3) gewährleistet. Dabei bleibt die Beziehung $p \in \mathcal{O}(\log_d N)$ erhalten. Es werden lediglich die Konstanten größer. Daher ändert sich auch nichts an der Zeitkomplexität der Multipolmethode. Diese Wahl eines höheren Entwicklungsgrades p hat sich in numerischen Experimenten als sinnvoll erwiesen. Außerdem ist eine Auswertung des Doppelschichtpotentials für stückweise lineare Funktionen auch bei anderen Berechnungsformeln teurer als die Auswertung des Einfachschichtpotentials für stückweise konstante Funktionen. Um nachher das Konvergenzverhalten analysieren zu können, werden zunächst die einzelnen Parameter der Multipolmethode in Abhängigkeit von der Maschenweite

$$h = \Delta_{\max}^{1/2} = \max_{i=1,\ldots,N} \Delta_i^{1/2}$$

ausgedrückt. Die Gesamtzahl N der Elemente der betrachteten Struktur verhält sich wie $\mathcal{O}(1/h^2)$. Eingesetzt in (3.3) und (3.4) erhält man die folgenden Ergebnisse.

Folgerung 6.2. *Die Parameter des Multipolverfahrens verhalten sich gegenüber der Maschenweite h wie folgt:*

$$\text{Clusterradius } a \geq ch\log\frac{1}{h^2}, \tag{6.4}$$

$$\text{Polynomgrad } p \in \mathcal{O}(\log(1/h^2)). \tag{6.5}$$

Weiter gilt aufgrund der Wahl von p je nach Operator

$$\left(\frac{1}{d}\right)^{p+1} \sim h^3 \qquad \text{bzw. } h^4. \tag{6.6}$$

Proposition 6.3. *Die Summennorm und die euklidischen Norm sind äquivalent. Für einen Vektor $\underline{v} \in \mathbb{R}^n$ gelten folgenden Abschätzungen:*

$$\|\underline{v}\|_2 \leq \|\underline{v}\|_1 \leq \sqrt{n}\|\underline{v}\|_2. \tag{6.7}$$

Beweis. Zunächst läßt sich mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung zeigen, daß

$$\|\underline{v}\|_1 = \sum_{k=1}^{n} |v_k|\cdot 1 \leq \left(\sum_{k=1}^{n} v_k^2\right)^{1/2}\left(\sum_{k=1}^{n} 1\right)^{1/2} = \sqrt{n}\|\underline{v}\|_2$$

ist. Außerdem gilt offensichtlich

$$\|\underline{v}\|_2^2 = \sum_{k=1}^{n} v_k^2 \leq \left(\sum_{k=1}^{n} |v_k|\right)^2 = \|\underline{v}\|_1^2.$$

□

Lemma 6.4. *Für eine Funktion $u \in H^\sigma(\Gamma)$ mit $\sigma \in [\frac{1}{2}, 1]$ ist ihre Rotation ein stetiger Operator*

$$\sum_{r=1}^{3} \left\| \underline{curl}_\Gamma u\big|_r \right\|_{H^{\sigma-1}(\Gamma)} \leq c \, \|u\|_{H^\sigma(\Gamma)} \,. \tag{6.8}$$

Außerdem gilt für $u \in \widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)$

$$\sum_{r=1}^{3} \left\| \underline{curl}_\Gamma u\big|_r \right\|^2_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_N)} \geq c \, \|u\|^2_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \,. \tag{6.9}$$

Beweis. Durch die Rückführung des hypersingulären Operators auf das Einfachschichtpotential nach Satz 5.1 folgt aus dessen Elliptizität

$$\langle Du, u\rangle_{L_2(\Gamma)} = \sum_{r=1}^{3} \langle V \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u\big|_r, \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u\big|_r \rangle_{L_2(\Gamma)} \geq \sum_{r=1}^{3} c_1^V \left\| \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u\big|_r \right\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} \,.$$

Mit der Stetigkeit des hypersingulären Operators erhält man dann

$$\sum_{r=1}^{3} c_1^V \left\| \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u\big|_r \right\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} \leq \langle Du, u\rangle_{L_2(\Gamma)} \leq c_2^D \, \|u\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)} \,.$$

Außerdem gilt die Behauptung (6.8) auch für $\sigma = 1$ (vgl. [8]). Durch Interpolation (vgl. z.B. [43]) läßt sich dieses Ergebnis auf alle $\sigma \in [\frac{1}{2}, 1]$ übertragen.
Die Behauptung (6.9) folgt direkt aus der Elliptizität des hypersingulären Operators und der Beschränktheit des Einfachschichtpotentials

$$c_1^D \, \|u\|^2_{\widetilde{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_N)} \leq \langle Du, u\rangle_{L_2(\Gamma_N)} = \sum_{r=1}^{3} \langle V \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u\big|_r, \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u\big|_r \rangle_{L_2(\Gamma_N)} \leq \sum_{r=1}^{3} c_2^V \left\| \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u\big|_r \right\|^2_{\widetilde{H}^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_N)} \,.$$

□

6.1 Elliptizität der approximierten Operatoren

Ein wesentliches Hilfsmittel, um die Eindeutigkeit der Lösung zeigen zu können, ist die Elliptizität der Bilinearform im Ansatzraum. Für die eindeutige Lösbarkeit der symmetrischen Formulierung ist lediglich die Elliptizität des Einfachschichtpotentials und des hypersingulären Operators erforderlich.

Lemma 6.5. *Die Parameter der Multipolmethode lassen sich so wählen, daß*

$$N \frac{\Delta_{max}}{da - a} \left(\frac{1}{d}\right)^{p+1} c_I h^{-1} \leq \frac{c_1^V}{2}$$

gilt und die Approximationen des Einfachschichtpotentials und des hypersingulären Operators mittels der Multipolmethode elliptisch in ihren Ansatzräumen sind, d.h. es gilt für alle $t_h \in W_h$ bzw. $u_h \in V_h$:

$$\langle \widetilde{V} t_h, t_h\rangle_{L_2(\Gamma)} \geq c_1^{\widetilde{V}} \, \|t_h\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} \,, \tag{6.10}$$

$$\langle \widetilde{D} u_h, u_h\rangle_{L_2(\Gamma_N)} \geq c_1^{\widetilde{D}} \, \|u_h\|^2_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)} \,. \tag{6.11}$$

Beweis. Zunächst wird die V_h–Elliptizität des approximierten Einfachschichtpotentials $\widetilde{V}$ über die Elliptizität des Einfachschichtpotentials V selbst gezeigt:

$$\begin{aligned}\langle \widetilde{V} t_h, t_h \rangle_{L_2(\Gamma)} &= \langle V t_h, t_h \rangle_{L_2(\Gamma)} - \langle (V - \widetilde{V}) t_h, t_h \rangle_{L_2(\Gamma)} \\ &\geq c_1^V \, \| t_h \|_{H^{-1/2}(\Gamma)} - \left| \langle (V - \widetilde{V}) t_h, t_h \rangle_{L_2(\Gamma)} \right| .\end{aligned}$$

Es bleibt noch der zweite Term abzuschätzen. Dazu wird die Fehlerabschätzung (2.49) mit der Bedingung $\|x\|_2 \geq (d+1)a$ unter Verwendung des Überlagerungsprinzips benutzt

$$\begin{aligned}\left| \langle (V - \widetilde{V}) t_h, t_h \rangle_{L_2(\Gamma)} \right| &= \left| \int_\Gamma (V - \widetilde{V}) t_h(x) \cdot t_h(x) ds_x \right| \\ &\leq \int_\Gamma |(V - \widetilde{V}) t_h(x)| \cdot |t_h(x)| ds_x \\ &= \sum_{j=1}^N |t_j| \int_{\tau_j} |(V - \widetilde{V}) t_h(x)| \cdot |\varphi(x)| ds_x \\ &\leq \frac{1}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} \sum_{j=1}^N |t_j| \sum_{i=1}^N \Delta_i |t_i| \sum_{l=1}^{N_g} \omega_l \int_{\tau_j} 1 ds_x .\end{aligned}$$

Dabei wurde verwendet, daß die Ansatzfunktionen auf den einzelnen Dreiecken konstant sind. Weiter sei die Summe der Integrationsgewichte Eins. Das Integral über einem Dreieck ist sein Flächeninhalt Δ_j. Bezeichnet man den Vektor $(\Delta_j |t_j|)_{j=1}^N$ mit $\underline{t}^*$ und verwendet die Äquivalenz (6.7) der Summennorm zur euklidischen Norm, so erhält man

$$\begin{aligned}\left| \langle (V - \widetilde{V}) t_h, t_h \rangle_{L_2(\Gamma)} \right| &\leq \frac{1}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} \|\underline{t}^*\|_1^2 \leq \frac{1}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} N \|\underline{t}^*\|_2^2 \\ &= \frac{1}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} N \sum_{j=1}^N \Delta_j^2 |t_j|^2 \\ &\leq \frac{\Delta_{max}}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} N \sum_{j=1}^N |t_j|^2 \int_{\tau_j} 1 ds_x \\ &= \frac{\Delta_{max}}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} N \sum_{j=1}^N \int_\Gamma |t_j \varphi_j(x)|^2 ds_x \\ &= \frac{\Delta_{max}}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} N \int_\Gamma |t_h(x)|^2 ds_x \\ &= \frac{\Delta_{max}}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} N \, \|t_h\|_{L_2(\Gamma)}^2 .\end{aligned}$$

Mit der inversen Ungleichung (1.50) ergibt dies schließlich

$$\left| \langle (V - \widetilde{V}) t_h, t_h \rangle_{L_2(\Gamma)} \right| \leq N \frac{\Delta_{max}}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} c_I h^{-1} \, \|t_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^2 \leq c(d,p) \, \|t_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^2 .$$

Durch eine geeignete Wahl der Parameter d und p der Multipolmethode läßt sich damit die V_h–Elliptizität des approximierten Einfachschichtpotentials $\widetilde{V}$ gewährleisten

$$\langle \widetilde{V} t_h, t_h \rangle_{L_2(\Gamma)} \geq (c_1^V - c(d,p)) \, \|t_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^2 \geq c_1^{\widetilde{V}} \, \|t_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^2 .$$

Für die W_h–Elliptizität der Approximation $\widetilde{D}$ des hypersingulären Operators D ist die Rückführung des hypersingulären Operators auf das Einfachschichtpotential gemäß (5.11) zu beachten.

$$\begin{aligned}
\langle \widetilde{D} u_h, u_h \rangle_{L_2(\Gamma_N)} &= \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{M} u_i u_j \langle \widetilde{D} \psi_i, \psi_j \rangle_{L_2(\Gamma_N)} \\
&= \sum_{r=1}^{3} \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{M} u_i u_j \langle \widetilde{V} \underline{\operatorname{curl}}_\Gamma \psi_i \big|_r, \underline{\operatorname{curl}}_\Gamma \psi_j \big|_r \rangle_{L_2(\Gamma_N)} \\
&= \sum_{r=1}^{3} \langle \widetilde{V} \underline{\operatorname{curl}}_\Gamma u_h \big|_r, \underline{\operatorname{curl}}_\Gamma u_h \big|_r \rangle_{L_2(\Gamma_N)}.
\end{aligned}$$

Damit überträgt sich nun die Elliptizität des approximierten Einfachschichtpotentials auf den approximierten hypersingulären Operator

$$\langle \widetilde{D} u_h, u_h \rangle_{L_2(\Gamma_N)} \geq c_1^{\widetilde{V}} \sum_{r=1}^{3} \left\| \underline{\operatorname{curl}}_\Gamma u_h \big|_r \right\|^2_{\widetilde{H}^{-1/2}(\Gamma_N)}.$$

Abschließend erfolgt mittels (6.9) noch der Übergang in die passenden Normen

$$\langle \widetilde{D} u_h, u_h \rangle_{L_2(\Gamma_N)} \geq c_1^{\widetilde{D}} \, \| u_h \|^2_{\widetilde{H}^{1/2}(\Gamma_N)}.$$

□

Bemerkung 6.1. Die Elliptizität kann auf ähnlichem Weg auch für andere Ansatzfunktionen gezeigt werden. Allerdings werden dann die im Faktor $c(d,p)$ enthaltenen Konstanten etwas größer.

6.2 Konsistenzanalysis für die approximierten Randintegraloperatoren

Um die Fehler– und Konvergenzanalyse für die Näherungslösung des Systems aus den approximierten Integraloperatoren durchführen zu können, müssen zunächst Fehlerabschätzungen für diese Approximationen hergeleitet werden. Dabei wird angenommen, daß die verwendeten Integrationsformeln die Integraloperatoren exakt berechnen. Der Einfluß der numerischen Integration wird beispielsweise in [61] untersucht.

Approximation des Einfachschichtpotentials

Proposition 6.6. *Für den Betrag des Fehlers durch die Approximation des Einfachschichtpotentials gilt folgende Abschätzung:*

$$|(\widetilde{V} - V)t| \leq \frac{1}{da - a} \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N_g} \Delta_i \omega_k |t(x_{i,k})|. \tag{6.12}$$

Beweis. Die Behauptung folgt aus der Abschätzung (2.49) und der Realisierung (5.2). □

Lemma 6.7. *Sei die Funktion $t_h \in W_h \subset S_h^{d_1,r_1} \subset H^\sigma(\Gamma)$ mit $0 \leq \sigma < r_1 + \frac{1}{2}$. Außerdem sei die verwendete Integrationsformel für die L_2–Norm der Ansatzfunktionen exakt. Dann gilt für $\lambda \in [0,1]$ folgende Fehlerabschätzung für die Approximation des Einfachschichtpotentials:*

$$\left\|(\widetilde{V} - V)t_h\right\|_{H^\lambda(\Gamma)} \leq c_{\widetilde{V}} h^{2-\lambda} \left\|t_h\right\|_{H^\sigma(\Gamma)} . \tag{6.13}$$

Beweis. Zunächst werden die beiden Fälle $\lambda = 0$ und $\lambda = 1$ gezeigt. Die Behauptung folgt dann durch Interpolation.

1. $\lambda = 0$: Setzt man die Abschätzung (6.12) des Fehlers der Approximation ein, so gilt

$$\begin{aligned}\left\|(\widetilde{V} - V)t_h\right\|^2_{L_2(\Gamma)} &= \int_\Gamma |(\widetilde{V} - V)t_h(x)|^2 ds_x \\ &\leq \frac{1}{(da-a)^2}\left(\frac{1}{d}\right)^{2p+2} \int_\Gamma \left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N_g} \Delta_i \omega_k |t_h(x_{i,k})|\right)^2 ds_x .\end{aligned}$$

Faßt man die Summe als Summennorm eines Vektors $\underline{t}^*$ mit den Komponenten $t^*_{i,k} = \Delta_i \omega_k |t_h(x_{i,k})|$ auf, so erhält man aus der Äquivalenz (6.7) zur euklidischen Norm die Abschätzung

$$\begin{aligned}\left\|(\widetilde{V} - V)t_h\right\|^2_{L_2(\Gamma)} &\leq NN_g \frac{1}{(da-a)^2}\left(\frac{1}{d}\right)^{2p+2} \int_\Gamma \left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N_g} \Delta_i^2 \omega_k^2 |t_h(x_{i,k})|^2\right) ds_x \\ &\leq NN_g \frac{1}{(da-a)^2}\left(\frac{1}{d}\right)^{2p+2} \Delta_\Gamma \Delta_{\max}\omega_{\max} \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N_g} \Delta_i \omega_k |t_h(x_{i,k})|^2 .\end{aligned}$$

Da die gewählte Integrationsformel für Funktionen aus dem Ansatzraum V_h exakt ist, entspricht die Doppelsumme der L_2–Norm der Funktion t_h. Dann erhält man mit den asymptotischen Verhalten (6.4) bis (6.6) die gewünschte Konvergenzordnung

$$\left\|(\widetilde{V} - V)t_h\right\|_{L_2(\Gamma)} \leq ch^2 \left\|t_h\right\|_{L_2(\Gamma)} .$$

2. $\lambda = 1$: Zunächst läßt sich die $H^1(\Gamma)$–Norm umschreiben zu

$$\begin{aligned}\|t\|^2_{H^1(\Gamma)} &= \|t\|^2_{L_2(\Gamma)} + \sum_{r=1}^{3}\int_\Gamma |\partial_{x_r} t(x)|^2 ds_x \\ &= \|t\|^2_{L_2(\Gamma)} + \int_\Gamma \sum_{r=1}^{3} |\partial_{x_r} t(x)|^2 ds_x \\ &= \|t\|^2_{L_2(\Gamma)} + \left\|\|\nabla_x t\|_2^2\right\|^2_{L_2(\Gamma)} \end{aligned} \tag{6.14}$$

Der erste Summand ist identisch zum Fall $\lambda = 0$ und liefert daher auch die gewünschte Konvergenzordnung. Für den zweiten Summanden läßt sich die euklidische Norm des

Gradienten des Approximationsfehlers unter Berücksichtigung des Überlagerungsprinzips und der Eindeutigkeit der Potenzreihe mittels (4.14) durch

$$\left\| \|\nabla_x(\widetilde{V} - V)t_h\|_2^2 \right\|_{L_2(\Gamma)}^2 \leq \left(\frac{1+\pi}{(d-1)a^2} \left(p + 1 + \frac{d}{d-1} \right) \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} \right)^2 \int_\Gamma \left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N_g} \Delta_i \omega_k |t_h(x_{i,k})| \right)^2 ds_x$$

abschätzen. Mit der gleichen Vorgehensweise wie oben erhält man dann

$$\left\| \|\nabla_x(\widetilde{V} - V)t_h\|_2^2 \right\|_{L_2(\Gamma)}^2 \leq \left(\frac{1+\pi}{(d-1)a^2} \left(p + 1 + \frac{d}{d-1} \right) \left(\frac{1}{d} \right)^{p+1} \right)^2 N N_g \Delta_{\max} \omega_{\max} \Delta_\Gamma \|t_h\|_{L_2(\Gamma)}^2 .$$

Setzt man nun die Abhängigkeiten (6.4) bis (6.6) der einzelnen Parameter ein, so ergibt sich das notwendige Konvergenzverhalten

$$\left\| \|\nabla_x(\widetilde{V} - V)t_h\|_2^2 \right\|_{L_2(\Gamma)}^2 \leq ch^2 \|t_h\|_{L_2(\Gamma)}^2 .$$

Insgesamt läßt sich somit für die $H^1(\Gamma)$–Norm die gewünschte Konvergenzordnung

$$\left\| (\widetilde{V} - V)t_h \right\|_{H^1(\Gamma)} \leq ch \|t_h\|_{L_2(\Gamma)} .$$

zeigen.

Aus der stetigen Einbettung (1.25) der Sobolev–Räume folgt die Aussage auch für $\sigma > 0$. □

Bemerkung 6.2. Mit Hilfe der inversen Ungleichung (1.50) gelingt die Rückkehr in die $H^{-1/2}$–Norm:

$$\left\| (\widetilde{V} - V)t_h \right\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \leq ch \|t\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} .$$

Allerdings geht dabei eine halbe Konvergenzordnung verloren, so daß mit dieser Abschätzung nicht mehr die optimale Konvergenzordnung aus (1.55) erreicht werden könnte. Dieser Verlust einer halben Konvergenzordnung könnte durch eine entsprechende Erhöhung des Parameters p kompensiert werden. Später wird sich aber zeigen, daß bei ausreichender Regularität der Lösung die Abschätzung (6.13) ausreicht.
Mit Hilfe des Sobolevschen Einbettungssatzes erhält man das entsprechende Ergebnis für allgemeine Funktionen $u \in H^{1+\varepsilon}(\Gamma)$ mit $\varepsilon > 0$. Dabei wird allerdings gegenüber der $H^{1+\varepsilon}(\Gamma)$–Norm abgeschätzt. Dann läßt sich wegen des bisher eingeschränkten Gültigkeitsbereich der Formel (6.8) diese Abschätzung nicht auf den hypersingulären Operator übertragen.

Approximation des Doppelschichtpotentials

Proposition 6.8. *Der Betrag des Fehlers durch die Approximation des Doppelschichtpotentials läßt sich mit*

$$|(\widetilde{K} - K)u| \leq \sqrt{3}(1+\pi) \frac{1}{(d-1)a^2} \left(p + 1 + \frac{d}{d-1} \right) \left(\frac{1}{d} \right)^{p+2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N_g} \Delta_i \omega_k |u(x_{i,k})| \quad (6.15)$$

abschätzen. Für den Gradienten des Fehlers gilt:

$$\begin{aligned}\left\|\nabla_x(\widetilde{K}-K)u\right\|_2 &\leq \left(\frac{1}{d}\right)^{p+2} \frac{1}{(d-1)a^3} \left\{4(2+\pi)\left(\frac{d}{d-1}\right)^2 + 2((2+\pi)p+\pi)\right. \\ &\left.\left(2\frac{d}{d-1}+(p+1)\right)\right\} \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N_g} \Delta_i\omega_k|u(x_{i,k})|. \qquad (6.16)\end{aligned}$$

Beweis. Die Normalenableitung einer Funktion läßt sich mit

$$|\underline{n}_y \cdot \nabla_y f(y)| \leq \sum_{r=1}^{3} \left|\frac{\partial}{\partial y_r} f(y)\right| \leq \sqrt{3}\|\nabla_y f\|_2 \qquad (6.17)$$

gegenüber der Norm ihres Gradienten abschätzen. Mittels des Überlagerungsprinzips kann anhand der Realisierung (5.4) die Fehlerabschätzung (4.15) für die näherungsweise Berechnung des Gradienten des Potentials auf den Fehler durch das approximierte Doppelschichtpotential übertragen werden. Entsprechend erhält man aus (4.21) die Behauptung (6.16). □

Lemma 6.9. *Sei die Integrationsformel der Multipolmethode für die L_2–Norm der Ansatzfunktionen exakt. Für eine Funktion $u_h \in V_h \subset S_h^{d_2,r_2} \subset H^\eta(\Gamma)$ mit $0 \leq \eta < r_2 + \frac{1}{2}$ und $s \in [0,1]$ gilt dann folgende Fehlerabschätzung für die Approximation des Doppelschichtpotentials:*

$$\left\|(\widetilde{K}-K)u_h\right\|_{H^s(\Gamma)} \leq c_{\widetilde{K}} h^{2-s} \left\|u_h\right\|_{H^\eta(\Gamma)}. \qquad (6.18)$$

Beweis. Auch hier wird wieder das Interpolationsargument angewendet. Daher sind erneut nur die Fälle $s=0$ und $s=1$ zu untersuchen:

1. $s=0$: Durch Einsetzen der Abschätzung (6.15) erhält man zunächst

$$\begin{aligned}\left\|(\widetilde{K}-K)u_h\right\|^2_{L_2(\Gamma)} &= \int_\Gamma \left|(\widetilde{K}-K)u_h(x)\right|^2 ds_x \\ &\leq 3\left((1+\pi)\frac{1}{(d-1)a^2}\left(p+1+\frac{d}{d-1}\right)\left(\frac{1}{d}\right)^{p+2}\right)^2 \\ &\quad \int_\Gamma \left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N_g}\Delta_i\omega_k|u_h(x_{i,k})|\right)^2 ds_x.\end{aligned}$$

Erneut läßt sich die Summe mit (6.7) durch die euklidische Norm abschätzen zu

$$\begin{aligned}\left\|(\widetilde{K}-K)u_h\right\|^2_{L_2(\Gamma)} &\leq 3\left((1+\pi)\frac{1}{(d-1)a^2}\left(p+1+\frac{d}{d-1}\right)\left(\frac{1}{d}\right)^{p+2}\right)^2 \\ &\quad NN_g\int_\Gamma \left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N_g}\Delta_i^2\omega_k^2|u_h(x_{i,k})|^2\right) ds_x \\ &\leq 3\left((1+\pi)\frac{1}{(d-1)a^2}\left(p+1+\frac{d}{d-1}\right)\left(\frac{1}{d}\right)^{p+2}\right)^2 \\ &\quad \Delta_\Gamma NN_g\Delta_{\max}\omega_{\max}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N_g}\Delta_i\omega_k|u_h(x_{i,k})|^2.\end{aligned}$$

Bei der Doppelsumme handelt es sich um die $L_2(\Gamma)$–Norm, da mit der Integrationsformel Funktionen aus dem Ansatzraum W_h exakt integriert werden. Setzt man nun noch die asymptotischen Verhalten (6.4) bis (6.6) ein, so erhält man

$$\left\|(\widetilde{K} - K)u_h\right\|_{L_2(\Gamma)} \leq ch^2 \left\|u_h\right\|_{L_2(\Gamma)}.$$

2. $s = 1$: Gemäß (6.14) genügt es wieder, die $L_2(\Gamma)$–Norm des Gradienten zu betrachten. Dabei läßt sich die Abschätzung (6.16) verwenden. Mit den gleichen Mitteln wie für $s = 0$ erhält man dann

$$\begin{aligned}\left\|\|\nabla_x(\widetilde{K} - K)u_h\|_2^2\right\|^2_{L_2(\Gamma)} \leq\ & NN_g\Delta_{\max}\omega_{\max}\left(\left(\frac{1}{d}\right)^{p+2}\frac{1}{(d-1)a^3}\left\{4(2+\pi)\left(\frac{d}{d-1}\right)^2\right.\right.\\ &\left.\left.+2((2+\pi)p+\pi)\left(\frac{d}{d-1}+(p+1)\right)\right\}\right)^2\Delta_\Gamma\left\|u_h\right\|^2_{L_2(\Gamma)}\\ \leq\ & ch^2\left\|u_h\right\|^2_{L_2(\Gamma)}.\end{aligned}$$

Somit ergibt sich die notwendige Konvergenz mit

$$\left\|(\widetilde{K} - K)u_h\right\|_{H^1(\Gamma)} \leq ch \left\|u_h\right\|_{L_2(\Gamma)}.$$

Insgesamt folgt die Behauptung nun durch Interpolation und mit der stetigen Einbettung (1.25) der Sobolev–Räume. □

Approximation des adjungierten Doppelschichtpotentials

Proposition 6.10. *Für den Fehler durch die Approximation des adjungierten Doppelschichtpotentials gilt:*

$$|(\widetilde{K}' - K')t| \leq \sqrt{3}(1+\pi)\frac{1}{(c-1)a^2}\left(p+1+\frac{c}{c-1}\right)\left(\frac{1}{c}\right)^{p+1}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N_g}\Delta_i\omega_k|t(x_{i,k})|. \tag{6.19}$$

Beweis. Erneut läßt sich mit (6.17) die Normalenableitung einer Funktion durch deren Gradienten abschätzen. Zusammen mit dem Überlagerungsprinzip folgt dann aus der Fehlerabschätzung (4.14) die Behauptung. □

Lemma 6.11. *Sei die verwendete Integrationsformel für die L_2–Norm der Ansatzfunktionen exakt. Für eine Funktion $t_h \in W_h \subset S_h^{d_1,r_1} \subset H^\xi(\Gamma)$ mit $\xi \in [-1, r_1 + \frac{1}{2}]$ gilt dann die folgende Fehlerabschätzung für die Approximation des adjungierten Doppelschichtpotentials mit $\lambda \in [0,1]$:*

$$\left\|(\widetilde{K}' - K')t_h\right\|_{H^{-\lambda}(\Gamma)} \leq c_{\widetilde{K}'}h^{2+\min\{\xi,0\}}\left\|t_h\right\|_{H^\xi(\Gamma)}. \tag{6.20}$$

Beweis. Zunächst wird die L_2–Norm des Approximationsfehlers untersucht. Mit (6.19) und dem gleichen Vorgehen wie im Beweis zu Lemma 6.9 erhält man

$$\begin{aligned}\left\|(\widetilde{K}' - K')t_h\right\|^2_{L_2(\Gamma)} &= \int_\Gamma\left|\widetilde{K}' - K')t_h\right|^2 ds\\ &\leq ch^4\left\|t_h\right\|^2_{L_2(\Gamma)}.\end{aligned}$$

Wegen der stetigen Einbettung (1.25) der Sobolev–Räume lassen sich zunächst alle anderen Normen des Approximationsfehlers durch die L_2–Norm abschätzen. Mit Hilfe der inversen Ungleichung (1.50) erfolgt dann der Übergang in Normen niedrigerer Ordnung.

$$\begin{aligned}\left\|(\widetilde{K}' - K')t_h\right\|_{H^{-\lambda}(\Gamma)} &\leq \left\|(\widetilde{K}' - K')t_h\right\|_{L_2(\Gamma)} \\ &\leq ch^2 \left\|t_h\right\|_{L_2(\Gamma)} \\ &\leq ch^{2+min\{\xi,0\}} \left\|t_h\right\|_{H^\xi(\Gamma)}.\end{aligned}$$

□

Approximation des hypersingulären Operators

Lemma 6.12. *Sei die Funktion $u_h \in V_h \subset S_h^{d_2,r_2} \subset H^\zeta(\Gamma)$ mit $1 \leq \zeta < r_2 + \frac{1}{2}$. Dann gilt für $s \in [0,1]$ folgende Fehlerabschätzung für die Approximation des hypersingulären Operators:*

$$\left\|(\widetilde{D} - D)u_h\right\|_{H^{-s}(\Gamma)} \leq c_{\widetilde{D}} h^{1+s} \left\|u_h\right\|_{H^\zeta(\Gamma)}. \tag{6.21}$$

Beweis. Zunächst sei $s \in [0,1]$. Aufgrund der Definition der Sobolev–Räume mit negativem Index

$$\left\|(\widetilde{D} - D)u_h\right\|_{H^{-s}(\Gamma)} = \sup_{0 \neq v \in H^s(\Gamma)} \frac{|\langle(\widetilde{D} - D)u_h, v\rangle_{L_2(\Gamma)}|}{\|v\|_{H^s(\Gamma)}}$$

gilt es den Nenner mittels der Dualität des L_2–Skalarproduktes abzuschätzen. Gemäß der Überführung des hypersingulären Operators auf das Einfachschichtpotential und der entsprechenden Realisierung der Approximation wird auch hier nach Satz 5.1 der hypersinguläre Operator auf das Einfachschichtpotential zurückgeführt:

$$\begin{aligned}|\langle(\widetilde{D} - D)u_h, v\rangle_{L_2(\Gamma)}| &= \left|\sum_{r=1}^{3} \langle(\widetilde{V} - V)\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u_h\big|_r, \underline{\mathrm{curl}}_\Gamma v\big|_r\rangle_{L_2(\Gamma)}\right| \\ &\leq \sum_{r=1}^{3} \left\|(\widetilde{V} - V)\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u_h\big|_r\right\|_{H^{1-s}(\Gamma)} \left\|\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma v\big|_r\right\|_{H^{s-1}(\Gamma)}.\end{aligned}$$

Durch die geeignete Wahl der Ansatzräume liegt die Rotation der Funktion $u_h \in W_h$ im entsprechenden Ansatzraum V_h. Daher läßt sich die Fehlerabschätzung (6.13) des Einfachschichtpotentials mit $\lambda = 1 - s$ auf den Approximationsfehler des hypersingulären Operators übertragen:

$$|\langle(\widetilde{D} - D)u_h, v\rangle_{L_2(\Gamma)}| \leq \sum_{r=1}^{3} c_2^{\widetilde{V}} h^{1+s} \left\|\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma u_h\big|_r\right\|_{L_2(\Gamma)} \sum_{r=1}^{3} \left\|\underline{\mathrm{curl}}_\Gamma v\big|_r\right\|_{H^{s-1}(\Gamma)}.$$

Nach (6.8) kann man nun

$$|\langle(\widetilde{D} - D)u_h, v\rangle_{L_2(\Gamma)}| \leq c_2^{\widetilde{D}} h^{1+s} \left\|u_h\right\|_{H^1(\Gamma)} \left\|v\right\|_{H^s(\Gamma)}$$

abschätzen und erhält daraus die Behauptung. □

Bemerkung 6.3. Durch die Rückführung auf das Einfachschichtpotential übertragen sich die Einschränkungen aus dessen Fehlerabschätzung auch auf die des hypersingulären Operators. Somit erhält man aus der Rückkehr von der Rotation zur Funktion selbst die Bedingung $\eta \geq 1$.

6.3 Konvergenzanalysis und Fehlerabschätzung

Hier werden die in Abschnitt 1.6 aufgeführten Ergebnisse durch die Approximation der Integraloperatoren erweitert. Zur Vereinfachung der Darstellung wird die dort vorgenommene Kennzeichnung mit einer Tilde nun weggelassen. Vielmehr stellt diese nun den Bezug zur Approximation der Integraloperatoren dar.
Mit dem Aubin–Nitsche–Trick (vgl. [37]) erhält man folgendes Lemma.

Lemma 6.13. *$Q_\sigma t$ bezeichne die $H^\sigma(\Gamma)$–Projektion einer Funktion $t \in H^\varrho(\Gamma)$ in den Ansatzraum $V_h \subset S_h^{d,r}(\Gamma)$ mit*

$$\langle Q_\sigma t, v_h \rangle_{H^\sigma(\Gamma)} = \langle t, v_h \rangle_{H^\sigma(\Gamma)} \qquad \text{für alle } v_h \in V_h. \tag{6.22}$$

Dabei sei $2\sigma - d \le \tau \le \sigma \le \min\{\varrho, d\}$. Dann gelten die Abschätzungen

$$\|Q_\sigma t\|_{H^\sigma(\Gamma)} \le \|t\|_{H^\sigma(\Gamma)} \tag{6.23}$$

und

$$\|t - Q_\sigma t\|_{H^\tau(\Gamma)} \le c h^{\sigma-\tau} \|t\|_{H^\sigma(\Gamma)}\,. \tag{6.24}$$

Anstelle der Variationsformulierung

$$a(u_h, t_h; v_h, \tau_h) = f(v_h, \tau_h) \qquad \text{für alle } (v_h, \tau_h) \in Z_h \tag{6.25}$$

der symmetrischen Formulierung zur Bestimmung von $(u_h, t_h) \in Z_h$ kann wegen der Realisierung durch die Multipolmethode nur ein gestörtes Variationsproblem

$$\widetilde{a}(\widetilde{u}_h, \widetilde{t}_h; v_h, \tau_h) = \widetilde{f}(v_h, \tau_h) \qquad \text{für alle } (v_h, \tau_h) \in Z_h \tag{6.26}$$

zur Bestimmung von $(\widetilde{u}_{,h}\, \widetilde{t}_h) \in Z_h$ betrachtet werden. Dabei sind

$$\begin{aligned} \widetilde{a}(\widetilde{u}_h, \widetilde{t}_h; v_h, \tau_h) &= \langle \widetilde{V}\widetilde{t}_h, \tau_h \rangle_{L_2(\Gamma_D)} - \langle \widetilde{K}\widetilde{u}_h, v_h \rangle_{L_2(\Gamma_D)} \\ &\quad + \langle \widetilde{K}'\widetilde{t}_h, \tau_h \rangle_{L_2(\Gamma_N)} + \langle \widetilde{D}\widetilde{u}_h, v_h \rangle_{L_2(\Gamma_N)} \end{aligned} \tag{6.27}$$

und

$$\begin{aligned} \widetilde{f}(v_h, \tau_h) &= \langle (\frac{1}{2}I + \widetilde{K}) g_h, v_h \rangle_{L_2(\Gamma_D)} - \langle \widetilde{V} p_h, \tau_h \rangle_{L_2(\Gamma_D)} \\ &\quad - \langle \widetilde{D} g_h, v_h \rangle_{L_2(\Gamma_N)} + \langle (\frac{1}{2}I - \widetilde{K}') p_h, \tau_h \rangle_{L_2(\Gamma_N)}. \end{aligned} \tag{6.28}$$

Durch Anwenden des Strang–Lemmas (vgl. Satz 6.1) erhält man bei Verwendung stückweise konstanter und stückweise linearer Ansatzfunktionen dann das folgende Resultat.

Satz 6.14. *Seien $t \in H^\sigma(\Gamma)$ und $u \in H^\eta(\Gamma)$ mit $\sigma \in [0,1]$ und $\eta \in [1,2]$ die Lösungen der der Variationsformulierung (6.25). Außerdem gelte $p \in H^\alpha(\Gamma_N)$ und $g \in H^\beta(\Gamma_D)$ mit $\alpha \in [0,1]$ und $\beta \in [1,2]$. Dann ist das gestörte Variationsproblem (6.26) eindeutig lösbar, und es gilt die Fehlerabschätzung*

$$\begin{aligned} \left(\|t - \widetilde{t}_h\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|u - \widetilde{u}_h\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)} \right)^{1/2} &\le c \left(h^{2\sigma+1} \|t\|^2_{H^\sigma(\Gamma)} + h^{2\eta-1} \|u\|^2_{H^\eta(\Gamma)} \right)^{1/2} \\ &\quad + c \left(h^{2\alpha+1} \|p\|^2_{H^\alpha(\Gamma)} + h^{2\beta-1} \|g\|^2_{H^\beta(\Gamma)} \right)^{1/2} \end{aligned} \tag{6.29}$$

Beweis. Wegen der Fehlerabschätzungen für die Approximation der Integraloperatoren aus Abschnitt 6.2 folgt aus

$$\left\| \widetilde{A} u_h \right\| \leq \|A u_h\| + \left\| (\widetilde{A} - A) u_h \right\|$$

die Beschränktheit der approximierten Integraloperatoren. Außerdem wurde im Lemma 6.5 die Elliptizität der Approximationen des Einfachschichtpotentials und des hypersingulären Operators gezeigt. Wie im Beweis des Lemmas 1.4 lassen sich die Z_h–Elliptizität und die Beschränktheit der Bilinearform $\widetilde{a}(\cdot,\cdot)$ zeigen. Damit liefert der Satz von Lax–Milgram die eindeutige Lösbarkeit.
Nun gilt es den Fehler für die Approximation der Bilinearform abzuschätzen. Mit der Dreiecksungleichung erhält man

$$\begin{aligned} |a(v_h,\tau_h;w_h,s_h) - \widetilde{a}(v_h,\tau_h;w_h,s_h)| \leq\ & \left\| (V-\widetilde{V})\tau_h \right\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \|s_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \\ & + \left\| (K-\widetilde{K}) v_h \right\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \|s_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \\ & + \left\| (K'-\widetilde{K}')\tau_h \right\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \|w_h\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \\ & + \left\| (D-\widetilde{D}) v_h \right\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \|w_h\|_{H^{1/2}(\Gamma)} . \end{aligned}$$

Nun liefern die Fehlerabschätzungen (6.13), (6.18), (6.20) und (6.21):

$$\begin{aligned} |a(v_h,\tau_h;w_h,s_h) - \widetilde{a}(v_h,\tau_h;w_h,s_h)| \leq\ & c_{\widetilde{V}} h^{3/2} \|\tau_h\|_{H^\sigma(\Gamma)} \|s_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \\ & + c_{\widetilde{K}} h^{3/2} \|v_h\|_{H^\eta(\Gamma)} \|s_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \\ & + c_{\widetilde{K}'} h^{3/2} \|\tau_h\|_{H^\xi(\Gamma)} \|w_h\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \\ & + c_{\widetilde{D}} h^{3/2} \|v_h\|_{H^\zeta(\Gamma)} \|w_h\|_{H^{1/2}(\Gamma)} . \end{aligned}$$

Dabei sind für $d_1 = 1$ und $d_2 = 2$ folgende Bedingungen

$$0 \leq \sigma < r_1 + \frac{1}{2} \qquad 0 \leq \eta < r_2 + \frac{1}{2} \qquad -\frac{1}{2} \leq \xi < r_1 + \frac{1}{2} \qquad 1 \leq \zeta < r_2 + \frac{1}{2}$$

unter einen Hut zu bringen. Die Parameter r_1 und r_2 beziehen sich auf die Stetigkeit der Ansatzfunktionen auf dem Dirichlet– und dem Neumann–Rand. Im Fall der besprochenen Realisierung ist also $r_1 = 0$ und $r_2 = 1$. Für $\sigma = \xi = 0$ und $\eta = \zeta = 1$ gilt dann

$$\begin{aligned} |a(v_h,\tau_h;w_h,s_h) - \widetilde{a}(v_h,\tau_h;w_h,s_h)| \leq\ & c h^{3/2} \left(\|\tau_h\|_{L_2(\Gamma)} + \|v_h\|_{H^1(\Gamma)} \right) \\ & \cdot \sqrt{2} \left(\|s_h\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|w_h\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)} \right)^{\frac{1}{2}} . \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\sup_{(w_h,s_h)\in Z_h} \frac{|a(v_h,\tau_h;w_h,s_h) - \widetilde{a}(v_h,\tau_h;w_h,s_h)|}{\|(w_h,s_h)\|_Z} \leq c h^{3/2} \left(\|\tau_h\|_{L_2(\Gamma)} + \|v_h\|_{H^1(\Gamma)} \right) .$$

Mit Hilfe des Lemmas 6.13 und der inversen Ungleichung (1.50) erfolgt nun der Übergang von der L_2–Norm in die $H^{-1/2}$–Norm

$$\begin{aligned}
\|\tau_h\|_{L_2(\Gamma)} &\leq \|\tau_h - Q_{L_2}t\|_{L_2(\Gamma)} + \|Q_{L_2}t\|_{L_2(\Gamma)} \\
&\leq c_I h^{-1/2} \|\tau_h - Q_{L_2}t\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|t\|_{L_2(\Gamma)} \\
&\leq c_I h^{-1/2} \left\{ \|\tau_h - t\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|t - Q_{L_2}t\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \right\} + \|t\|_{L_2(\Gamma)} \\
&\leq c_I h^{-1/2} \left\{ \|\tau_h - t\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} + ch^{\frac{1}{2}} \|t\|_{L_2(\Gamma)} \right\} + \|t\|_{L_2(\Gamma)} \\
&\leq c_I h^{-1/2} \|t - \tau_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} + c\|t\|_{L_2(\Gamma)} .
\end{aligned}$$

Entsprechend gilt

$$\|v_h\|_{H^1(\Gamma)} \leq c_I h^{-1/2} \|u - v_h\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + c\|t\|_{H^1(\Gamma)} .$$

Durch Einsetzen dieser Abschätzungen erhält man

$$\begin{aligned}
\sup_{(w_h,s_h)\in Z_h} \frac{|a(v_h,\tau_h;w_h,s_h) - \widetilde{a}(v_h,\tau_h;w_h,s_h)|}{\|(w_h,s_h)\|_Z} &\leq ch\left(\|t - \tau_h\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|u - v_h\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \right) \\
&\quad + ch^{3/2}\left(\|t\|_{L_2(\Gamma)} + \|u\|_{H^1(\Gamma)} \right) .
\end{aligned}$$

Im folgenden wird der Einfluß der Approximation der Funktionen der Randbedingungen nicht berücksichtigt, da dies kein spezielles Problem des Multipolverfahrens ist. Eine Analyse für die Approximation der Randbedingungen findet man in [63]. Unter dieser Voraussetzung läßt sich der Fehler für die Approximation der Linearform wie bei der Bilinearform behandeln, da sich die Identitäten in der Differenz aufheben. Daher gilt die Abschätzung

$$\sup_{(w_h,s_h)\in Z_h} \frac{|f(w_h,s_h) - \widetilde{f}(w_h,s_h)|}{\|(w_h,s_h)\|_Z} \leq c\left(h^{2\alpha+1}\|p\|^2_{H^\alpha(\Gamma)} + h^{2\beta-1}\|g\|^2_{H^\beta(\Gamma)} \right)^{\frac{1}{2}} .$$

Diese Fehlerabschätzungen lassen sich nun für das Strang–Lemma (Satz 6.1) verwenden.

$$\begin{aligned}
c_1^{\widetilde{a}}\left(\|t - \widetilde{t}_h\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|u - \widetilde{u}_h\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)} \right)^{1/2} &\leq \inf_{(v_h,\tau_h)\in Z_h} \Bigg\{ (c_1^{\widetilde{a}} + c_1^a + ch) \\
&\quad \left(\|t - \tau_h\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|u - v_h\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)} \right)^{1/2} \Bigg\} \\
&\quad + ch^{3/2}\left(\|t\|^2_{L_2(\Gamma)} + \|u\|^2_{H^1(\Gamma)} \right)^{1/2} \\
&\quad + c\left(h^{2\alpha+1}\|p\|^2_{H^\alpha(\Gamma)} + h^{2\beta-1}\|g\|^2_{H^\beta(\Gamma)} \right)^{\frac{1}{2}} .
\end{aligned}$$

Setzt man nun die Approximationseigenschaften (1.51) der einzelnen Ansatzräume ein, so erhält man

$$\begin{aligned}
\left(\|t - \widetilde{t}_h\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|u - \widetilde{u}_h\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)} \right)^{1/2} &\leq c\left(h^{2\sigma+1}\|t\|^2_{H^\sigma(\Gamma)} + h^{2\mu-1}\|u\|^2_{H^\eta(\Gamma)} \right)^{1/2} \\
&\quad + c\left(h^{2\alpha+1}\|p\|^2_{H^\alpha(\Gamma)} + h^{2\beta-1}\|g\|^2_{H^\beta(\Gamma)} \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

mit $0 \leq \sigma \leq 1$ und $1 \leq \eta \leq 2$. □

Bemerkung 6.4. Die Abschätzungen für die einzelnen Integraloperatoren sind so allgemein gehalten, daß sie direkt auf Polynome höheren Grades als Ansatzfunktionen angewendet werden können. Dabei wird aber vorausgesetzt, daß die verwendete Integrationsformel diese Polynome exakt integriert. Es müssen bei der Multipolmethode also lediglich die Parameter entsprechend erhöht werden, um die gewünschte Konvergenzordnung gewährleisten zu können. Dadurch erhöht sich zwar der Aufwand für die Multipolmethode, aber dieser steigt auch bei der herkömmlichen Berechnung.

Da der Fehler in der Energienorm nicht so einfach zu berechnen ist, sind Fehlerabschätzungen für die L_2–Norm interessant. Durch das folgende Lemma können Fehlerabschätzungen wie (6.29) in die L_2–Norm übertragen werden.

Lemma 6.15. *Es sei in der Energienorm die Fehlerabschätzung*

$$\left\{\|t-\widetilde{t}_h\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma)} + \|u-\widetilde{u}_h\|^2_{H^{1/2}(\Gamma)}\right\} \leq ch^{\alpha(\sigma)} \left\{\|t\|^2_{H^\sigma(\Gamma)} + \|u\|^2_{H^{\sigma+1}(\Gamma)}\right\}$$

mit der Konvergenzordnung $\alpha(\sigma)$ gültig. Dann gelten in der L_2–Norm die Abschätzungen

$$\|t-t_h\|^2_{L_2(\Gamma)} \leq ch^{2\alpha(\sigma)-1} \left\{\|t\|^2_{H^\sigma(\Gamma)} + \|u\|^2_{H^{\sigma+1}(\Gamma)}\right\}, \tag{6.30}$$

$$\|u-u_h\|^2_{L_2(\Gamma)} \leq ch^{2\alpha(\sigma)+1} \left\{\|t\|^2_{H^\sigma(\Gamma)} + \|u\|^2_{H^{\sigma+1}(\Gamma)}\right\}. \tag{6.31}$$

Beweis. Wesentliche Hilfsmittel für den Beweis sind die inversen Ungleichung, L_2–Projektion und der Aubin–Nitsche–Trick (vgl. [37]). Eine ausführliche Beweisführung findet man beispielsweise in [7]. □

Somit führt der Übergang von der Energienorm in die L_2–Norm zu einer Erhöhung der Konvergenzordnung der Dirichlet–Daten um $\frac{1}{2}$, während sich die Konvergenzordnung der Neumann–Daten um $\frac{1}{2}$ reduziert.

Kapitel 7

Numerische Experimente

Zunächst werden nun einige Anmerkungen zur Implementierung gemacht, bevor dann die theoretischen Ergebnisse durch Beispiele bestätigt werden.
Es wurde ein C-Code zur Lösung des gemischten Randwertproblems für den Laplace–Operator mit Hilfe der Randelementmethode entwickelt. In diesem Code können sowohl beliebige Grobstrukturen, die aus Dreiecken zusammengesetzt sind, eingelesen und gleichmäßig verfeinert werden, als auch Rotationskörper mittels Dreiecken diskretisiert werden. Als Ansatzfunktionen werden stückweise konstante bzw. lineare Funktionen verwendet. Bei der Standardvariante erfolgt die Berechnung des Einfachschicht– und Doppelschichtpotentials für stückweise konstante bzw. lineare Funktionen mittels semi–analytischer Formeln (vgl. [65]). Das L_2–Skalarprodukt wird mit einer 7–Punkte–Formel von Radon [50] zur Integration über Dreiecken berechnet. Für die Multipolmethode wird die Berechnung der Elemente der Nahbereichsmatrix mit den gleichen Formeln wie für das Standardverfahren durchgeführt. Für diese schwachbesetzte Nahbereichsmatrix werden nur die Nichtnullelemente in entsprechenden Listen gespeichert. Im Fernfeld wird auch für die Auswertung des Kerns die 7–Punkte–Formel verwendet. Die Lösung des linearen Gleichungssystems wird mittels des GMRES–Verfahrens (vgl. [55, 56]) berechnet. Eine Vorkonditionierung erfolgt nur im Rahmen einer Skalierung. Die relative Genauigkeit des Iterationsverfahrens wurde in den folgenden Beispielen auf 10^{-8} gesetzt. Die Randfläche und die Lösung werden in einer 3D–Graphik, programmiert auf Open–GL, visualisiert.
Die Rechnungen wurden auf einem Linux–Rechner mit 1,5 GB Hauptspeicher und einem AMD Athlon Prozessor mit 1200 MHz durchgeführt. Dabei wurde die Lösung im gesamten Gebiet vorgegeben und die entsprechenden Randbedingungen berechnet. Die numerische Lösungen wurden mit der entsprechenden Vorgaben verglichen. Dabei wurde der Fehler in der L_2–Norm berechnet, da die gewählte Energienorm nicht so einfach zu berechnen ist. Die Fehlerabschätzung (6.29) des gestörten Problems kann mittels Lemma 6.15 in die L_2–Norm übertragen werden. Dabei erhöht sich die die Konvergenzordnung der Dirichlet–Daten um $\frac{1}{2}$, während sich die Konvergenzordnung der Neumann–Daten um $\frac{1}{2}$ reduziert. Somit erhält man bei genügender Regularität der Lösung die Konvergenzordnungen $\varrho_D = 2$ und $\varrho_N = 1$.

7.1 1. Beispiel: L–Shape

Als erstes Beispiel wurde das L–Shape aus Abbildung 7.1 gewählt. Die Grobstruktur besteht aus 14 Quadraten, die jeweils in zwei Dreiecke zerteilt sind. Als Dirichlet–Rand wurde die

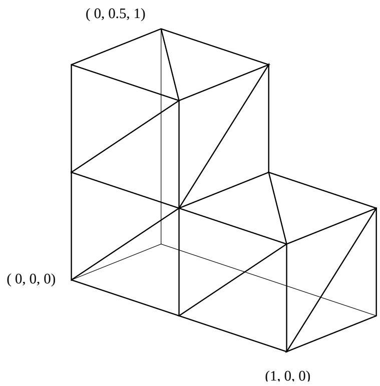

Abbildung 7.1: Grobgitter der Stufe

untere Auflagefläche verwendet. Die restlichen Dreiecke gehören zum Neumann–Rand. Als Lösung u dieses gemischten Randwertproblems wurde die Fundamentallösung

$$u(x) = \frac{1}{|x - x_0|}$$

mit einer Singularität in $x_0 = (1.0; 0.25; 1.0)$ gewählt. Die Abbildung 7.2 zeigt die Visualisierung der Lösung der vierten Verfeinerungsstufe mit 7168 Elementen.

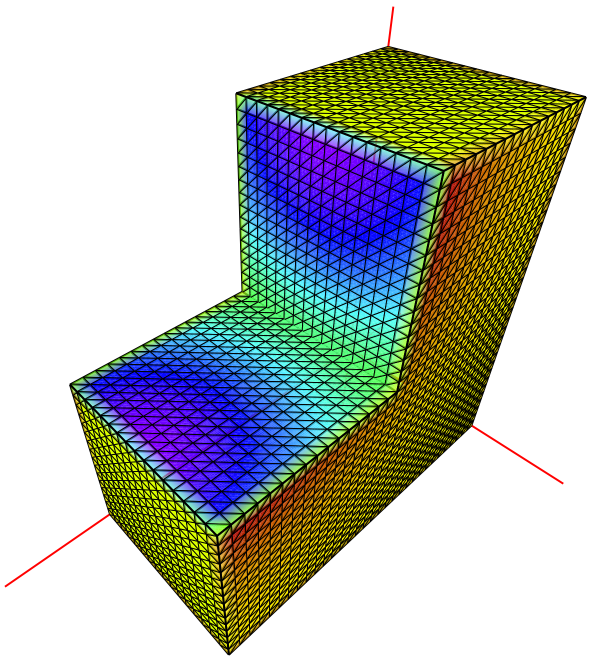

Abbildung 7.2: Visualisierung des vierten Verfeinerungslevels

In der Tabelle 7.1 sind die Ergebnisse der Rechnungen zusammengestellt. In der ersten Zeile jedes Verfeinerungslevels stehen die Ergebnisse des Standardverfahrens und in der zweiten die Resultate, die mit der Multipolmethode erzielt wurden. Für die Grobstruktur selbst ist nur ein Ergebnis angegeben, da hier für die Multipolmethode noch alle Elemente im Nahbereich liegen. Der Anzahl der Elemente folgt die Anzahl der bei der jeweiligen Methode gespeicherten Matrixeinträge. Dann folgen die Zeiten für das Aufstellen und Lösen des linearen Gleichungssystems. Diese sind, sofern keine zusätzlichen Angaben gemacht werden, in Sekunden angegeben. Die Summe dieser beiden Zeiten entspricht dem Gesamtaufwand. Abschließend sind noch die Anzahl der benötigten Iterationen, sowie die Fehler der Dirichlet– und Neumanndaten aufgelistet. Werte, die in Klammern gesetzt sind, wurden aus den vorherigen Werten extrapoliert, da diese Berechnungen aufgrund des extremen Speicherbedarfs nicht durchgeführt werden konnten.

L	Elemente	Einträge	Erstellen	Lösen	It.	D-Fehler	N-Fehler
0	28	672	0	0	13	2.56297e-01	5.85271e-01
1	112	10848	1	0	19	6.83221e-02	2.83139e-01
		6426	1	0	19	6.83320e-02	2.83139e-01
2	448	174720	14	0	25	1.70450e-02	1.40641e-01
		120496	9	1	25	1.70500e-02	1.40642e-01
3	1792	2806272	218	14	33	4.18294e-03	7.02762e-02
		575088	35	27	33	4.16837e-03	7.02767e-02
4	7168	44992512	3514	294	44	1.03305e-03	3.51340e-02
		2327328	111	282	44	1.03052e-03	3.51346e-02
5	28672	720642048	(937min)	(105min)		(2.58263e-04)	(1.75670e-02)
		8605465	4,9min	40,25min	59	2.58123e-04	1.75689e-02
6	114688	11536465920	(250 h)	(38 h)		(6.45656e-05)	(8.78350e-03)
		43305736	20 min	273 min	80	6.53762e-05	8.78468e-03

Tabelle 7.1: Ergebnisse zum Beispiel 1

Es läßt sich sofort erkennen, daß die Matrixmultiplikation durch die Multipolmethode sehr genau simuliert wird. Zum einen werden gleich viele Iterationsschritte benötigt, und zum anderen unterscheiden sich die berechneten Fehler nur unwesentlich von den der Standardmethode. Auch der signifikante Unterschied im Speicherbedarf ist auffällig. Während mit der Standardmethode bereits das fünfte Verfeinerungslevel nicht mehr berechnet werden kann, bewältigt die Multipolmethode das sechste Verfeinerungslevel noch problemlos. Die Standardmethode würde dafür den 256–fachen Speicher wie auf dem vierten Level benötigen.
Die enorme Beschleunigung der Randelementmethode durch die Verwendung der Multipolmethode zeigt sich mit zunehmender Elementzahl immer stärker. So benötigt die vorliegende Implementierung mit der Multipolmethode auf dem fünften Verfeinerungslevel nur ungefähr 45 Minuten, während mit der Standardmethode auf der vierten Stufe bei einem Viertel der Elemente bereits mehr als 63 Minuten Rechenzeit anfallen. Auf der sechsten Verfeinerungsstufe benötigt die Rechnung mit der Multipolmethode weniger als fünf Stunden gegenüber dem theoretischen Wert von zwölf Tagen für das Standardverfahren. Somit beschleunigt die Multipolmethode in diesem Fall die Berechnungen um den Faktor 59. Unter geringen Abstrichen bei der Genauigkeit können die Berechnungen mit der Multipolmethode noch schneller durchgeführt werden.
Nun werden noch die theoretische Ergebnisse anhand der erzielten Werte überprüft. Dazu sind

Level	Zeitfaktor			Konvergenzordnungen		Nahbereich
	Standard	Multipol	Theorie	Standard	Multipol	in %
1			8.02	1.91/1.05	1.91/1.05	59.24
2	14.00	10.00	6.70	2.00/1.01	2.00/1.01	68.97
3	16.57	6.20	6.02	2.03/1.00	2.03/1.00	20.49
4	16.41	6.34	5.62	2.02/1.00	2.02/1.00	5.17
5	(16.42)	6.89	5.35		2.00/1.00	1.19
6	(16.58)	6.49	5.15		1.98/1.00	0.38

Tabelle 7.2: Auswertung der Daten für Beispiel 1

in der Tabelle 7.2 einige Auswertungen zusammengestellt. Zuerst werden die Faktoren, um die sich der Zeitaufwand im Vergleich zum vorherigen Level ändert, für das Standardverfahren und die Multipolmethode aufgelistet. Diese werden dann mit dem theoretische Wert

$$\frac{N \log^2 N}{\frac{N}{4} \log^2 \frac{N}{4}} = 4 \left(1 + \frac{\log 4}{\log \frac{N}{4}}\right)^2$$

für die Multipolmethode verglichen. Dann folgen die Konvergenzordnungen des Dirichlet– und Neumann–Fehlers. Abschließend wird noch der Anteil der Nahbereichseinträge bei der Multipolmethode bzgl. der Matrixeinträge bei herkömmlicher Berechnung angegeben.

Beim Standardverfahren wird der theoretische Zeitfaktor von 16 nahezu erreicht. Die Abweichungen werden durch die steigende Iterationszahl verursacht. Dieser Anstieg der benötigten Iterationen liegt an der fehlenden Vorkonditionierung. Für die Multipolmethode scheinen die Zeitfaktoren etwas oberhalb der theoretischen Werte zu liegen. Dies ist aber vor allem auf die steigende Itertionszahl zurückzuführen. Dabei kann der hohe Wert für Level 2 mit Ungenauigkeiten bei der Zeitmessung erklärt werden. Die Faktoren für die Verfeinerungslevel 5 und 6 liegen nur scheinbar deutlich über den theoretische Werten. Berücksichtigt man nämlich die steigende Anzahl der notwendigen Iterationen und betrachtet den Zeitfaktor für eine Matrixmultiplikation, so betragen die Faktoren der Simulation 6,38 und 5,00. Daß die Faktoren für die Level 4 und 5 etwas über den Erwartungen liegen liegt daran, daß in diesen Leveln jeweils der Entwicklungsgrad erhöht wurde. Da diese Erhöhung nur ganzzahlig erfolgen kann, wird bei den relativ niedrigen Entwicklungsgraden die Asymptotik gestört. Dafür liegt dann aber der Faktor für die sechste Stufe unter dem theoretischen Wert. Ein weiterer Grund für die teilweise etwas zu hohen Faktoren ist, daß auf den niedrigen Leveln der Nahbereichsparameter d so gewählt wurden, daß die größte Arbeit im Nahbereich zu verrichten ist und dadurch die Multipolmethode bereits auf den ersten Leveln zu einer Beschleunigung führt. Die wachsenden Iterationszahl wirkt sich bei der Multipolmethode stärker aus, da hier der Großteil der Arbeit bei der Matrixmultiplikation liegt.

Die Konvergenzordnungen stimmen zwischen dem Standardverfahren und der Multipolmethode überein, soweit sie vorliegen. Diese Werte entsprechen den aus den Fehlerabschätzungen gewonnenen Erwartungen. Bei der Multipolmethode ist für die letzte Verfeinerungsstufe nur eine minimale Abweichung erkennbar. Darauf wird im zweiten Beispiel noch genauer Bezug genommen.

7.2 2. Beispiel: Trafoausschnitt

Um nun noch ein nichtakademisches Beispiel zu untersuchen, wird der in Abbildung 7.3 dargestellte Trafoausschnitt, bestehend aus 1436 Randdreiecken, zur Berechnung herangezogen. Die Elemente in einer der beiden Ebenen des kleinen Spalts haben in der Höhe teiweise Abweichungen von 10^{-8} cm. Daher kann die Struktur durchaus als komplex betrachtet werden. Erneut wird ein gemischtes Randwertproblem mit der Lösung

$$u(x) = \frac{1}{|x - x_0|},$$

betrachtet, wobei die Singularität außerhalb der Struktur liegt. Die Randbedingungen werden wieder aus der vorgegebenen Lösung berechnet. In der Tabelle 7.3 sind die für dieses Beispiel erzielten Werte aufgelistet.

L	Elemente	Einträge	Erstellen	Lösen	It.	D-Fehler	N-Fehler
0	1436	1842992	176	4	37	8.30475e-04	3.28328e-02
		525951	51	26	37	8.30488e-04	3.28168e-02
1	5744	30118464	2850	77	46	2.07556e-04	1.34055e-02
		2061570	183	229	46	2.07568e-04	1.34298e-02
2	22976	487581440	(760 min)	(25,5 min)		(5.18890e-02)	(6.7275e-03)
		10472502	13,8 min	21,8 min	57	5.18756e-05	6.28320e-03
3	91904	7849356288	(203 h)	(8,8 h)		(1.29723e-05)	(3.14160e-03)
		25143798	28,7 min	140 min	74	1.29754-05	5.39901e-03

Tabelle 7.3: Ergebnisse zum zweiten Beispiel

Auch hier ist die starke Übereinstimmung zwischen den Berechnungen des Standardverfahrens und denen der Multipolmethode erkennbar. Erneut stößt man bei der herkömmlichen Berechnungsweise schnell an die Speichergrenzen. Mit der Multipolmethode wäre es mit dem vorhandenen Speicher noch möglich gewesen, die vierte Verfeinerungstufe mit 367616 Elementen zu rechnen. Dies war leider aufgrund eines vom vorliegenden Programm unabhängigen Problems mit der Speicherzuweisung nicht möglich. Hierfür wäre der zu erwartende Geschwidigkeitsvorteil noch größer als der Faktor 75 im dritten Verfeinerungslevel. Diese Reduktion der Rechenzeit von ungefähr neun Tagen auf weniger als drei Stunden ist aber bereits erheblich. In der Tabelle 7.4 wurden wieder einige Auswertungen vorgenommen, um die theoretischen Ergebnisse zu überprüfen.

Level	Zeitfaktor			Konvergenzordnungen		Nahbereich
	Standard	Multipol	Theorie	Standard	Multipol	in %
0						28.54
1	16.26	5.35	5.67	2.00/1.29	2.00/1.29	6.84
2	(16.09)	5.17	5.38		2.00/1.10	2.15
3	(16.18)	4.75	5.18		2.00/0.22	0.32

Tabelle 7.4: Auswertung der Daten des zweiten Beispiels

Der Zeitzuwachs liegt für die Multipolmethode unterhalb der zu erwartenden Werte, was sich zunächst nicht auf die Fehlerkonvergenz auswirkt. Hier kommt es allerdings bei der Konvergenzordnung des Neumann–Fehlers zu einem Einbruch auf der dritten Verfeinerungstufe. Daß dieses Phänomen für den Dirichlet–Fehler nicht auftritt, liegt wohl daran, daß der größte Teil des Randes als Dirichlet–Rand gewählt wurde. Selbst erhebliche Änderungen der Parameter bei der Multipolmethode, die den Fehler des Multipolanteils um ein Vielfaches verringern, bringen nur eine unwesentliche Verbesserung des Fehlers.

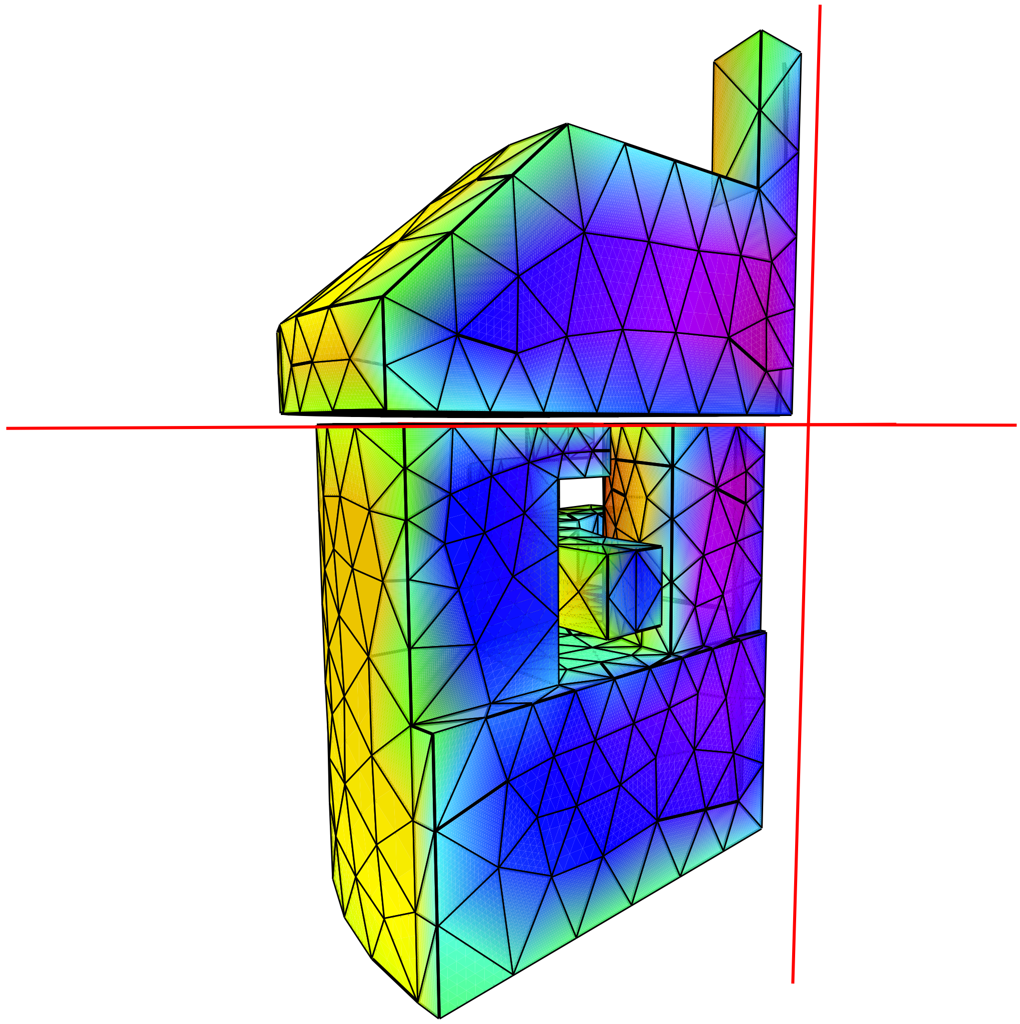

Abbildung 7.3: Visualisierung des Trafos

Es gibt zwei Möglichkeiten, dieses Problem zu erklären. Zunächst könnte durch die Implementierung die Konvergenz der Multipolmethode für große Dimensionen z.B. durch Auslöschungseffekte verlorengegangen sein. Dies erscheint allerdings nicht sehr wahrscheinlich da für das erste Beispiel bei einer noch größeren Elementzahl nur eine sehr kleine Abweichung vom theoretischen Wert auftritt. Die zweite Möglichkeit ist, daß die Integration im Nahbereich für diesen Einbruch im Konvergenzverhalten verantwortlich ist. Die Auswertung der entsprechen-

den Potentiale mittels der semi–analytische Formeln ist im Vergleich zu anderen Integrationen schnell und auch genau. Allerdings werden in Kombination mit der für die äußere Integration verwendeten 7–Punkte–Formel die Singularitäten nicht aufgelöst. Zu Beginn der Implementierung der analytischen Formeln traten derartige Probleme bereits auf der Grobstruktur auf. Diese konnten dort aber bereinigt werden. Durch die Singularitäten treten gerade bei der Berechnung der Matrixeinträge für angrenzende und identische Formfunktionen doch erhebliche Abweichungen gegenüber Berechnungen, die die Singularitäten auflösen (vgl. [22]), auf. Diese Abweichungen konnten an einzelnen Modellbeispielen überprüft werden.
Für diesen Fall würde das Problem auch bei einer Berechnung ohne die Multipolmethode auftreten. Da die Berechnung eines so hohen Verfeinerungslevel mit der Standardmethode nicht möglich ist, wurde in weiteren Rechnungen die Singularität der Lösung näher an der Struktur plaziert. Dabei konnte bei einigen Beispielen bereits für den Übergang zur ersten Verfeinerungsstufe die notwendige Konvergenz nicht erzielt werden. Die Ergebnisse des Standardverfahrens und der Multipolmethode stimmten dabei aber überein. Dann ist der nur geringe Einbruch der Konvergenzordnung beim ersten Beispiel auf dessen einfache Struktur zurückzuführen. Die komplexe Struktur aus dem zweiten Beispiel mit dem Spalt der Höhe 10^{-8} cm scheint die verwendeten numerischen Integrationen z.B. durch Stellenauslöschung und Sonderfälle schneller an ihren Grenzen zu bringen. Auf den niedrigeren Verfeinerungsleveln tritt ein solcher Einbruch der Konvergenzordnung nicht auf, da hier die einzelnen Randelemente vermutlich noch nicht so klein sind, daß die Integrationen ungenau werden. Es gibt also einige Hinweise darauf, daß das Problem in der Berechnung der Einträge aus sehr naheliegenden Randelementen liegt.
Abgesehen von dem soeben erörterten Problem konnten die theoretische Erwartungen problemlos erfüllt werden. Die erzielten Zeiteinsparungen sind erheblich und lassen sich durch verbesserte Versionen der Multipolmethode noch steigern. Außerdem ist es durch die Reduzierung des Speicherbedarfs möglich, Problem großer Dimensionen zu lösen. Insgesamt erweist sich die Realisierung der Randelementmethode mittels der Multipolmethode als sehr lohnenswert, da die Anwendbarkeit der Randelementmethode doch erheblich verbessert wird.

Literaturverzeichnis

[1] R.A: Adams, Sobolev Spaces, Academic Press, 1975.

[2] A.W. Appel, An Efficient Program for Many–Body Simulation, SIAM J. Sci. Stat. Comput. 6(1) (1985), 85–103.

[3] G.R. Baker and M.J. Shelley, Boundary Integral Techniques for Multi–connected Domains, J. Comput. Phys. 64 (1986), 112–132.

[4] M. Bebendorf, Effiziente numerische Lösung von Randintegralgleichungen unter Verwendung von Niedrigrang–Matrizen, Dissertation, Universität des Saarlandes, 2000.

[5] C.L. Berman, Grid–Multipole Calculations, SIAM J. Sci. Comput. 16 (1995), 1082–1091.

[6] S.C. Brenner und L.R. Scott, The Mathematical Theory of Finite Element Methods, Springer, New York, 1994.

[7] J. Breuer, Wavelet–Approximation der symmetrischen Variationsformulierung von Randintegralgleichungen, Diplomarbeit, Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart, 2001.

[8] A. Buffa, M. Costabel and C. Schwab, Boundary element methods for Maxwell's equations on non–smooth domains, Report No. 2001-01, Seminar für Angewandte Mathematik, ETH Zürich, 2001.

[9] B.C. Carlson and G.S. Rushbrooke, On the Expansion of a Coulomb Potential In Sperical Harmonics, Proc. Cambridge Phil. Soc. 46 (1950), 626–633.

[10] H. Cheng, L. Greengard and V. Rokhlin, A Fast Adaptive Multipole Algorithm in Three Dimensions, J. Comput. Phys. 155 (1999), 468–498.

[11] H. Cheng, V. Rokhlin and N. Yarvin, Nonlinear Optimization, Quadrature and Interpolation, SIAM J. Optim. 9, 901–923.

[12] P.G. Ciarlet, The Finite Element Method for Ellitic Problems, North Holland Publishing Company, 1978.

[13] R. Coifman, M. Goldberg, T. Hrycak, M. Isreali and V. Rokhlin, An improved operator expansion algorithm for direct and inverse computations, Waves Random Media 9 (1999), 441–457.

[14] M. Costabel, Boundary Integral Operators on Lipschitz Domains: Elementary Results, SIAM J. Math. Anal. 19 (1988), 613–626.

[15] M. Danos and L.C. Maximon, Multipole Matrix Elements of the Translation Operator, J. Math. Phys. 6 (1965), 766–778.

[16] E. Darve, The Fast Multipole Method: Numerical Implementation, J. Comput. Phys. 160 (2000), 195–240.

[17] E. Darve, The Fast Multipole Method I: Error Analysis and Asymptotic Comlexity, SIAM J. Numer. Anal. 38 (2000), 98–128.

[18] E. Darve, Fast–multipole method: a mathematical study, C.R. Acad. Sci. Paris, t. 3125, Serie 1 (1997), 1037–1042.

[19] R. Dautray and J.L. Lions, Mathematical Analysis und Numerical Methods for Science and Technology Vol. 4: Integral Equations and Numerical Methods, Springer Verlag, Berlin, 1990.

[20] W.D. Elliott and J.A. Board, Fast Fourier Transform Accelerated Fast Multipole Algorithm, SIAM J. Sci. Comput. 17 (1996), 398–415.

[21] M.A. Epton and B. Dembart, Multipole Translation Theory for the Three–Dimensional Laplace and Helmholtz Equations, SIAM J. Sci. Comput. 16 (1995), 865–897.

[22] S. Erichson und S.A. Sauter, Efficient automatic quadrature in 3-d Galerkin BEM, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. (1998), 215–224.

[23] Fu, Yuhong: Rapid Solution of Large–Scale Three–Dimensional Micromechanics Problems, Dissertation, TICAM, University of Texas, Austin, 1998.

[24] K. Giebermann, Schnelle Summationsverfahren zur numerischen Lösung von Integralgleichungen für Streuprobleme im $\mathbb{R}^3$, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1997.

[25] A. Greenbaum, L. Greengard and A. Mayo, On the numerical solution of the biharmonic equation in the plane, Physica D 60 (1992), 216–225.

[26] A. Greenbaum, L. Greengard and G.B. McFadden, Laplace's Equation and the Dirichlet–Neumann Map in Multiply Connected Domains, J. Comput. Phys. 105 (1993), 267–278.

[27] L.F. Greengard, The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems, The MIT Press, Cambridge, MA, 1987.

[28] L. Greengard and V. Rokhlin, A Fast Algorithm for Particle Simulations, J. Comput. Phys. 73 (1987), 325–348.

[29] L. Greengard and V. Rokhlin, A new version of the Fast Multipole Method for the Laplace equation in three dimensions, Acta Numerica (1997), Cambridge Univ. Press, 229–269.

[30] L. Greengard, J. Huang, V. Rokhlin, and S. Wandzura, Accelerating Fast Multipole Methods for the Helmholtz Equation at Low Frequencies, IEEE Comput. Sci. and Engin. 5 (1998), 32–38.

[31] W. Hackbusch and Z.P. Nowak, On the Fast Matrix Multiplication in the Boundary Element Method by Panel Clustering, Numer. Math. 54 (1989), 463–491.

[32] W. Hackbusch and S. Sauter, On the Efficient Use of the Galerkin–Method to Solve Fredholm Integral Equations, Appl. Math. 38 (1993), 301–302.

[33] E. W. Hobson, The Theory of Spherical and Ellipsoidal Harmonics, Chelsea, New York, 1955.

[34] L. Hörmander, The Analysis of Linear Partial Differential Operators I, Second Edition, Springer, 1990.

[35] T. Hrycak and V. Rokhlin, An Improved Multipole Algorithm for Potential Fields, SIAM J: Sci. Comput. 19 (1998), 1804–1826.

[36] G.C. Hsiao, W.L. Wendland, A finite element method for some integral equations of the first kind, J. Math. Anal. 58 (1997), 449–481.

[37] G.C. Hsiao, W.L. Wendland, The Aubin–Nitsche Lemma for integral equations, J. Int. Eq. 3 (1981), 299–315.

[38] O. D. Kellogg, Foundations of Potential Theory, Dover, New York, 1953.

[39] F.T. Korsmeyer, J. Phillips, K. Nabors, and J. White, Some Emperical Results on Using Multipole–Accerlerated Iterative Methods to Solve 3-D Potential Integral Equations, Parallel Numerical Algorithms (Hampton, VA, 1994), Kluwer Acad. Publ., 1997, 267–288.

[40] C. Lage, Softwareentwicklung zur Randelementmethode: Analyse und Entwurf effizienter Techniken, Dissertation, Kiel, 1995.

[41] Hong–Bao Li, Guo–Ming Han and H.A. Mang, A New Method for Evaluating Singular Integrals in Stress Analysis of Solids by the Direct Boundary Element Method, Int. J. Num. Meth. Engin. 21 (1985), 2071–2098.

[42] T. M. MacRobert, Spherical Harmonics, Pergamon Press, 1967.

[43] W. McLean, Strongly Ellitpic Systems and Boundary Integral Equations, Cambridge University Press, 2000.

[44] A.W. Maue, Zur Formulierung eines allgemeinen Beugungesproblems durch eine Integralgleichung, Z. f. Physik 126 (1949), 601–618.

[45] A. Mayo, Fast High Order Accurate Solution of Laplace's Equation of irregular Regions, SIAM J. Sci. Stat. Comput. 6(1) (1985), 144–157.

[46] K. Nabors and J. White, Multipole–Accelerated Capacitance Extraction Algorithms for Three–Dimensional Structures with Multipole Dieletrcis, IEEE Trans. Circuits and Systems 39 (1992), 946–954.

[47] K.Nabors, F.T. Korsmeyer, F.T. Leighton, and J. White, Preconditioned, Adaptive, Multipole–Accelerated Iterative Methods for Three–Dimensional First–Kind Integral Equations of Potential Theory, SIAM Sci. Comput. 15 (1994), 713–735.

[48] J. Nédélec, Integral equations with non integrable kernels, Int. Eq. Operat. Th. 5 (1982), 562–572.

[49] A.P. Peirce and J.A.L. Napier, A Spectral Multipole Method for Efficient Solution of Large–Scale Boundary Element Models in Electrostatics, Int. J. Num. Meth. Engin. 38 (1995), 4009–4034.

[50] J. Radon, Zur mechanische Kubatur, Monatshefte für Mathematik 52 (1948), 286–300.

[51] J. Rahola, Diagonal Forms of the Translation Operators in the Fast Multipol Algorithm for Scattering Problems, BIT 36 (1996), 333–358.

[52] V. Rokhlin, Rapid Solution of Integral Equations of Classical Potential Theory, J. Comput. Phys. 60 (1984), 187–207.

[53] V. Rokhlin, Rapid Solution of Integral Equations of Scattering Theory in Two Dimensions, J. Comput. Phys. 86 (1990), 414–439.

[54] M.E. Rose, The Electrostatic Interaction of Two Arbitrary Charge Distributions, J.Math. and Phys., 37 (1958), 215–222.

[55] Y. Saad, M.H. Schultz, GMRES: A generalized minimal residual method for solving nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Stat. Comp. 7 (1986), 856–869.

[56] Y. Saad, Iterative Mathods for sparse Linear System, International Thomson Publisching, PWS Publishing Company, Boston, 1996.

[57] S. Sauter, Über die effiziente Verwendung des Galerkinverfahrens zur Lösung Fredholmscher Integralgleichungen, Dissertation, Kiel 1992.

[58] S. Sauter, Variable order panel clustering, Computing 64 (2000), 223–261.

[59] A.H. Schatz, V. Thomée, W.L. Wendland, Mathematical Thoery of Finite and Boundary Element Methods, Birkhäuser, Basel, 1990.

[60] R. Schneider, Multiskalen– und Wavelet–Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur effizienten Lösung großer vollbestzter Gleichungssysteme, Advances in Numerical Mathematics, B.G. Teubner, Stuttgart, 1998.

[61] C. Schwab, W.L. Wendland, On numerical cubatures of singular surface integrals in boundary element methods, Numer. Math. 62 (1992), 343–369.

[62] C. Schwab, W.L. Wendland, Kernel properties and representations of boundary integral operators, Math. Nachr. 156 (1992), 187–218.

[63] O. Steinbach, A note on initial higher order convergence results for boundary element methods with approximated boundary conditions, Num. Methods. Part. Diff. Eq. 16 (2000), 581–588.

[64] O. Steinbach, Adaptive boundary element methods based on computational schemes for Sobolev norms, SIAM J. Sci. Comput. 22 (2000), 604–616.

[65] O. Steinbach, Galerkin– und Kollokations–Diskretisierungen fr Randintegralgleichungen in 3D, Preprint.

[66] O. Steinbach, Randelementmethoden, Vorlesungsskript, Universität Stuttgart, 1999.

[67] E.E. Tyrtyshnikov, Mosaic skeleton approximations, Calcolo 33 (1996), 47–57.

[68] G. Verchota, Layer Potentials and Regulatity for the Dirichlet Problem for Laplace's Equation in Lipschitz Domains, J. Func. Anal. 59 (1984), 572–611.

[69] P.R. Wallace, Mathematical Analysis of Physical Problems, Dover, New York, 1984.

[70] W. L. Wendland, Strongly elliptic boundary integral equations, in: The State of the Art in Numerical Analysis, A. Iserles, M.Powell, eds., Clarendon Press, Oxford, 1987, 511–561.

[71] W. L. Wendland, Über Galerkin–Verfahren zur Lösung des Dirichlet–Problems in L_p–Räumen für gleichmäßig elliptische Differentialgleichungen, Abh. Math. Seminar Universität Hamburg 36 (1971), 1085–1097.

[72] N. Yarvin and V. Rokhlin, Generalized Gaussian Quadratures and Singular Value Decompositions of Integral Operators, SIAM J. Sci. Comput. 20 (1998), 699–718.

[73] N. Yarvin and V. Rokhlin, An Improved Fast Multipole Algorithm for Potential Fields on the Line, SIAM J. Numer. Anal. 36 (1999), 629–766.