2.1 Teilprojekt A7

Parallele Behandlung für 3D-Rand-Element-Methoden auf der Grundlage biorthogonaler Waveletbasen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. rer. nat. habil. Reinhold Schneider,
Fakultät für Mathematik, Professur Numerik und Analysis partieller Differentialgleichungen

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. rer. nat. U. Luther (Projektbearbeiter),
Dr. rer. nat M. Jung (Grundausstattung),
Dipl. Math. M. Konik (Grundausstattung),
Dipl. Math. H. Harbrecht (DFG Einzelprojekt),
Lehrstuhl Numerik und Analysis partieller Differentialgleichungen

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Verschiedene Fragestellungen im Rahmen der numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen wie beispielsweise Außenraumprobleme der Akustik und der Elektrostatik, sowie Randwertprobleme der Elastizitätstheorie und der Strömungsmechanik lassen sich mittels Randintegralgleichungsmethoden bzw. durch Kombination von Finite-Element- und Randintegralgleichungsmethoden vorteilhaft behandeln [CO], denn an Stelle der Feldgleichung im ganzen Gebiet muß lediglich eine Integralgleichung auf dem Rand des Gebietes gelöst werden. Eine realistische Simulation räumlich dreidimensionaler Probleme durch die numerische Lösung dieser Integralgleichungen mittels Randelementmethoden erfordert aber demgegenüber die Behandlung sehr großdimensionierter linearer Gleichungssysteme, die üblicherweise im Gegensatz zu den Finite–Elemente–Diskretisierungen zu voll besetzten Matrizen führen. Der damit verbundene Bedarf an Speicherplatz und Rechenzeit beschränkt die Möglichkeiten der Randelementmethoden drastisch. Moderne Ansätze wie das *Panel-Clustering-Verfahren* [HANO], die *schnelle Multipolentwicklung* [RO] oder neuerdings die *Multiskalenmethoden* [BCR, DPS2, DPS3, PSS, S, DSII] versprechen einen Ausweg aus dieser Situation.

Multiskalenmethoden beruhen auf der Verwendung von Multiskalenbasen oder biorthogonalen Waveletbasen [CDF, D, CO] zur Diskretisierung der Integralgleichungen. Die damit entstehenden Systemmatrizen sind quasi dünn besetzt. Ein weiterer Augenmerk gilt der Multilevel- oder Multiskalenvorkonditionierung, die sich aufgrund der hierarchischen Struktur der Multiskalenbasen einfach durchführen läßt [DK, D, S].

Einem vernünftigen Einsatz von Wavelets in der numerischen Analysis standen entscheidende Hürden im Weg, die überwunden werden mußten:

- Definition von biorthogonalen Waveletbasen auf Oberflächen,
- Entwicklung geeigneter Kompressionskriterien, die entscheiden ob ein Matrixkoeffizient benötigt wird,
- Entwicklung geeigneter numerischer Integrationsmethoden zur effizienten Berechnung der benötigten Matrixkoeffizienten.

In enger Zusammenarbeit in erster Linie mit der Arbeitsgruppe um Prof. W. DAHMEN (RWTH Aachen) wurden für die Weiterentwicklung entscheidende Grundlagen gelegt. Insbesondere bei der Konstruktion von Waveletbasen auf Gebieten und Mannigfaltigkeiten sowie der Einbeziehung homogener Randbedingungen wurden Zugänge entwickelt, die es erlauben Waveletmethoden auf realistische Randwertprobleme und Anfangsrandwertprobleme anzuwenden. Diese Ansätze sind im Rahmen des Parallelrechnerkonzeptes zu realisieren. Im Antrag wurden die folgenden Teilaufgaben gestellt:

1. **Multiskalenbasen auf Oberflächen: Zerlegung der Oberfläche und Parametrisierung der Oberflächenstücke, Entwicklung von Multiskalenbasen auf den parametrischen Oberflächen**

   In vielen Fällen ist es üblich eine Oberfläche Γ stückweise aus parametrischen Flächenstücken Γ_i zusammenzusetzen. Die in der Praxis übliche Herangehensweise besteht darin, diese Teile mit hinreichender Regularität zusammenzufügen. Wenn man höhere Anforderungen an die Regularität der Oberfläche und deren Parametrisierung stellt, ist dies in der Praxis eine nichttriviale Aufgabe. Mit vertretbarem Aufwand lassen sich GC^1–Parametrisierungen von Flächen erzeugen, das heißt, der *Normaleneinheitsvektor* verhält sich auch an den Verbindungsstellen stetig. Im Zusammenhang mit *Spektral-Element-Methoden* und parametrischen *Finite-Element-Methoden* kennt man analoge stückweise parametrische Darstellungen für ebene Gebiete bzw. räumliche Gebiete in 3D. Die besondere Problematik der GC^1–stetigen Parametrisierungen entfällt hier. Für diese Art der Darstellung von Oberflächen oder allgemeiner Mannigfaltigkeiten und Gebieten bieten sich nichtüberlappende Gebietszerlegungsstrategien unmittelbar an.

   Anhand der hinreichend bekannten Waveletkonstruktionen im eindimensionalen stationären Fall [D, CDF], d.h. auf einem unbegrenzten oder periodischen, uniformen Gitter, gilt es, auf dem Intervall ebenfalls geeignete Basen zu bilden. Eventuell hat man hier gewisse Randbedingungen festzulegen. Durch Tensorproduktbildung erhält man damit biorthogonale Wavelets auf dem Quadrat, das man als Referenzgebiet zur Parametrisierung zugrundelegt. Diese Wavelets werden mittels der Parameterabbildung auf die Oberfläche geliftet, sind aber vorerst noch unstetig. Wird Stetigkeit nicht benötigt, kann man sogar *orthogonale Multiwavelets* verwenden [PSS]. Fordert man aber globale Stetigkeit, so müssen diese Funktionen noch geeignet zusammengefügt oder fortgesetzt werden, worin die Hauptschwierigkeit liegt. Welche Anforderungen daraus resultierend an die Basisfunktionen zu stellen sind wurde in [S] geklärt.

2. **Matrixgenerierung: Konstruktion und Berechnung der dünn besetzten komprimierten Systemmatrizen für Randintegralgleichungen**

   Die Systemmatrizen bezüglich der Waveletbasen sind selbst nicht dünn besetzt, aber die Mehrzahl der Einträge ist vernachlässigbar ohne die optimale Konvergenzrate zu verlieren [DPS2, PS1, PSS, S, DSII]. Welche Matrixkoeffizienten vernachlässigbar sind klärt ein Distanzkriterium [S, DSII]. Nun gilt es, anhand dieses Kriteriums die erforderlichen Matrixeinträge zu ermitteln. Dies sollte mit möglichst optimalem Aufwand erfolgen – man kann nicht für jeden Matrixeintrag abfragen, ob er benötigt wird oder nicht (siehe dazu Abbildung 2.1).

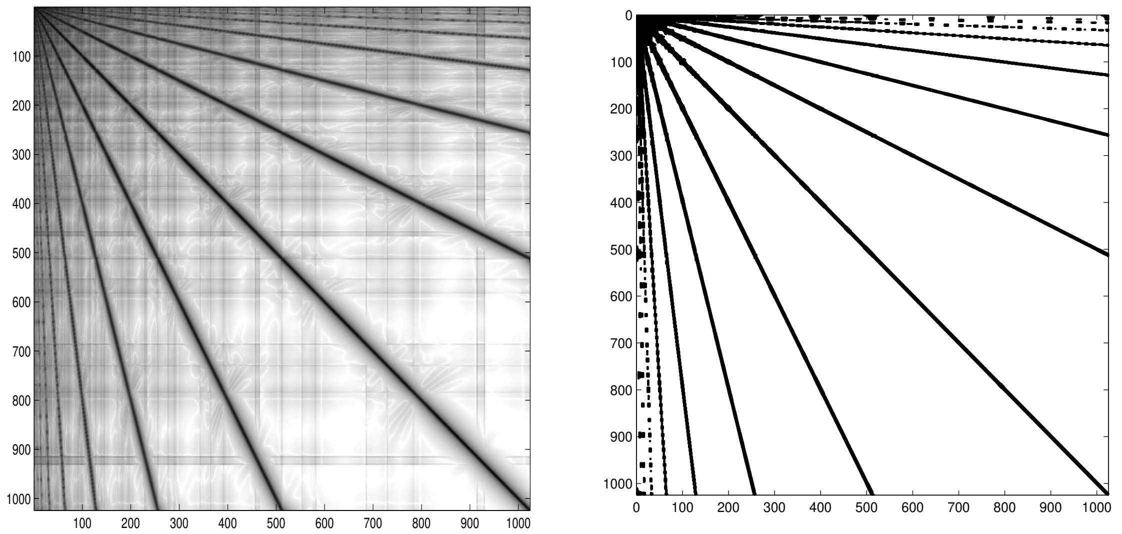

Abbildung 2.1: Die Galerkin-Matrix (Einfachschichtpotential, stw. linear, 2D) (links) und die daraus zu berechnenden Einträge nach dem Distanzkriterium (rechts).

Das wesentliche Hauptproblem besteht jedoch in der Berechnung der benötigten Matrixkoeffizienten. Da die Integralkerne singulär sind und die entstehenden Integrale nicht analytisch ausgewertet werden können, benötigt man ein effizientes volldiskretes Verfahren. Von Vorteil ist, daß sich die numerische Berechnung der Matrixeinträge sehr gut parallel abarbeiten läßt. Allerdings erfordert die Abfrage des Distanzkriteriums auch Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessoren. Die gewählte Datenstruktur muß sowohl dem Multiskalen-Verfahren wie auch der parallelen Architektur Rechnung tragen.

3. **Lösen der diskretisierten Gleichungen auf Parallelrechnern und Postprocessing zur Feldberechnung**

   Die auftretenden Gleichungssysteme sind oftmals nicht symmetrisch, jedoch sind sie bzgl. der Multiskalendarstellung durch eine Diagonalskalierung einfach vorkonditionierbar. Entsprechend der Besetzungsstruktur bieten sich Iterationsverfahren an, wobei es im Rahmen der Parallelrechentechnik darauf ankommt, den Kommunikationsaufwand gering zu halten. Letztlich muß vielfach die Feldgröße im Gebiet bestimmt werden. Die Multiskalendarstellung erlaubt sicherlich auch eine schnellere Berechnung dieser Feldgröße. In diesem Bereich ist noch wenig erforscht.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Multiskalenbasen auf Oberflächen

Das wesentliche Hilfsmittel in unseren Arbeiten ist die *stable completion* [CDP]. Daraus kann man Multiskalenbasen mit hinreichend vielen verschwindenden Momenten bilden [S, SW]. Allerdings garantiert diese Konstruktion noch nicht die Stabilität der Basen ψ_λ, $\tilde{\psi}_\lambda$, $\lambda = (i, l, e, k_1, k_2)$, $l \geq -1$. Auf Grundlage des obigen Gebietszerlegungskonzeptes entstanden nun mehrere Vorschläge, stabile Multiskalenbasen oder Wavelets zu konstruieren. Die verschiedenen Multiskalenbasen auf Mannigfaltigkeiten unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Eigenschaften. Gemäß des Tensorproduktkonzeptes entstanden folgende Beiträge.

Wavelets auf dem Intervall

Die Arbeit [CDV] enthielt die ersten orthogonalen Wavelets auf einem Intervall, mit denen sich alle Polynome bis zum Grad d darstellen lassen. Entsprechende biorthogonale Wavelets auf dem Intervall wurden in [DKU] konstruiert. Diese Arbeit bildet den Ausgangspunkt für die weiteren Arbeiten. In [DS1, DS2] wurden Basen benötigt, die sich symmetrisch an den beiden Intervallenden verhielten. Zudem wurde die Konstruktion derart modifiziert, daß lediglich am Rand nur eine einzige Funktion nicht verschwindet [DS1, DS2]. Das Weglassen dieser Funktion führt zu biorthogonalen Wavelets mit homogenen Dirichletdaten [DS1, DS2]. Allerdings besitzen damit auch die dualen Funktionen verschwindende Dirichletdaten, somit sind nicht alle Polynome enthalten und die Momentenbedingung geht am Rand verloren.

Will man dies verhindern, so entsprechen den homogenen Dirichletrandbedingungen komplementäre Randbedingungen auf der dualen Seite. Solche Basisfunktionen wurden in [DSB] mittels partieller Integration gewonnen. In dieser Arbeit wurden sie aber auch direkt konstruiert.

Wavelets auf Oberflächen und Gebieten

Die vorgeschlagenen Konstruktionen von Multiskalenbasen bzw. lokaler Waveletbasen auf Oberflächen oder allgemeiner Mannigfaltigkeiten beruht, wie bereits betont, auf einer Gebietszerlegungsstrategie. Die Mannigfaltigkeit bzw. das Gebiet wird in nichtüberlappende Teilgebiete Γ_i zerlegt, die jeweils das Bild des Referenzgebietes

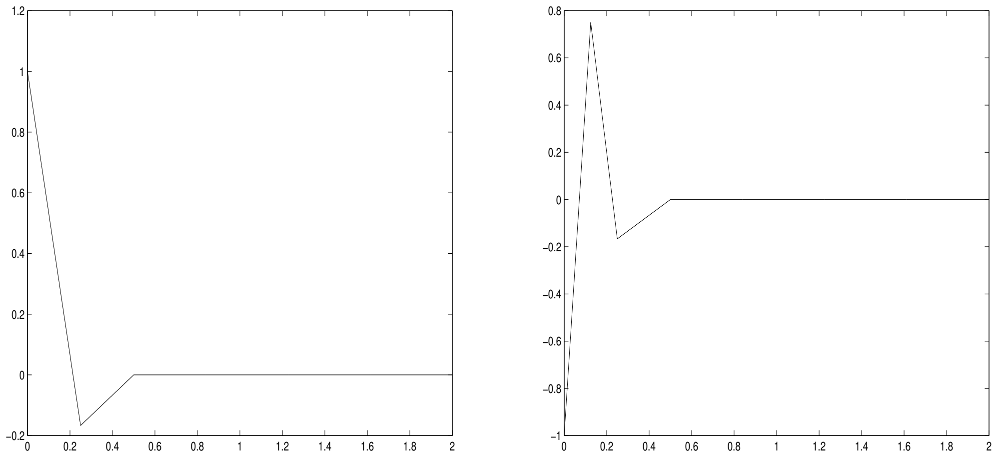

Abbildung 2.2: Skalierungsfunktion und Wavelet am Rand

unter einer Parametrisierung bilden. Die Waveletbasen, die auf einem Referenzgebiet, im vorliegenden Fall dem Einheitsquadrat bzw. dem n-Cubus, konstruiert wurden, werden mittels der parametrischen Abbildung auf die Mannigfaltigkeit geliftet.

In [DS1, DS2] wurden erstmals global stetige biorthogonale Waveletbasen auf einer Mannigfaltigkeit bzw. einem Gebiet konstruiert, deren duale Basen auch wieder global stetig sind. Die wesentliche Schwierigkeit besteht im stetigen Zusammenfügen der Basen entlang den Rändern der einzelnen Gebiete. Diese Basen zeichnen sich durch folgende Eigenschaften aus: Sowohl die primalen als auch die dualen Basen sind per Konstruktion global stetig und besitzen jeweils eine *Exaktheit*, d.h. eine Approximationsordnung, der Ordnung d bzw. im dualen Fall $\tilde{d}$. Dabei entspricht $\tilde{d}$ der Ordnung der verschwindenden Momente (bzw. Cancellation Property) der primalen Wavelets. Entscheidend ist daran, daß die Ordnung d und die Anzahl der verschwindenden Momente $\tilde{d}$ jeweils unabhängig voneinander gewählt werden können. Die gesuchten Wavelets entstehen dann durch Projektion einer bereits bekannten Multiskalenbasis, wie z.B. die nodale hierarchische Basis, in den richtigen Komplementärraum, der sich durch Basisfunktionen mit den gewünschten Eigenschaften auszeichnet. Der entsprechende Projektor kann einfach mit Hilfe der *Masken* $\mathbf{M}_{j,i}$, $i = 0, 1$ matriziell ausgedrückt werden (*stabile Vervollständigung* [CDP]). Im Innern entstehen je nach Ausgangsbasis bekannte biorthogonale Wavelets, wie sie beispielsweise in [CDF] zu finden sind, bzw. Tensorprodukte solcher Wavelets. Am Rande treten die entscheidenden Veränderungen gegenüber dem stationären Fall auf. Praktisch überaus wichtig ist die Tatsache, daß man diese Prozedur nur für gewisse Standardsituationen global durchführen muß. Lediglich Basisfunktionen in der Nähe des Randes, also in der Nähe von Kanten, Ecken usw., werden dabei modifiziert. Diese Funktionen sind nur von der lokalen Topologie abhängig. Beispiele solcher Funktionen finden sich im nächsten Abschnitt. Für solche Funktionen konnten die wesentlichen Eigenschaften wie *Approximations-*, *Inverse Eigenschaft, Normäquivalenz, Momentenbedingung* sowie *Regularität* nachgewiesen werden [DS1, DS2].

In jüngster Zeit sind in anderen Arbeitsgruppen auch Arbeiten entstanden, die ebenfalls zu Basen mit vergleichbaren Eigenschaften wie in [DS1] führen und die an dieser Stelle nicht unerwähnt bleiben sollen [CTU, CM]. Im Gegensatz zu den Randintegralgleichungen stehen dort Randwertprobleme mehr im Vordergrund, dies bereitet in diesem Kontext aber keine prinzipiellen Probleme [CTU, CM]. Infolge dieser Entwicklung haben wir uns bemüht, die Darstellung [DS2] gegenüber [DS1] stark zu verbessern.

Die obigen Basisfunktionen weisen jedoch eine Schwäche auf: die Biorthogonalität besteht bezüglich eines modifizierten Skalarproduktes. Dieses Skalarprodukt ist im wesentlichen definiert über die Skalarprodukte der jeweiligen Referenzgebiete und enthält nicht, wie das kanonischerweise sein müßte, das Oberflächenmaß bzw. die Jakobideterminante. Aus diesem Grund kann eine Regularität $\tilde{\gamma} \geq \frac{1}{2}$ der dualen Basisfunktionen i.a. nicht gesichert werden. Infolgedessen wird die Einfachschichtpotentialgleichung nicht mehr optimal vorkonditioniert, wenngleich dieser Defekt sehr mild ist und praktisch eine geringfügige Rolle spielen dürfte.

Um dieses Defizit der obigen Basisfunktionen zu beseitigen, wurde in der Arbeit [DSI] ein anderer Zugang gewählt. Ausgehend von Basisfunktionen, die geeigneten Randbedingungen genügen [DSB], wurden *Multiskalen-Fortsetzungsoperatoren* in [DSI] definiert. Diese Operatoren lassen sich effizient, im Sinne einer Komplexitätsbetrachtung, auswerten. Die in [DSI] vorgeschlagenen Fortsetzungsoperatoren beruhen auf der *Hestenes-Fortsetzung* von Basisfunktionen am Rand. An weiteren Fortsetzungsoperatoren, die einfacher handbar sind, wird augenblicklich gearbeitet. Ein zusätzlicher Vorteil dieses Zuganges, basierend auf der Hestenes-Fortsetzung der Randbasen, besteht darin, daß man jede gewünschte Regularität erzielen kann, aber für die hier vorliegenden Probleme ist dieser Gesichtspunkt von geringer Bedeutung.

2.3.2 Teilaufgabe Konstruktion der dünn besetzten komprimierten Systemmatrizen für Randintegralgleichungen

Aufgrund unserer Konstruktion unterscheiden wir die einzelnen Basisfunktionen nach dem jeweiligen Oberflächenstück Γ_i, der Skala l, dem Typ $e = (0,0), (0,1), (1,0)$, $(1,1)$, je nachdem, welches Tensorprodukt der jeweiligen Basisfunktion zugrundeliegt, sowie einem lokalen Index $k = (k_1, k_2)$. Dies legt eine entsprechende Indizierung nahe und gibt uns kanonisch den Rahmen für die zugrundeliegende Datenstruktur vor. Ein solcher Aufbau der Daten erlaubt eine einfache Aufteilung auf verschiedene Prozessoren, die man entsprechend der Gebietszerlegung mit den Variablen der Oberflächenteile Γ_i belegt. Für ein zukünftige adaptive Verfahrensweise müssen wir aber von dieser unmittelbaren Aufteilung wieder abweichen, da obige Verteilung auf die einzelnen Prozessoren in der Regel zu sehr unterschiedlicher Auslastung derselben führen wird.

Durch den hierarchischen Charakter der Multiskalenbasen ist zusätzlich in typischer Weise den Indizes eine Art Baumstruktur aufgeprägt. Das macht man sich beim Aufstellen der Matrix zu Nutze. Man prüft das Distanzkriterium zuerst auf den groben Skalen $l = 0, 1, 2, \ldots$. Falls der Koeffizient nicht benötigt wird, weiß man auch, daß die entsprechenden Koeffizienten der *Söhne* auf den feineren Skalen nicht benötigt werden. Das heißt, man erspart sich das Abfragen aller Matrixkoeffizienten, wodurch der Aufwand hierfür von optimaler Ordnung ist. Die numerische Berechnung der einzelnen Matrixkoeffizienten ist auch Thema des von der DFG geförderten Einzelprojektes *Numerische Quadraturverfahren für Wavelet- und Multiskalenmethoden zur effizienten Behandlung von Randintegralgleichungen.* Da die dortigen Arbeiten und Ergebnisse unmittelbar in dieses Projekt einfließen, sollen sie an dieser Stelle nur kurz umrissen werden. Wir beschränken uns hier auf den Fall des schwach singulären Integraloperators; dies ist gerechtfertigt, da man mittels geeigneter Regularisierung die anderen Operatoren auf solche mit schwacher Singularität zurückführen kann. Die mathematische Analyse der Matrixkompression läßt sich analog anwenden, um Fehlerschranken für die numerischen Berechnungen der auftretenden Integrale festzulegen. Um diese Toleranzen zu unterbieten, müssen etwas abseits der Singularität die Integrationsgebiete dyadisch unterteilt werden. Auf den entsprechenden Bereichen verwendet man beispielsweise Produkt-Gauß-Quadraturformeln, deren Grad an die gewünschte Genauigkeit angepaßt werden muß. Es verbleiben immer noch Integrale, welche die (schwache) Singularität enthalten. Diese werden nach einer Idee in [SAT] umgeformt, und mittels *Duffy-Trick* letztendlich auf Integrale über analytische Integranden transformiert. Diese Methode wurde bereits in [S] für das Kollokationsverfahren und in [PS2] für das Galerkinverfahren vorgeschlagen und analysiert. Infolge der dyadischen Unterteilung und dem Anpassen der Ordnung der Gauß-Quadratur treten allerdings logarithmische Terme in den Aufwandsbetrachtungen auf. In [DSII] wird geklärt, daß die ungünstigste Situation jedoch nicht $\mathcal{O}(N)$-mal vorkommt und somit optimale Komplexität erzielt werden kann.

Herr Dr. U. LUTHER studiert zur Zeit u.a. die verschiedenen in der Praxis auftretenden Integraloperatoren um diese in die Implementierung einzuarbeiten. Eine besondere Problematik bereiten dabei die hypersingulären Integraloperatoren, die mittels partieller Integration regularisiert werden sollen.

In seiner Diplomarbeit [HAB] hat Herr Dipl.-Math. H. HARBRECHT die in [S] vorgeschlagene Konstruktion von Multiskalenbasen für 2D Probleme mit einer einfachen Kompressionsstrategie als volldiskretisiertes Galerkin-Verfahren verwirklicht. Dabei hat er schon berechnete Integrale weitestgehend wiederverwendet. Dies belegen auch die Erfahrungen von Herrn Prof. C. SCHWAB und Herrn Dr. C. LAGE (Zürich) sowie Herrn Dr. A. RATHSFELD (Berlin)[RA].

Die Arbeit [DSX] beinhaltet zwar eine vollkommen andere Problematik, zu einer effizienten algorithmischen Auswertung nichtlinearer Funktionen wurden jedoch neuartige Ansätze entwickelt, die sich praktisch auch zur numerischen Integration der singulären Kerne in der Nähe der Singularität eignen könnten.

2.3.3 Teilaufgabe Lösen der diskretisierten Gleichungen auf Parallelrechnern und Postprocessing zur Feldberechnung

Im Zusammenhang mit dem effizienten Lösen der entsprechenden Systeme im Rahmen der Parallelrechentechnik versprechen wir uns wesentliche Vorteile von dem Konzept in [DSI, DSII]. Denn damit gelingt eine weitestmögliche Entkopplung der Teilgebiete und der Nachweis einer asymptotisch optimalen Gebietszerlegungsvorkonditionierung [DSII]. Es bleibt aber noch zu prüfen, ob und in welcher Hinsicht der Zugang in [DSI] dem in [DS1] praktisch überlegen ist.

Hinsichtlich der u. U. sehr aufwendigen Feldberechnung läßt sich die Kompressionsstrategie vermutlich ebenso vorteilhaft einsetzen, wobei wie eingangs schon erwähnt, hier noch wenig erforscht ist.

Literaturverzeichnis zu 2.3/(eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

[BCR] G. Beylkin, R. Coifman and V. Rokhlin, *The fast wavelet transform and numerical algorithms*, Comm. Pure Appl. Math., **44**, (1991), 141-183.

[BPX] J. H. Bramble, J. E. Pasciak and J. Xu., *Parallel multilevel preconditioners*, Mathematics of Computation, **55**, (1990), 1–22.

[BE] S. Bertoluzza, A posteriori error estimates for wavelet Galerkin methods, preprint, Ist. Anal. Numer. Pavia, 935 (1994).

[CTU] C. Canuto, A. Tabacco, K. Urban, The wavelet element method, Preprint Politecnico di Torino 1997.

[CDP] J.M Carnicer, W. Dahmen and J.M. Peña , *decomposition of refinable spaces*, Appl. Comp. Harm. Anal., **3**, (1996), 127–153.

[CF] Z. Ciesielski, T. Figiel, *Spline bases in classical function spaces on compact C^∞ manifolds, part I & II*, Studia Math., **76**, (1983), 1–58, 95–136.

[CDV] A. Cohen, I. Daubechies, P. Vial, *Wavelets on the interval and fast wavelet transforms*, Appl. Comput. Harm. Anal. **1**, (1993), 54–81.

[CDF] A. Cohen, I. Daubechies and J.-C. Feauveau, *Biorthogonal bases of compactly supported wavelets*, Comm. Pure Appl. Math., **45**, (1992), 485–560.

[CM] A. Cohen, and R. Masson, Wavelet methods for second order elliptic problems, preconditioning and adaptivity, Laboratoire d'Analyse Numérique, Université Piere and Marie Curie, Preprint 1997.

[CO] M. Costabel, *Principles of boundary element methods*, Comp. Phys. Reports, **6**, (1987), 243–274.

[CW] M. Costabel and W.L. Wendland *Strongly elliptic boundary integral equations*, J. reine u. angew. Mathematik, **372**, (1986), 34–63.

[DAN] W.Dahmen, *Wavelet- and Multiscale-Methods for Operator Equations*, Acta Numerica, Cambridge University Press, 1997, 55–228.

[DK] W. Dahmen, A. Kunoth, *Multilevel preconditioning*, Numer. Math., **63**, 1992, 315–344.

[DKU] W. Dahmen, A. Kunoth and K. Urban, Biorthogonal spline wavelets on the interval — Stability and moment conditions, Preprint RWTH Aachen 1996 erscheint in *Applied and Computational Harmonic Analysis.*

[DPS1] W. Dahmen, S. Prössdorf and R. Schneider, *Wavelet approximation methods for periodic pseudodifferential equations. Part 1 - Convergence analysis*, Math. Zeitschrift **215**, (1994), 583–620.

[DPS2] W. Dahmen, S. Prössdorf and R. Schneider, *Wavelet approximation methods for periodic pseudodifferential equations. Part 2 - Fast solution and matrix compression*, Advances in Computational Mathematics **1**, (1993), 259–335.

[DPS3] W. Dahmen, S. Prössdorf and R. Schneider, *Multiscale methods for pseudo-differential equations on smooth manifolds*, in: Proceedings of the International Conference on Wavelets: Theory, Algorithms, and Applications, C.K. Chui, L. Montefusco, L. Puccio (eds.), *Wavelet Analysis and Applications*, **5** , Academic Press, (1994), 385–424.

[DS1] W. Dahmen and R. Schneider, Composite wavelet bases for operator equations, Preprint SFB393/96-018, eingereicht bei Math. Comp..

[DS2] W. Dahmen and R. Schneider, Composite wavelet bases for operator equations Preprint SFB393/97-28, (revised version).

[DSI] W. Dahmen and R. Schneider, Wavelets on manifolds I. Construction and domain decomposition, Preprint SFB393/97-030, einereicht bei SIAM J. Math. Anal.

[DSII] W. Dahmen and R. Schneider, Wavelets on manifolds II: Application to Boundary Element Methods and pseudodifferential equations, manuscript.

[DSB] W. Dahmen and R. Schneider, Wavelets with complementary boundary conditions, Function spaces on the cube, IGPM-Report 148, RWTH Aachen, 1998 eingereicht.

[DSX] W. Dahmen, R. Schneider and Y. Xu, Nonlinear functions of wavelet expansions - Adaptive reconstruction and fast evaluation, manuscript.

[D] I. Daubechies, Ten Lecture on Wavelets, *CBMS-NSF Series in Aplied Mathematics*, **61**, SIAM, Philidelphia, 1992.

[HANO] 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.

[HAB] H. Harbrecht, Multiskalenbasierte Matrixkompression für das Galerkin-Verfahren, Diplomarbeit, Uni Karlsruhe 1997.

[ME] Y. Meyer, *Ondelettes et opérateurs 1–2: Ondelettes*, Hermann, Paris, 1990.

[PS1] T. von Petersdorff and C. Schwab, *Wavelet approximation of first kind integral equations in a polygon*, Numer. Math. **74**, (1996), 479 – 516.

[PS2] T. von Petersdorff and C. Schwab, *Fully discretized Multiscale Galerkin BEM*, Multiscale Methods: Wavelet Analysis and Application, Academic Press, 1997.

[PSS] T. von Petersdorff, R. Schneider and C. Schwab, *Multiwavelets for second kind integral equations*, SIAM J. Numer. Anal., **34**, (1997), 2212–2227.

[RA] A. Rathsfeld, A wavelet algorithm for the boundary element solution of the geodetic boundary value problem, Preprint Nr. 225, WIAS Berlin, 1996.

[RO] V. Rokhlin, *Rapid solution of integral equations of classical potential theory*, J. Comp. Phys., **60**, (1985).

[SAT] S. Sauter, Über die effiziente Verwendung des Galerkin-Verfahrens zur Lösung Fredholmscher Integralgleichungen, Doktorarbeit, Kiel 1992.

[S] R. Schneider , *Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur effizienten Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme* Habilitationsschrift, 1995, Advances in Numerical Mathematics, Teubner Stuttgart, 1998.

[SW] W. Sweldens, *The lifting scheme: A custom-design construction of biorthogonal wavelets*, Appl. Comput. Harmon. Anal., **3**, (1996), 186-200.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Multiskalenbasen auf Oberflächen

Seit der Antragstellung konzentrierten sich die Anstrengungen hauptsächlich auf die Entwicklung geeigneter Multiskalenbasen. Die in [DS1, DS2] vorgeschlagenen Konstruktionen sind für die Ordnungen $d = 1, 2$ bereits verwirklicht, und die Ordnung $d = 3$ wird gerade bearbeitet. Es existieren Programme, mit denen man die Basen konstruieren kann, und für Standardfälle soll eine Art Datenbank eingerichtet werden. Einige Beispiele solcher Funktionen sind unten graphisch dargestellt, siehe Abbildungen 2.3 und 2.4.

Es kommt unserer Meinung nach auch darauf an, Ergebnisse und Konstruktionen so vorzubereiten und darzustellen, daß ein nicht unmittelbar mit der Materie vertrauter Wissenschaftler oder Ingenieur mit möglichst wenig Aufwand die Ergebnisse in seinem Kontext verwenden kann. Wir bemühen uns zunehmend, diesem Aspekt Rechnung zu tragen und die Algorithmen und Basisfunktionen einfacher und zugänglicher zu machen.

Die für das Projekt wesentlichen Fortschritte haben wir in jüngster Zeit auf dem Gebiet der Realisierung der in [DS1, DS2] vorgeschlagenen Konstruktion gemacht. Wertvolle Arbeit wurde hier u.a. von Herrn Dipl.-Math. H. HARBRECHT geleistet. Die weiterführenden Konstruktionen, wie sie in [DSB, DSI] vorgeschlagen wurden, sollen sobald als möglich realisiert werden. An dieser Stelle soll die die fruchtbare Zusammenarbeit mit Prof.W. DAHMEN und seinen Mitarbeitern von der RWTH-Aachen einmal besonders hervorgehoben werden, die wesentlich zur Entwicklung der vorliegenden Arbeiten und Ergebnisse beigetragen hat.

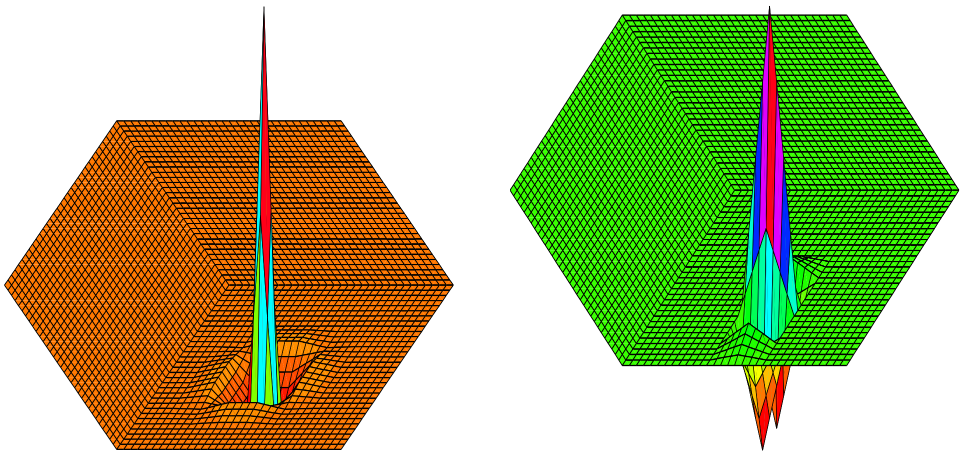

Abbildung 2.3: Wavelets im Innern eines Patches

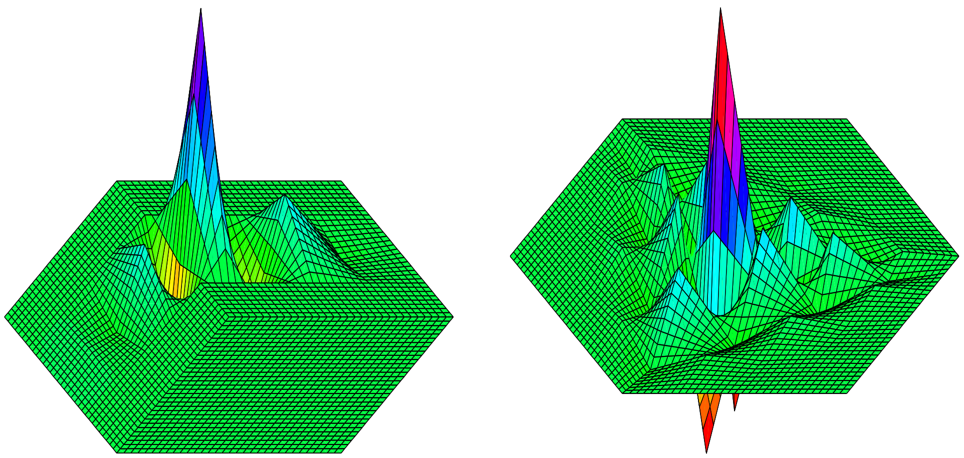

Abbildung 2.4: Wavelets am Übergang zwischen 3 Patches, a) Kante, b) Kofferecke

Nebenbei sollte gesagt werden, daß es in der Praxis oftmals bedeutsamer ist, einen möglichst kleinen Träger der Waveletbasen zu realisieren, als Anforderungen erwachsend aus asymptotischen Abschätzungen zu genügen. Auch für sehr komplexe Gebiete eignet sich die Methodik nach dem augenblicklichen Stand der Entwicklung noch wenig. Hier kann vielleicht ein künstliches Vergröbern, um mehr Skalen zu erhalten, in Zukunft Abhilfe schaffen. Dies sind allerdings Fragen, die hinsichtlich ihrer mathematischen Grundlagen ohne inhaltlichen Gewinn, für die praktische Verwertbarkeit aber von entscheidender Bedeutung sind. Hier ist anhand der vielen bereits existierenden Vorschläge noch eine Menge experimenteller Arbeit zu leisten.

2.4.2 Teilaufgabe Matrixgenerierung

Implementiert sind auf stückweise parametrischen Oberflächen zur Lösung von Randintegralgleichungen mittels Multiskalentechniken bislang biorthogonale Waveletbasen zu stückweise bilinearen Funktionen mit Doppelknoten auf den Rändern der einzelnen Teilgebiete. An der Verwendung der oben vorgeschlagenen Möglichkeiten [DS1, DS2] wird momentan intensiv gearbeitet.

Der zugrundeliegende Programmcode ist objektorientiert aufgebaut in C++ geschrieben. Dabei wird die komprimierte Systemmatrix für den schwachsingulären Kern nach dem Auswerten des Distanzkriteriums direkt generiert. Alle Integrale werden durch geeignete Quadraturformeln gemäß [DSII] ausgewertet. Wesentlichen Anteil an der Entwicklung hatte Herr Dipl.-Math. M. KONIK. Um eine wirkliche Kontrolle der einzelnen Routinen zu gewährleisten und Vergleichsdaten zu generieren, erwies es sich als notwendig, unabhängig von dieser Implementierung ein zweites Programm zu schreiben, das auf einer traditionellen Formulierung der Rand-Element-Methode beruht. Die Vergleichsrechnungen und Testrechnungen sind augenblicklich im Gange, siehe Abb. 2.5 und bezüglich der Kompression Abb. 2.6. Erste Erfahrungen zeigen, daß die numerische Integration bezüglich der Rechenzeiten noch beträchtlich ins Gewicht fällt. Deswegen werden Anstrengungen unternommen, diesen Anteil zu reduzieren.

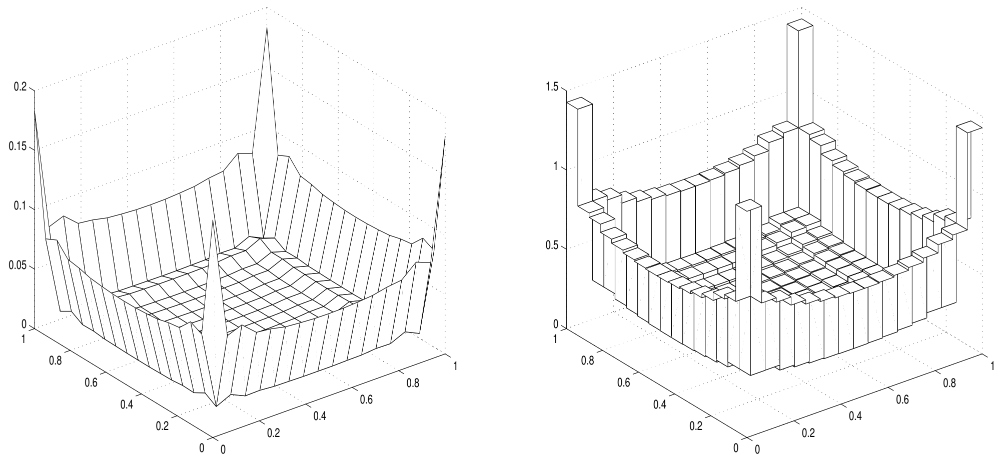

Abbildung 2.5: Lösungen des einfachen Schirmproblemes

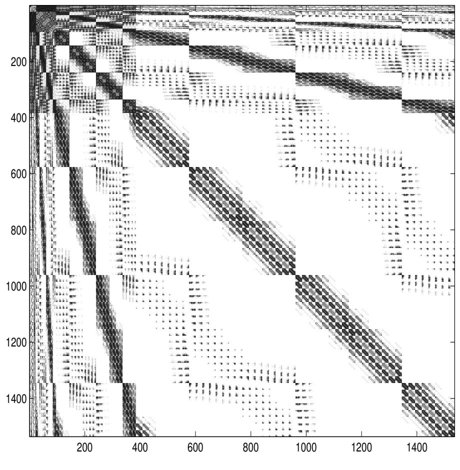

Abbildung 2.6: Besetzungstruktur der Systemmatrix für einen Würfel

Im 2D-Fall wurden von Herrn Dipl.-Math. H. HARBRECHT gute Erfahrungen mit dem Wiederverwerten (Recyclen) schon einmal berechneter Integrale über Teilgebiete gemacht, siehe Tabelle 2.1. Diese Methodik ist auch für die dreidimensionalen Probleme zu berücksichtigen. Die in [S, DSII] vorgeschlagene Kompressionsstrategie wird von ihm gerade verwirklicht. Der zweidimensionale Fall ist zwar wesentlich einfacher, aber die hier gesammelten Erfahrungen sind auch im räumlichen Fall sehr hilfreich.

Doppelschicht klassisch $d = 0$				
M	rel. Fehler	Konvergenz	sec.	%
6	$5.3734 \cdot 10^{-2}$	$--$	0.05	100
7	$9.0068 \cdot 10^{-3}$	5.9659	0.13	100
8	$3.0002 \cdot 10^{-3}$	2.8456	0.75	100
9	$1.0048 \cdot 10^{-4}$	31.500	3.20	100
10	$2.7159 \cdot 10^{-5}$	3.6998	13.1	100
11	$6.7803 \cdot 10^{-6}$	4.0056	57.2	100
Doppelschicht Wavelets ($p = 2$)				
M	rel. Fehler	Konvergenz	sec.	%
6	$5.5148 \cdot 10^{-2}$	$--$	0.09	65
7	$9.3389 \cdot 10^{-3}$	5.9051	0.26	41
8	$3.0234 \cdot 10^{-3}$	3.0889	0.76	25
9	$1.2135 \cdot 10^{-4}$	24.915	1.99	15
10	$2.6059 \cdot 10^{-5}$	4.6566	5.01	7.9
11	$6.5784 \cdot 10^{-6}$	3.9613	12.6	4.4
12	$1.8846 \cdot 10^{-6}$	3.4906	30.8	2.4
13	$3.8212 \cdot 10^{-7}$	4.9319	74.3	1.3

Tabelle 2.1: Vergleich Rechenzeiten des klassischen volldiskreten Galerkin- und des Wavelet-Galerkin-Verfahrens in 2D.

2.4.3 Teilaufgabe Löser und Postprocessing

Als Löser sind im symmetrischen Fall das CG-Verfahren und für unsymmetrische Probleme das GMRES-Verfahren verfügbar. Im 2D-Fall liegen für die Einfachschicht- und Doppeltschichpotentialgleichung aussagekräftige und erfolgversprechende Testrechnungen vor.

Im dreidimensionalen Fall beobachten wir eine starke Abhängigkeit der Konditionszahlen von den Rieszkonstanten der jeweiligen Basisfunktionen. Für erste Rechnungen siehe Tabelle 2.2. Hier liegt hinsichtlich der Basiskonstruktion noch Handlungsbedarf vor, aber auch Verbesserungen der Vorkonditionierung, wie z.B. in [CM] vorgeschlagen, scheinen hier aussichtsreich zu sein.

Im Rahmen der klassischen Verfahren kann bislang auch die Feldberechnung im Innen- oder Außenraum durchgeführt werden (siehe Abb. 2.7). Das klassische

N	ϕ_1	ψ_{13}
256	102.29	30.92
1024	214.67	50.23
4096	440.62	71.87
N	ϕ_2	ψ_{24}
256	915.03	657.88
1024	1438.1	774.18
4096	3017.4	850.58

Tabelle 2.2: Einfachschichtpotential (3D): Vergleich der Konditionszahlen der Steifigkeitsmatrizen in der Einskalenbasis ϕ_1 bzw. ϕ_2 und in der Muliskalenbasis ψ_{13} bzw. ψ_{24} (3 bzw. 4 verschwindende Momente).

Galerkin-Verfahren wird zu Vergleichsrechnungen immer wieder benötigt. Eine eigenständige Implementierung dieses herkömmlichen Verfahrens erwies sich als erforderlich. In dieser Hinsicht hat Herr Dipl-Math. H. HARBRECHT bereits wertvolle Dienste geleistet.

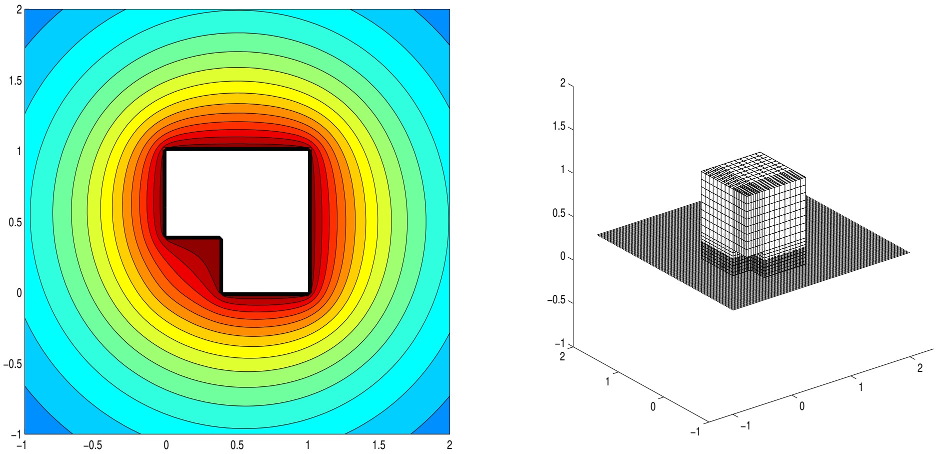

Abbildung 2.7: Feldberechnung in der Umgebung einer Fichera-Ecke

Es folgt die Sammlung neuentstandener Publikationen.

Literaturverzeichnis

[1] Dahmen, W., Kleemann, B., Prössdorf, S., Schneider, R.: Multiscale methods for the solution of the Helmholtz and Laplace equations, in Wendland, W.: *Boundary Element Methods*, Reports from the Final Conference of the Priority Research Programme 1989-1995 of the German Research Foundation, Stuttgart, Springer-Verlag, 1996.

[2] Kleemann, B., Rathsfeld, A., Schneider, R.: Multiscale methods for Boundary Integral Equations and their application to boundary value problems in scattering theory and geodesy, in Hackbusch, Wittum eds., *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, Vol. 54 (Proc. 12th GAMM-Seminar, Kiel) 1996.

[3] Konik, M., Steidl, G., Schneider, R. : Matrix compression by discrete wavelet transforms Eds. Shumaker et al, *Approximation Theory 8*, 1996

[4] von Petersdorff, T., Schneider, R., Schwab, C.: Multiwavelets for second kind integral equations *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 34, 1997, 2212-2227.

[5] Schneider, R. : *Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur effizienten Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme* Habilitationsschrift, 1995, 215 S., Advances in Numerical Mathematics, Teubner Stuttgart,1998.

[6] Schneider, R. : Basiseigenschaften von Wavelets zur Multiskalenauswertung digitaler Signale, *ZPF-Zeitschrift für Photogrammetrie und Fernerkundung* 3, 1996, 75-83.

[7] Schneider, R., Levin, P. L., Spasojevic, M. : Multiscale compression of BEM equations for electrostatic systems, *IEEE Transaction on Dielectrics and Electric Insulation*, 3, 1996, 482-493.

[8] Spasojevic, M., Schneider, R., Levin, P. L. : On the creation of sparse boundary element matrices for two dimensional electrostatic problems using the orthogonal Haar wavelet, *IEEE Transaction on Dielectrics and Electric Insulation*, 4, 1997, 249-258.

[9] Tsay, R., Schneider, R., Wrobel, B. Waveletgestützte Oberflächenrekonstruktion mit dem Verfahren des Facetten-Stereosehens, *ZPF-Zeitschrift für Photogrammetrie und Fernerkundung* 3, 1996, 83-100.

[10] Dahmen, W., Schneider, R.: Composite wavelet bases for operator equations, Preprint SFB393/96-018, eingereicht bei Math. Comp..

[11] Dahmen, W., Schneider, R.: Composite wavelet bases for operator equations, Preprint SFB393/97-28, (revised version).

[12] Dahmen, W., Schneider, R.: Wavelets on manifolds I. Construction and domain decomposition, Preprint SFB393/97-030, eingereicht bei SIAM J. Math. Anal.,

[13] Dahmen, W., Schneider, R.: Wavelets on manifolds II: Application to Boundary Element Methods and pseudodifferential equations, manuscript.

[14] Dahmen W., Schneider R. : Wavelets with complementary boundary conditions, Function spaces on the cube, IGPM-Report 148, RWTH Aachen, 1998 eingereicht.

[15] Dahmen, W., Schneider, R., Xu, Y. : Nonlinear functions of wavelet expansions - Adaptive reconstruction and fast evaluation, manuscript.

[16] Levin, P. L., Spasojevic, M., Schneider, R. : Creation of sparse boundary element matrices for 2-D and axi-symmetric electrostatic problems using the biorthogonal wavelets, Preprint SFB 393/97-29, eingereicht bei IEEE Transaction on Dielectrics and Electric Insulation.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Hinsichtlich der prinzipiellen Fragestellung, ob es möglich ist, eine Randelementdiskretisierung zu gestalten, die asymptotisch gesehen optimale Komplexität $\mathcal{O}(N)$ aufweist, bleiben in diesem Rahmen kaum noch Fragen offen. Dies gilt allerdings nicht für die adaptiven Verfahren, hier ist beispielsweise auch in theoretischer Hinsicht vieles noch offen. Hinsichtlich der praktisch relevanten Fragestellung, wie die Multiskalentechnik konkret am günstigsten realisiert wird, steht die Entwicklung jedoch noch ziemlich am Anfang, dabei kommt beispielsweise die Parallelrechnertechnik den Multiskalenmethoden deutlich entgegen. Wesentliche Herausforderungen für die zukünftige Entwicklung sind z.B.

- einfache Realisierung der Basisfunktionen
- Reduktion der Rechenzeiten zum Aufstellen der Matrix
- Verbesserung der Vorkonditionierung
- stark oszillierende Kerne
- komplexe Oberflächen.

Die Realisierung der verschiedenen Vorschläge, ihr Vergleich und die praktische Weiterentwicklung werden höchstwahrscheinlich noch viel Zeit und Energie kosten. Die begonnene Arbeit soll daher mit der gleichen Intensität in der nächsten Antragsperiode fortgesetzt werden. An neuen Aspekten sollen vor allem die Adaptivität und die Kopplung mit Finiten Elementen bzw. Gebietsdiskretisierungen hinzukommen. Die Thematik dieses Projektes hinterläßt nicht allein im Bereich Rand-Element-Methoden ihre Wirkung, sondern hat darüberhinaus Einfluß auf die Entwicklung von Waveletmethoden für Randwertprobleme partieller Differentialgleichungen, wie dies aktuelle Forschungsaktivitäten sowie die Einrichtung eines von der EU geförderten TMR (Training Mobility and Research) Netzwerkes *Wavelets in Numerical Simulation*, in dem der Antragsteller eingebunden ist, belegen.