Technische Universität Chemnitz-Zwickau

Sonderforschungsbereich 393

Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern

Ulrich Groh

FEM auf irregulären hierarchischen Dreiecksnetzen

Preprint SFB393/97-05

Fakultät für Mathematik
Technische Universität Chemnitz-Zwickau
D-09107 Chemnitz
Germany
e-mail: ugroh@mathematik.tu-chemnitz.de

Preprint-Reihe des Chemnitzer SFB 393

SFB393/97-05 **März 1997**

Summary:

From the viewpoint of the adaptive solution of partial differential equations a finite element method on hierarchical triangular meshes is developed permitting hanging nodes arising from nonuniform hierarchical refinement.

Construction, extension and restriction of the nonuniform hierarchical basis and the accompanying mesh are described by graphs. The corresponding FE basis is generated by hierarchical transformation. The characteristic feature of the generalizable concept is the combination of the conforming hierarchical basis for easily defining and changing the FE space with an accompanying nonconforming FE basis for the easy assembly of a FE equations system. For an elliptic model the conforming FEM problem is solved by an iterative method applied to this nonconforming FEM equations system and modified by projection into the subspace of conforming basis functions. The iterative method used is the Yserentant- or BPX-preconditioned conjugate gradient algorithm.

On a MIMD computer system the parallelization by domain decomposition is easy and efficient to organize both for the generation and solution of the equations system and for the change of basis and mesh.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Zur Berechnung von Näherungslösungen partieller Differentialgleichungen kann der Einsatz adaptive Verfahren wünschenswert sein, wenn Grenzschichten oder Singularitäten der Lösung auftreten, und erst recht, wenn sich diese im Rahmen instationärer Probleme noch mit der Zeit bewegen.

Werden adaptive Verfahren der FEM verwendet, sind zur Anpassung des Netzes an die Lösung solche Techniken der Netzverfeinerung oder -vergröberung weit verbreitet, die die *Regularität des Netzes* bewahren. Dabei wird unter Regularität eines 2D-Netzes verstanden, daß der Durchschnitt nichtdisjunkter Elemente entweder aus einem gemeinsamen Eckknoten oder einer gemeinsamen vollständigen Elementkante besteht bzw. im 3D-Fall aus einem gemeinsamen Eckknoten, einer gemeinsamen vollständigen Elementkante oder -seitenfläche. In der vorliegenden Arbeit sollen allerdings nur Dreiecksnetze betrachtet werden, wobei sich die meisten Überlegungen leicht auf andere Netze übertragen bzw. verallgemeinern lassen. Eine kurze Übersicht über bekannte Verfeinerungstechniken für Dreiecksnetze, mit denen die Netzregularität gewahrt werden kann, findet sich zum Beispiel bei Verfürth [13]. Grenzen jedoch Elemente mit Kanten unterschiedlicher Länge unmittelbar aneinander, gibt es wenigstens einen Eckknoten eines Elementes, der auf dem Rand eines anderen Elementes liegt, ohne dort Eckknoten zu sein. Diese Knoten werden als *irreguläre Knoten* (auch hanging nodes) bezeichnet, Netze mit solchen Knoten entsprechend als *irreguläre Netze*.

Moderne Multilevel-Vorkonditionierungen für die iterative Lösung der FEM-Gleichungssysteme, zum Beispiel die hierarchische Vorkonditionierung nach Yserentant [14], die BPX-Vorkonditionierung [3] oder auch Multigrid-Techniken, sind auf hierarchische Netzstrukturen angewiesen. Für adaptive Verfahren mit derartigen Vorkonditionierern ist deshalb die Nutzung solcher Algorithmen interessant, bei denen die Verfeinerung aller Elemente nach dem gleichen Schema erfolgt und unabhängig von den Nachbarelementen ist, z.B. Dreieck $\rightarrow$ 4 kongruente Dreiecke durch Verbindung der Seitenmittelpunkte, Viereck $\rightarrow$ 4 Vierecke durch Verbindung gegenüberliegender Seitenmittelpunkte, Tetraeder $\rightarrow$ 8 Teiltetraeder. Derartige Verfeinerungstechniken sind bei der Finite-Volumen-Methode bereits seit langem üblich. Die Vorteile bestehen in der Einfachheit, Lokalität und Schnelligkeit der Verfeinerungsalgorithmen sowie der einfachen Rekonstruierbarkeit von Elementen bei Netzvergröberung. Außerdem könnten entsprechende Räume von Ansatzfunktionen bei Netzverfeinerung eine monoton wachsende Folge im Sinne der Mengeneinschließung bilden, eine Eigenschaft, die zumindest für theoretische Untersuchungen nützlich ist, vgl. etwa Oswald [11]. Diese Art von Verfeinerungsalgorithmen führt jedoch zwangsläufig zum Entstehen von irregulären Knoten und wurde deshalb im Rahmen der konformen FEM als selbständige Technik der ungleichmäßigen Verfeinerung zunächst kaum eingesetzt. Multilevel-Löser in der FEM benutzen oft gleichmäßig über einem Grobnetz erzeugte Netzhierarchien oder ungleichmäßige hierarchische Netzstrukturen, bei denen durch zusätzliche Abschließungsoperationen der zunächst durch irreguläre Knoten gestörte reguläre Charakter des Netzes wiederhergestellt wird, vgl. zum Beispiel Leinen [9], Rüde [12]. Die Abschließungsalgorithmen stellen einen zusätzlichen Aufwand dar und tragen globalen Charakter, was bei Parallelverarbeitung zu zusätzlicher Kommunikation führen kann. Ist die Netzabschließung nur temporärer Natur, wird auch die Monotonie der Folge der FE-Räume verletzt.

Der alternative Weg, die irregulären Knoten zu akzeptieren und FEM-Schemata auf irregulären Netzen zu realisieren, findet in der letzten Zeit jedoch zunehmend Interesse. Becker und Rannacher zum Beispiel erlauben in [1], [2] im Zusammenhang mit dort untersuchten adaptiven Techniken einen irregulären Knoten auf der Elementkante, der keinem zusätzlichen Freiheitsgrad der zu berechnenden FEM-Lösung entspricht. Der entsprechende Wert der FEM-Lösung wird aus den beiden regulären Nachbarknoten interpoliert und im Lösungsprozeß ggf. eliminiert. Dies steht auch für das Vorgehen anderer Autoren in älteren Arbeiten.

Die vorliegende Arbeit systematisiert und vertieft ein früheres Konzept des Verfassers [5], [6], welches zunächst auf der Grundlage einschränkender heuristischer Überlegungen entwickelt wurde, jedoch mit detaillierten Ausführungen zu den verwendeten hierarchischen Datenstrukturen, ihrer Verwaltung sowie zu den Algorithmen der Netzänderung versehen ist. Die nachfolgenden Darstellungen verzichten auf solche Einzelheiten der rechentechnischen Implementierung, die aus [5] weitgehend unverändert übertragen werden können. Im Mittelpunkt steht nun die systematische Begründung eines allgemeinen Konzeptes der FEM auf irregulären hierarchischen Netzen derart, daß die von den benutzten Dreieckselementen unabhängigen, wesentlichen Grundzüge klar zutage treten.

Die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit beziehen sich nur auf stationäre Probleme. Als *Modellaufgabe* werde ein lineares elliptisches Problem zweiter Ordnung betrachtet, das als Variationsgleichung in $V = W_2^1(\Omega)$ für ein polygonales Gebiet Ω formuliert und mit den üblichen Voraussetzungen des Lax-Milgram-Lemmas versehen sei

$$\overset{*}{u} \in V : \quad a(\overset{*}{u}, v) = f(v) \quad \forall v \in V . \tag{1}$$

Gegenstand des Abschnittes 2. ist die Definition und Untersuchung ungleichmäßiger hierarchischer Basen, entsprechender FE-Basen und der ihnen zugeordneten FEM-Netze im Kontext der adaptiven FEM für (1). Dabei geht es hier nicht um die adaptive FEM selbst, sondern um eine dafür geeignete Struktur und Technologie des Umbauens der dem FEM-Schema zugrundeliegenden Basen, ihre Eigenschaften und Beschreibung. Gegenstand des Abschnittes 3. ist dann die Technik der FEM für die Modellaufgabe (1) unter Benutzung dieser ungleichmäßigen hierarchischen Basen bis hin zur Auflösung entsprechender FEM-Gleichungssysteme mittels der vorkonditionierten Methode der konjugierten Gradienten. Folgende Aspekte kennzeichnen das Herangehen.

1. Die FE-Räume werden mittels ungleichmäßiger hierarchischer Basen definiert, weil in diesen Basen die lokale Verfeinerung/Vergröberung der diskreten Funktionsdarstellung gut überschaubar ist. Die allgemeine ungleichmäßige hierarchische Basis wird dabei einfach als Teilmenge der gleichmäßigen hierarchischen Basis aufgefaßt.

2. Eine Klasse zulässiger ungleichmäßiger hierarchischer Basen wird festgelegt, innerhalb der ein spezifisch konzipierter Adaptionsprozeß durchgeführt werden kann. In dieser Klasse lassen sich Basiserweiterung bzw. -einschränkung sowie der zugehörige Netzumbau relativ einfach organisieren.

3. Für die Aufstellung des FE-Gleichungssystems ist die hierarchische Basis ungeeignet, weil die zugehörige Steifigkeitsmatrix nicht schwach besetzt ist und deshalb i.a. nicht speicherbar. Die hierarchische Basis wird deshalb in Analogie zum gleichmäßigen Fall in eine FE-Basis mit „weitgehend" schwach besetzter Steifigkeitsmatrix transformiert.

4. Die Basisfunktionen der FE-Basis können nach der Transformation relativ kompliziert aussehen, so daß das Assemblieren des FE-Gleichungssystems problematisch wird. Die Hinzunahme weiterer, in irregulären Knoten unstetiger Basisfunktionen führt auf ein nichtkonformes FEM-Schema, dessen Matrix und rechte Seite mit der üblichen einfachen Assemblierungstechnologie erzeugt werden können.

5. Das Gleichungssystem des nichtkonformen Schemas kann für die Lösung des ursprünglichen FEM-Gleichungssystems benutzt werden, wenn bei der CG-Iteration der Unterraum der konformen Basisfunktionen nicht verlassen wird. In der hierarchischen Basis ist eine Projektion auf den Unterraum besonders einfach.

In einem abschließenden Unterabschnitt wird untersucht, wie sich eine adaptive FEM auf irregulären Dreiecksnetzen unter Verwendung von Residuenfehlerschätzern effektiv parallelisieren läßt, wenn ein MIMD-Parallelrechner mit verteiltem Speicher und Botschaftenaustausch zugrunde gelegt wird.

2 Basen und Adaptivität auf irregulären hierarchischen Netzen

Über diese Arbeit hinausgehendes Ziel sei es, die Modellaufgabe (1) mittels adaptiver Finite-Elemente-Technik numerisch zu lösen, wobei der Einfachheit halber lineare Dreieckselemente zum Einsatz kommen. Wie bereits hervorgehoben, bestehe die Spezifik des Herangehens darin, die benutzten FE-Räume konsequent durch ungleichmäßige hierarchische Basen zu definieren und die zur Erzeugung der FEM-Gleichungssysteme verwendeten FE-Basen aus den hierarchischen Basen durch Transformation zu gewinnen. Die dafür notwendigen technologischen Grundlagen sollen im vorliegenden Abschnitt gelegt werden.

Ein grobes reguläres Netz wird zunächst gleichmäßig hierarchisch verfeinert, die gleichmäßige hierarchische und ihre entsprechende FE-Basis werden eingeführt. Zur Verdeutlichung seiner Struktur wird das gleichmäßige hierarchische Netz mittels Graphen beschrieben, zur Darstellung des Übergangs zwischen hierarchischer und FE-Basis werden elementare Transformationsmatrizen genutzt.

Darauf aufbauend wird die ungleichmäßige hierarchische Basis als Teilmenge der gleichmäßigen hierarchischen Basis definiert, was lokal unterschiedlich feine Darstellungen der FEM-Lösung ermöglicht. Zur effizienten Beschreibung der Basis erfolgt die Definition eines zugehörigen, im allgemeinen irreguläres FEM-Netzes.

Die Vorstellung vom Adaptionsschritt als gesteuerter Basisveränderung in einer zulässigen Menge, die durch die unmittelbaren Nachfolger bzw. Vorgänger der vorhanden Basisfunktionen in der Hierarchie begrenzt wird, führt zur Festlegung der Klasse zulässiger ungleichmäßiger hierarchischer Basen, innerhalb der sich der Basisumbau zur lokalen Verfeinerung oder Vergröberung der Lösungsdarstellung algorithmisch unproblematisch realisieren läßt.

Zum Zweck der Erzeugung eines FEM-Gleichungssystems mit schwach besetzter Systemmatrix erfolgt die Transformation der ungleichmäßigen hierarchischen in eine äquivalente FE-Basis, die jedoch Schwierigkeiten beim Assemblieren bereitet. Eine Basiserweiterung um nichtkonforme Funktionen löst dieses Problem, erfordert dann aber eine FEM-Lösung im Unterraum der konformen Ansatzfunktionen.

2.1 Die Ausgangsbasis auf dem Hauptnetz

Den Ausgangspunkt für die *Konstruktion der hierarchischen Basis* bildet ein reguläres Dreiecksnetz in Ω, das als *Hauptnetz* bezeichnet werde. $\mathcal{E}_0$ sei die Menge seiner Elemente, die zunächst als 3-Knoten-Dreiecke betrachtet werden und eine Zerlegung von Ω bilden, $\mathcal{N}_0$ sei die Menge der Eckknoten dieser Dreiecke. Dabei wird eine Menge von Elementen als Zerlegung von Ω bezeichnet, wenn die Elemente hinsichtlich ihrer inneren Knoten paarweise disjunkt sind und ihre Vereinigung die Abschließung $\overline{\Omega}$ ergibt. Die als Elementseiten benutzten geraden Verbindungen von Knoten mögen im weiteren auch Kanten heißen, $\mathcal{K}_0$ bezeichne die Menge der Kanten des Hauptnetzes. Das Hauptnetz wird somit durch folgende Gesamtheit von Elementen, Kanten und Knoten dargestellt, auch *Hauptelemente,* *Hauptkanten* und *Hauptknoten* genannt,

$$\mathcal{E}_0\,,\ \mathcal{K}_0\,,\ \mathcal{N}_0\,.$$

Jedem Knoten $i \in \mathcal{N}_0$ des Hauptnetzes wird dann eine stetige, stückweise lineare Basisfunktion $\hat{\theta}_i^0 : \overline{\Omega} \to \mathbf{R}^1$ zugeordnet, eine der üblichen Hütchenfunktionen, die die Vereinigung der den Knoten i umgebenden Elemente aus $\mathcal{E}_0$ als Träger besitzt und in Knoten i den Wert 1 annimmt. In Randknoten von Ω sind es entsprechende abgeschnittene Hütchenfunktionen.

Das Hauptnetz mit seiner Basis $\{\, \hat{\theta}_i^0 \mid i \in \mathcal{N}_0 \,\}$ repräsentiert bei allen Basis- und zugeordneten Netzveränderungen den *stationären Netzanteil*, Verfeinerungen werden vom Hauptnetz aus hierarchisch durchgeführt, Vergröberungen können nicht weiter als bis zum Level des Hauptnetzes gehen. Die auf das Hauptnetz aufgesetzten, lokal möglicherweise in unterschiedlichem Umfang erzeugten Hierarchielevel bilden den *dynamischen Netzanteil*, der adaptiv gesteuert werden kann.

Das Hauptnetz selbst werde mittels eines geeigneten Generators für reguläre Netze erzeugt. Bei der Übernahme und Anpassung der Datenstrukturen dieses Netzes für die adaptive Netzgenerierung sollte die Möglichkeit offengehalten werden, ggf. bereits vorhandene hierarchische Strukturen des Hauptnetzes zumindest für die Vorkonditionierung des Gleichungssystems mit in die neuen Datenstrukturen zu übernehmen bei Beibehaltung des stationären Charakters des Hauptnetzes.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird davon ausgegangen, daß mit dem Hauptnetz eine hinreichend genaue Geometrieerfassung des Problemgebietes erfolgt, das Gebiet also i.a. polygonal berandet ist.

Bei Nutzung eines MIMD-Parallelrechners und Daten-Parallelisierung durch Gebietszerlegung eignen sich die Elemente des Hauptnetzes, wenn hinreichend viele vorhanden sind, auch als Portionen für die Lastverteilung, d.h. als Migrationseinheiten für entsprechende Lastausgleichalgorithmen, deren jeweiliges Gewicht für Hauptspeicherauslastung und Aufwand an Rechenoperationen sich relativ schnell feststellen läßt.

2.2 Hierarchische und FE-Basis auf dem gleichmäßigen hierarchischen Netz

Zunächst werde die bei gleichmäßiger hierarchischer Verfeinerung entstehende Basis definiert – als Spezial- und in gewissem Sinne Maximalfall der nachfolgend betrachteten ungleichmäßigen hierarchischen Basen.

Die *reguläre Verfeinerung eines Dreieckselementes* sei die Zerlegung des Dreiecks in vier kongruente Teildreiecke durch geradlinige Verbindung seiner drei Seitenmittelpunkte. Im weiteren sollen Dreieckselemente nur regulär verfeinert werden.

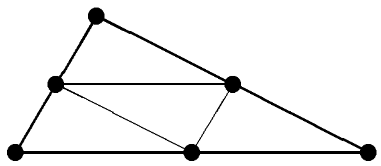

Abbildung 1: Reguläre Verfeinerung eines Dreieckselementes

Die reguläre Verfeinerung sämtlicher Elemente des Netzes heiße *gleichmäßige Verfeinerung*, die k-malige Ausführung der gleichmäßigen Verfeinerung in Folge heiße *gleichmäßige hierarchische Verfeinerung um k Level.* Bei gleichmäßiger hierarchischer Verfeinerung des Hauptnetzes um k Level sei $\mathcal{E}_k$ die Menge der beim letzten gleichmäßigen Verfeinerungsschritt entstandenen Elemente, wiederum eine Zerlegung von Ω. $\mathcal{K}_k$ bezeichne die Menge der Kanten, welche die Seiten dieser Elemente bilden, und $\mathcal{N}_k$ die Menge der bei der letzten gleichmäßigen Verfeinerung neu hinzugekommenen Knoten, also die Menge der Mittelpunkte der Kanten aus $\mathcal{K}_{k-1}$. Entsprechend seien $\mathcal{E}^{(J)}$, $\mathcal{K}^{(J)}$, $\mathcal{N}^{(J)}$ die Mengen aller bis zum Level J erzeugten Elemente, Kanten und Knoten, also

$$\mathcal{E}^{(J)} \;=\; \bigcup_{k=0}^{J} \mathcal{E}_k\,, \qquad \mathcal{K}^{(J)} \;=\; \bigcup_{k=0}^{J} \mathcal{K}_k\,, \qquad \mathcal{N}^{(J)} \;=\; \bigcup_{k=0}^{J} \mathcal{N}_k\,.$$

Diese Gesamtheit von $\mathcal{E}^{(J)}$, $\mathcal{K}^{(J)}$, $\mathcal{N}^{(J)}$ heiße auch *gleichmäßiges hierarchisches Netz vom Level J*, kurz *Netz vom Level J*, und $\mathcal{E}_J$ die Menge seiner *aktuellen Elemente.* Das Netz enthält somit die Stationen seiner hierarchischen Erzeugung, ausgehend vom Hauptnetz als Level 0.

Alle bei der regulären Verfeinerung durch Verbinden der Kantenmitten entstehenden neuen Kanten werden gemeinsam mit den Hauptkanten *Wurzelkanten* genannt. Das Aussehen des Netzes ist vollständig durch die Wurzelkanten beschreibbar, alle weiteren Kanten sind nur Teilkanten der Wurzelkanten.

Ist κ die eineindeutige Abbildung, die jeder Kante ihren Mittelknoten zuordnet, so gilt offenbar

$$\kappa(\mathcal{K}_k) = \mathcal{N}_{k+1}, \qquad \kappa(\mathcal{K}^{(k)}) = \mathcal{N}^{(k+1)} \setminus \mathcal{N}_0, \qquad k = 0(1)J,$$

nur die Hauptknoten aus $\mathcal{N}_0$ entsprechen keinen Kanten. Im Sinne dieser Abbildung können Kante und Mittelknoten auch identifiziert werden.

Bemerkung: Bei Verwendung von linearen 3-Knoten-Elementen werden die Kanten des Netzes vom Level J mit den Knoten aus $\mathcal{N}_{J+1}$ identifiziert, diese gehören jedoch nicht zu Menge $\mathcal{N}^{(J)}$ der Netzknoten. Es ist sinnvoll, diese Kantenmittelknoten bereits in der Datenstruktur des Netzes vom Level J mitzuführen, so daß die aktuellen Elemente praktisch wie 6-Knoten-Dreiecke behandelt werden und die Knoten aus $\mathcal{N}_{J+1}$ bei Bedarf verfügbar sind. Dieser Vorgriff auf das nächste Level $J+1$ ohne explizite zugehörige Elementverfeinerung erweist sich sowohl bei der Organisation der weiteren Netzverfeinerung als auch bei der Nutzung hierarchischer Fehlerschätzer als nützlich.

Auch auf dem Netz jedes Levels k wird jedem Knoten $i \in \mathcal{N}^{(k)}$ eine stetige, stückweise lineare Hütchenfunktion $\hat{\theta}_i^k : \overline{\Omega} \to \mathbf{R}^1$ zugeordnet, die im Knoten i den Wert 1 annimmt und deren Träger die Elemente von $\mathcal{E}_k$ bilden, die den Knoten i umgeben, entsprechende abgeschnittene Hütchenfunktionen sind es am Rand von Ω. Dann werden auf dem Netz vom Level J zwei Basen unterschieden, die den gleichen FE-Raum aufspannen:

Gleichmäßige hierarchische Basis des Levels J heiße die Menge

$$\{\, \hat{\theta}_i^k \,|\, i \in \mathcal{N}_k,\ k = 0(1)J \,\} \tag{2}$$

und *gleichmäßige FE-Basis des Levels J* die Menge

$$\{\, \hat{\theta}_i^J \,|\, i \in \mathcal{N}_k,\ k = 0(1)J \,\} \;=\; \{\, \hat{\theta}_i^J \,|\, i \in \mathcal{N}^{(J)} \,\}. \tag{3}$$

2.3 Verfeinerungs- und Transformationsgraphen

Die Erzeugung des Netzes vom Level J durch hierarchische Verfeinerung des Hauptnetzes kann mittels gerichteter Graphen beschrieben werden, separat für Elemente, Kanten und Knoten. Diese Graphen veranschaulichen die Struktur der hierarchischen Netzverfeinerung und dienen dem besseren Verständnis ungleichmäßiger hierarchischer Basen und Netze sowie von deren Umbau (Verfeinerung und Vergröberung). Als Eckenmengen der Graphen fungieren die Mengen aller Elemente $\mathcal{E}^{(J)}$, aller Kanten $\mathcal{K}^{(J)}$ und aller Knoten $\mathcal{N}^{(J)}$ des Netzes vom Level J, die Bogenmengen $B_{\mathcal{E}}^J$, $B_{\mathcal{K}}^J$ und $B_{\mathcal{N}}^J$ werden über die Wirkung der regulären Verfeinerung erklärt, also über die erzeugten Nachfolgermengen. Das gleichmäßige hierarchische Netz vom Level J ist dann hinsichtlich seiner Struktur noch präziser zu definieren als Gesamtheit der drei nachfolgend angegebenen Verfeinerungsgraphen $G_{\mathcal{E}}^J$, $G_{\mathcal{K}}^J$, $G_{\mathcal{N}}^J$.

Bemerkungen: 1. Die Bezeichnungen *Knoten* und *Kante* sollen im weiteren immer für die geometrischen Objekte des Netzes und nicht alternativ für *Ecke* und *Bogen* als Grundbestandteile der Graphen benutzt werden.
2. Die Graphen interessieren im Zusammenhang mit der FEM als konkrete Graphen, es wird nicht von der Natur der Ecken und Bögen abstrahiert im Sinne abstrakter Graphen als Äquivalenzklassen isomorpher konkreter Graphen.

2.3.1 Elemente-Verfeinerungsgraph

Dieser gerichtete Graph beschreibe die Erzeugung der Elemente des Netzes vom Level J durch gleichmäßige hierarchische Verfeinerung aller Hauptelemente mittels des Musters der regulären Verfeinerung.

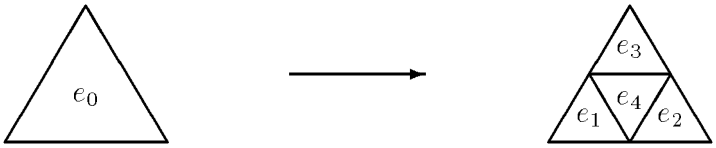

Abbildung 2: Element-Verfeinerung, $e_0 \in \mathcal{E}_k$ erzeugt $e_1, \ldots, e_4 \in \mathcal{E}_{k+1}$

Definition: *Elemente-Verfeinerungsgraph des Netzes vom Level J* heiße der gerichtete Graph $G_{\mathcal{E}}^J = (\mathcal{E}^{(J)}, B_{\mathcal{E}}^J)$ mit $B_{\mathcal{E}}^J \subset \mathcal{E}^{(J)} \times \mathcal{E}^{(J)}$ und

$$(e_0, e_1) \in B_{\mathcal{E}}^J \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{array}{l} e_1 \text{ ist eines der vier Teilelemente} \\ \text{bei regulärer Verfeinerung von } e_0. \end{array}$$

Genauer gilt

$$B_{\mathcal{E}}^J \subset \bigcup_{k=1}^{J} \mathcal{E}_{k-1} \times \mathcal{E}_k \,.$$

$G_{\mathcal{E}}^J$ stellt einen Wald von Wurzelbäumen dar, wobei $\mathcal{E}_0$ die Menge aller Wurzeln bildet. Aus jedem Hauptelement als Wurzel erwächst somit ein Baum von Elementen, wobei alle Elemente aus $\mathcal{E}_k$ den Abstand k von ihrer jeweiligen Wurzel besitzen und die Elemente aus $\mathcal{E}_J$, d.h. die aktuellen Elemente, die Blätter der Bäume sind.

Für die spätere Umkehrung der Element-Verfeinerung, die Vergröberung, ist die datenmäßige Rekonstruierbarkeit jedes Vaterelementes e_0 aus seinen vier Sohnelementen $e_1, \ldots, e_4$ notwendig. Dazu ist unter den Sohnelementen eine Ordnung zu definieren, etwa wie in Abb. 2, die sich an der Beschreibung des Vaterelementes orientiert und eine eindeutige Positionierung des Sohnes bezüglich seines Vaters liefert. Es entstehen dann geordnete Wurzelbäume.

2.3.2 Kanten-Verfeinerungsgraph

Dieser gerichtete Graph beschreibe die Erzeugung der Kanten des Netzes vom Level J durch gleichmäßige hierarchische Verfeinerung aller Hauptelemente, ohne für das Entstehen neuer Wurzelkanten Zusammenhänge aufzuzeigen. Somit wirke nur folgendes Verfeinerungsmuster, wobei auf den Kanten auch die durch κ zugeordneten Mittelknoten eingetragen sind.

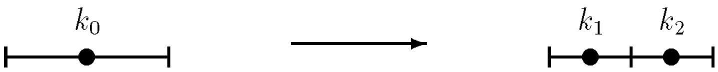

Abbildung 3: Kanten-Verfeinerung, $k_0 \in \mathcal{K}_k$ erzeugt $k_1, k_2 \in \mathcal{K}_{k+1}$

Definition: *Kanten-Verfeinerungsgraph des Netzes vom Level J* heiße der gerichtete Graph $G_{\mathcal{K}}^J = (\mathcal{K}^{(J)}, B_{\mathcal{K}}^J)$ mit $B_{\mathcal{K}}^J \subset \mathcal{K}^{(J)} \times \mathcal{K}^{(J)}$ und

$$(k_0, k_1) \in B_{\mathcal{K}}^J \quad \Longleftrightarrow \quad k_1 \text{ ist eine der beiden Teilkanten bei Halbierung von } k_0.$$

Hier gilt analog

$$B_{\mathcal{K}}^{J} \subset \bigcup_{k=1}^{J} \mathcal{K}_{k-1} \times \mathcal{K}_{k} \,.$$

Auch $G_{\mathcal{K}}^{J}$ stellt einen Wald von Wurzelbäumen dar. Wurzeln sind jedoch nicht nur die Hauptkanten aus $\mathcal{K}_0$, sondern alle Kanten, die bereits früher als Wurzelkanten bezeichnet wurden, also auch immer diejenigen drei Kanten, die bei der regulären Verfeinerung eines Dreieckselementes in dessen Innerem neu entstehen. Die Kanten aus $\mathcal{K}_J$ bilden die Blätter der Bäume. Jeder der Kanten-Wurzelbäume kann als Binärbaum betrachtet werden, indem auf der jeweiligen Wurzelkante eine Ordnung definiert wird, etwa in der Art: sei die linke Seite der Wurzelkante diejenige mit der kleineren Nummer des Endknotens.

2.3.3 Knoten-Verfeinerungsgraph

Dieser gerichtete Graph beschreibe die Erzeugung der Knoten des Netzes vom Level J durch gleichmäßige hierarchische Verfeinerung aller Hauptelemente. Gleichzeitig kann damit die systematische Erzeugung der den Knoten zugeordneten hierarchischen Basisfunktionen erklärt werden. Nachfolgendes Verfeinerungsmuster beschreibt, welche neuen unmittelbaren Nachbarn eines Knotens bei regulärer Verfeinerung aller ihn umgebenden Elemente entstehen. Dabei ist die Verfeinerung der Elemente selbst nicht mit dargestellt.

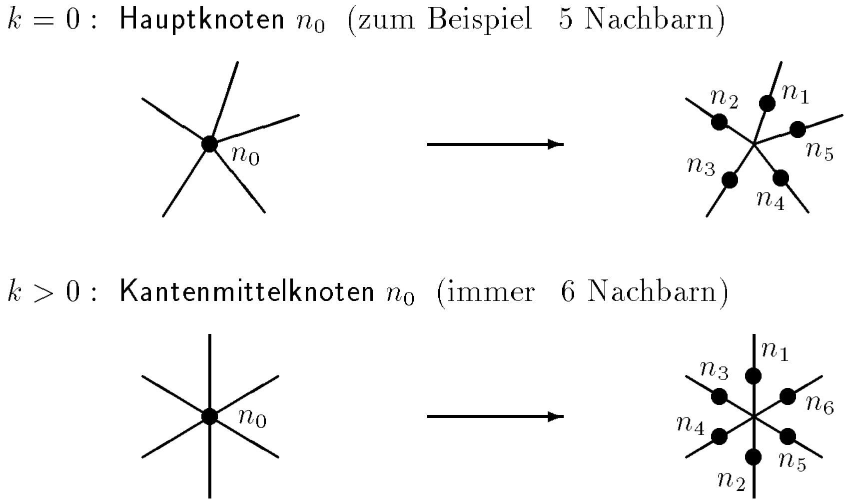

Abbildung 4: Knoten-Verfeinerung, $n_0 \in \mathcal{N}_k$ erzeugt $n_1, n_2, \ldots \in \mathcal{N}_{k+1}$

Definition: *Knoten-Verfeinerungsgraph des Netzes vom Level J* heiße der gerichtete Graph $G_{\mathcal{N}}^J = (\mathcal{N}^{(J)}, B_{\mathcal{N}}^J)$ mit $B_{\mathcal{N}}^J \subset \mathcal{N}^{(J)} \times \mathcal{N}^{(J)}$ und

$(n_0, n_1) \in B_{\mathcal{N}}^J \quad \Longleftrightarrow$ *Entweder* n_0 ist Hauptknoten und n_1 ist Mittelknoten einer von n_0 ausgehenden Hauptelementkante, *oder* n_0 ist Kantenmittelknoten eines Elementes und n_1 ist Mittelknoten einer von n_0 ausgehenden Teilelementkante, die bei regulärer Verfeinerung dieses Elementes entsteht.

Da $n_0 \in \mathcal{N}_k$ für irgendein k sein muß, so ist n_1 Kantenmittelknoten einer der von n_0 ausgehenden Kanten aus $\mathcal{K}_k$, d.h. $n_1 \in \mathcal{N}_{k+1}$, wobei notwendigerweise $k < J$ gilt, so daß auch hier folgt

$$B_{\mathcal{N}}^J \subset \bigcup_{k=1}^{J} \mathcal{N}_{k-1} \times \mathcal{N}_k \,.$$

Der gerichtete Graph $G_{\mathcal{N}}^J$ mit $J > 0$ besteht im Falle eines zusammenhängenden Hauptnetzes nur aus einer einzigen zusammenhängenden Komponente, die Zyklen enthält und deshalb keine Baumstruktur bildet.

$G_{\mathcal{K}}^J$ kann als Untergraph von $G_{\mathcal{N}}^{J+1}$ betrachtet werden. Sei nämlich

$$\kappa : \mathcal{K}^{(J)} \longrightarrow \mathcal{N}^{(J+1)}$$

die bereits benutzte eineindeutige Abbildung, die jeder Kante ihren Mittelknoten zuordnet, und

$$\underline{\kappa} : B_{\mathcal{K}}^J \longrightarrow B_{\mathcal{N}}^{J+1} \quad \text{mit} \quad \underline{\kappa}\left((k_0, k_1)\right) = (\kappa(k_0), \kappa(k_1))\,.$$

$\underline{\kappa}$ ordnet dem Bogen zwischen Kante und durch Halbierung entstandener Teilkante den Bogen zwischen den zugehörigen Kantenmittelknoten zu, ein Teilfall der Knotenverfeinerung (vgl. Abb. 3, 4). Dann definiert $(\kappa, \underline{\kappa})$ einen Isomorphismus von $G_{\mathcal{K}}^J$ zu einem echten Untergraphen von $G_{\mathcal{N}}^{J+1}$. Dieser Untergraph unterscheidet sich vom Knoten-Verfeinerungsgraphen $G_{\mathcal{N}}^{J+1}$ wie folgt. In der Eckenmenge $\kappa\left(\mathcal{K}^{(J)}\right)$ des Untergraphen fehlen gegenüber $\mathcal{N}^{(J+1)}$ die Hauptknoten, in der Bogenmenge $\underline{\kappa}\left(B_{\mathcal{K}}^J\right)$ fehlen gegenüber $B_{\mathcal{N}}^{J+1}$ die Bögen von den Endknoten zu den Mittelknoten der Wurzelkanten.

2.3.4 Transformationsgraph

Im nächsten Abschnitt soll die Transformation der hierarchischen Basis (2) in die FE-Basis (3) dargestellt werden. Dabei werden systematisch mit wachsendem $k = 1(1)J$ die den Kantenmittelknoten $j \in \mathcal{N}_k$ zugeordneten hierarchischen Basisfunktionen $\hat{\theta}_j^k$ benutzt, um (anteilig) die den jeweiligen Kantenendknoten $i, l \in \mathcal{N}^{(k-1)}$ zugeordneten Funktionen $\hat{\theta}_i^{k-1}$, $\hat{\theta}_l^{k-1}$ um ein Level nach oben in $\hat{\theta}_i^k$, $\hat{\theta}_l^k$ zu transformieren. Die Beziehungen zwischen den Knoten der transformierten und der transformierenden Funktionen werden in nachfolgendem gerichteten Graphen widergespiegelt, wobei das Level k des Kantenmittelknotens jeweils das Levelpaar $(k-1, k)$ der Transformation festlegt.

Definition: *Transformationsgraph des Netzes vom Level J* heiße der gerichtete Graph $\hat{G}^J_{\mathcal{N}} = (\mathcal{N}^{(J)}, \hat{B}^J_{\mathcal{N}})$ mit $\hat{B}^J_{\mathcal{N}} \subset \mathcal{N}^{(J)} \times \mathcal{N}^{(J)}$ und

$$(n_0, n_1) \in \hat{B}^J_{\mathcal{N}} \quad \Longleftrightarrow \quad n_0 \text{ ist Endknoten einer Kante, deren Mittelknoten } n_1 \text{ ist.}$$

Entsprechend folgt hier

$$\hat{B}^J_{\mathcal{N}} \subset \bigcup_{k=1}^{J} \mathcal{N}^{(k-1)} \times \mathcal{N}_k \,.$$

Wird der Betrachtungsstandpunkt von j zum Knoten i der transformierten Funktion gewechselt, so ist speziell für $i \in \mathcal{N}_{k-1}$ die Menge seiner Nachfolger im Knoten-Verfeinerungsgraphen $G^J_{\mathcal{N}}$ genau die Menge der Knoten $j \in \mathcal{N}_k$, deren hierarchischen Basisfunktionen $\hat{\theta}^k_j$ zur Transformation der hierarchischen Basisfunktion $\hat{\theta}^{k-1}_i$ in $\hat{\theta}^k_i$ benutzt werden, *der Knoten-Verfeinerungsgraph $G^J_{\mathcal{N}}$ ist also ein Untergraph des Transformationsgraphen $\hat{G}^J_{\mathcal{N}}$.* Zusammengefaßt gilt

$$G^J_{\mathcal{K}} \subset G^{J+1}_{\mathcal{N}} \subset \hat{G}^{J+1}_{\mathcal{N}} \,. \tag{4}$$

$G^J_{\mathcal{N}}$ ist ein echter Untergraph von $\hat{G}^J_{\mathcal{N}}$, weil im Knoten-Verfeinerungsgraphen $G^J_{\mathcal{N}}$ nur die Mittelknoten der Wurzelkanten wie in $\hat{G}^J_{\mathcal{N}}$ beide Endknoten als Vorgänger besitzen, alle anderen Knoten mit Ausnahme der Hauptknoten besitzen in $G^J_{\mathcal{N}}$ als Vorgänger genau den einen Endknoten, der ihrem Vater im Kanten-Verfeinerungsgraphen entspricht. Der Transformationsgraph kann aus dem Knoten-Verfeinerungsgraphen erzeugt werden, indem bei den Knoten mit nur einem Vorgänger ein zweiter Vorgänger eingetragen wird, d.h. der entsprechende Bogen findet Aufnahme in die Bogenmenge. Dieser zweite Vorgänger des Knotens ist nach dem Schema der Kantenverfeinerung derjenige Vorgänger des ersten Vorgängers („Großvater"), der hinsichtlich der Ordnung auf der Wurzelkante auf der gleichen Seite des ersten Vorgängers gelegen ist wie der Knoten selbst.

Die beiden Vorgänger, die alle Knoten mit Ausnahme der Hauptknoten in $\hat{G}^J_{\mathcal{N}}$ besitzen, mögen wie bei den Baumstrukturen *Väter* genannt werde, wobei als *erster Vater* immer der Vater im Sinne des Kantenbaumes und als *zweiter Vater* der oben betrachtete zweite Vorgänger bezeichnet werden, soweit es sich nicht um die Väter eines Wurzelkanten-Mittelknotens handelt.

Zur Verdeutlichung der Graphen $G^J_{\mathcal{K}}$, $G^{J+1}_{\mathcal{N}}$, $\hat{G}^{J+1}_{\mathcal{N}}$ ist in Abb. 5 die anteilige Struktur der drei Graphen auf einer beliebigen Wurzelkante dargestellt, auf der bereits drei weitere Kantenlevels existieren.

Die dicken Pfeile gehören dem isomorphen Abbild eines Kantenbinärbaumes mit der Wurzel (dem Wurzelkanten-Mittelknoten) N und die beiden gestrichelten Pfeile beziehen als zusätzliche Bögen des Knoten-Verfeinerungsgraphen den linken (VL) und rechten (VR) Wurzelkanten-Endknoten als Vorgänger mit ein. Die dünnen Pfeile sind die für den Transformationsgraphen noch hinzukommenden Bögen von den auf der gleichen Seite gelegenen „Großvätern", etwa zum linken Sohn SL von N der Bogen vom linken Vorgänger VL von N und analog der Bogen von VR zu SR usw.

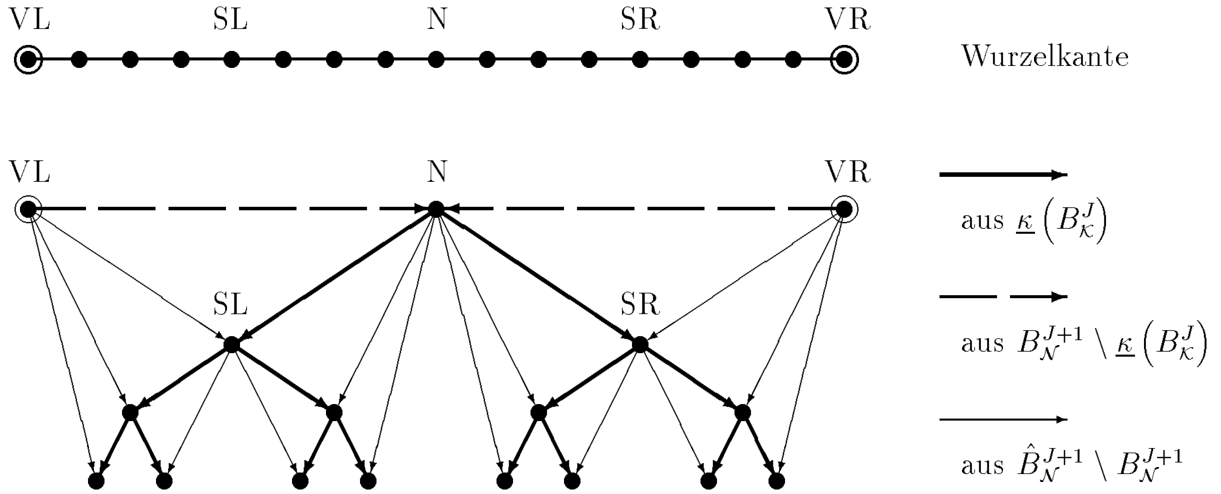

Abbildung 5: Anteile der Graphen $G_{\mathcal{K}}^J, G_{\mathcal{N}}^{J+1}$ und $\hat{G}_{\mathcal{N}}^{J+1}$ auf einer Wurzelkante

2.3.5 Unendliche Verfeinerungs- und Transformationsgraphen

Der Gesamtprozeß der Erzeugung gleichmäßiger hierarchischer Netze mit wachsendem Level J und die Gesamtheit der hierarchischen Transformationen können durch entsprechende unendliche Graphen $G_{\mathcal{E}}$, $G_{\mathcal{K}}$, $G_{\mathcal{N}}$, $\hat{G}_{\mathcal{N}}$ beschrieben werden, die alle jeweiligen Verfeinerungs- bzw. Transformationsgraphen umfassen

$$G_{\mathcal{E}} = \left(\bigcup_{J=1}^{\infty} \mathcal{E}^{(J)}, \bigcup_{J=1}^{\infty} B_{\mathcal{E}}^J \right), \qquad G_{\mathcal{K}} = \left(\bigcup_{J=1}^{\infty} \mathcal{K}^{(J)}, \bigcup_{J=1}^{\infty} B_{\mathcal{K}}^J \right),$$

$$G_{\mathcal{N}} = \left(\bigcup_{J=1}^{\infty} \mathcal{N}^{(J)}, \bigcup_{J=1}^{\infty} B_{\mathcal{N}}^J \right), \qquad \hat{G}_{\mathcal{N}} = \left(\bigcup_{J=1}^{\infty} \mathcal{N}^{(J)}, \bigcup_{J=1}^{\infty} \hat{B}_{\mathcal{N}}^J \right).$$

Es überträgt sich die Untergraphenbeziehung

$$G_{\mathcal{K}} \subset G_{\mathcal{N}} \subset \hat{G}_{\mathcal{N}}. \tag{5}$$

2.4 Elementare hierarchische Basistransformationen

Die gleichmäßige hierarchische Basis und die gleichmäßige FE-Basis des Levels J spannen den gleichen Finite-Elemente-Raum auf. Die Transformation der einen Basis in die andere läßt sich mittels elementarer Transformationsmatrizen ausführen. Da diese Matrizen auch bei der späteren Untersuchung der ungleichmäßigen hierarchischen Basen eine große Rolle spielen, werden ihre Eigenschaften zunächst kurz dargestellt.

Es sei R^N der N-dimensionale euklidische Raum, und seien die $\underline{e}_i \in \mathsf{R}^N$, $i = 1(1)N$, die Vektoren seiner kanonischen Basis, d.h. sie unterscheiden sich vom Nullvektor durch eine Eins in Zeile i. Sei weiterhin $I \in \mathsf{R}^{N \times N}$ die Einheitsmatrix.

Definition: *Elementare Transformationsmatrix* heiße jede Matrix $T \in \mathbf{R}^{N\times N}$ mit

$$T \;=\; I + c\,\underline{e}_i\,\underline{e}_j^\top, \qquad c \in \mathbf{R}^1,\ i \neq j.$$

T unterscheidet sich von der Einheitsmatrix nur durch das Element c in der Spalte j von Zeile i, die Einheitsmatrix ist ein Spezialfall.

Eigenschaften:

1. *Die Matrix T ist regulär, wobei $T^{-1} \;=\; I - c\,\underline{e}_i\,\underline{e}_j^\top \;=\; 2I - T$. Somit ist T^{-1} wieder elementare Transformationsmatrix. Entsprechendes gilt auch für die transponierte Matrix $T^\top \;=\; I + c\,\underline{e}_j\,\underline{e}_i^\top$.*

2. *Zwei elementare Transformationsmatrizen $S \;=\; I + c\,\underline{e}_i\,\underline{e}_j^\top$, $T \;=\; I + d\,\underline{e}_k\,\underline{e}_l^\top$ sind vertauschbar ($ST = TS$) genau dann, wenn wenigstens eine der folgenden drei Bedingungen gilt:*

   a) $cd = 0$ (d.h. mindestens eine von S, T ist die Einheitsmatrix),

   b) $i = k$ *und* $j = l$ (d.h. ein Unterschied besteht höchstens in den Faktoren c, d),

   c) $i \neq l$ *und* $j \neq k$ (die wesentliche Bedingung).

Beweis:

Die Eigenschaften sind elementar nachzuweisen unter Verwendung einer auf der Hand liegenden Eigenschaft dyadischer Produkte:

$$\text{für } \underline{u},\ \underline{v},\ \underline{x},\ \underline{y} \in \mathbf{R}^N \text{ gilt immer:} \qquad (\underline{u}\,\underline{v}^\top)\,(\underline{x}\,\underline{y}^\top) \;=\; (\underline{v}^\top\underline{x})\,(\underline{u}\,\underline{y}^\top).$$

Zum Beispiel folgt *2.* unmittelbar aus

$$\begin{aligned} ST - TS &= cd\,(\underline{e}_i\,\underline{e}_j^\top\,\underline{e}_k\,\underline{e}_l^\top - \underline{e}_k\,\underline{e}_l^\top\,\underline{e}_i\,\underline{e}_j^\top) \\ &= cd\,((\underline{e}_j^\top\,\underline{e}_k)\,\underline{e}_i\,\underline{e}_l^\top - (\underline{e}_l^\top\,\underline{e}_i)\underline{e}_k\,\underline{e}_j^\top). \end{aligned}$$

Für die Untersuchung der Basen auf hierarchischen Netzen werden spezielle Transformationsmatrizen benötigt. Seien die Knoten des gleichmäßigen hierarchischen Netzes vom Level J nach wachsendem Knotenlevel und innerhalb der Levels beliebig, aber fest numeriert, N sei die Knotenanzahl. Ist $i \in \mathcal{N}^{(J)} \setminus \mathcal{N}_0$, so seien $V1 = V1(i), V2 = V2(i)$ die Väter von i im Transformationsgraphen $\hat{G}^J_{\mathcal{N}}$.

Definition: *Elementare hierarchische Transformationsmatrizen des Knotens* $i \in \mathcal{N}^{(J)} \setminus \mathcal{N}_0$ heißen die folgenden Matrizen T_i, $T_i^{(V1)}$, $T_i^{(V2)} \in \mathbf{R}^{N\times N}$

$$T_i \;=\; I - \tfrac{1}{2}\,\underline{e}_i\,(\underline{e}_{V1}^\top + \underline{e}_{V2}^\top), \qquad T_i^{(Vj)} \;=\; I - \tfrac{1}{2}\,\underline{e}_i\,\underline{e}_{Vj}^\top, \quad j = 1, 2, \tag{6}$$

für $i \in \mathcal{N}_0$ seien $T_i = T_i^{(V1)} = T_i^{(V2)} = I$.

Somit unterscheidet sich die T_i aus (6) von der Einheitsmatrix nur durch die Elemente $-\frac{1}{2}$ in den Spalten $V1, V2$ von Zeile i. Nachfolgende Eigenschaften sind wie die obigen elementar.

Eigenschaften:

1. *T_i ist in die elementaren Transformationsmatrizen $T_i^{(V1)}$, $T_i^{(V2)}$ faktorisierbar:*
$$T_i \;=\; T_i^{(V1)}\, T_i^{(V2)} \;=\; T_i^{(V2)}\, T_i^{(V1)} \;=\; T_i^{(V1)} \,+\, T_i^{(V2)} \,-\, I,$$
2. *Die Matrix T_i ist regulär, wobei $T_i^{-1} = I + \frac{1}{2}\,\underline{e}_i\,(\underline{e}_{V1}^\top + \underline{e}_{V2}^\top) \;=\; 2I - T_i$.*
3. *Zwei elementare hierarchische Transformationsmatrizen $T_i \;=\; I - \frac{1}{2}\,\underline{e}_i\,(\underline{e}_{V1(i)}^\top + \underline{e}_{V2(i)}^\top)$, $T_j \;=\; I - \frac{1}{2}\,\underline{e}_j\,(\underline{e}_{V1(j)}^\top + \underline{e}_{V2(j)}^\top)$ mit $i \neq j$ sind vertauschbar ($T_i\,T_j = T_j\,T_i$) genau dann, wenn*
$$i \neq V1(j), V2(j) \quad \textit{und} \quad j \neq V1(i), V2(i) \tag{7}$$
(wenn also keine „Vater–Sohn–Beziehung“ zwischen i und j besteht).

Bemerkung:

1. Gehören die Knoten i, j in Eigenschaft *3.* dem gleichen Level an, so folgt sofort die Vertauschbarkeit von T_i, T_j. Gehören sie unterschiedlichen Levels an, kann höchstens eine der in Bedingung (7) negierten Teilaussagen zutreffen. Tritt keiner dieser vier Fälle ein, folgt auch die Vertauschbarkeit von T_i, T_j.
2. Analoge Eigenschaften von T_i^{-1}, $T_i^\top = I - \frac{1}{2}\,(\underline{e}_{V1} + \underline{e}_{V2})\,\underline{e}_i^\top)$, $T_i^{-\top}$ sind offensichtlich.

Im Hinblick auf die Darstellung von Basistransformationen werden *Basen im weiteren immer als Zeilenvektoren* verstanden, in denen die Basisfunktionen entsprechend der Reihenfolge ihrer zugeordneten Knoten levelweise aufsteigend geordnet sind. Transformationen werden dann als formale Multiplikationen von rechts mit einer entsprechenden Matrix ausgeführt.

Werde insbesondere mit $\hat{\theta}^k_{\mathcal{N}_j}$ der Teilvektor der Funktionen der FE-Basis des Levels k in den Knoten des Levels j bezeichnet, wobei $j \leq k$,
$$\hat{\theta}^k_{\mathcal{N}_j} \;=\; (\hat{\theta}^k_l \,|\, l \in \mathcal{N}_j),$$
so lassen sich mittels der elementaren hierarchischen Transformationsmatrizen zunächst die bekannten Transformationen zwischen Basisfunktionen benachbarter Levels darstellen, und zwar wie folgt:
$$(\hat{\theta}^{k-1}_{\mathcal{N}_0} \,\ldots\, \hat{\theta}^{k-1}_{\mathcal{N}_{k-1}}\, \hat{\theta}^k_{\mathcal{N}_k} \,\ldots\, \hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}) \;=\; (\hat{\theta}^k_{\mathcal{N}_0} \,\ldots\, \hat{\theta}^k_{\mathcal{N}_k}\, \hat{\theta}^{k+1}_{\mathcal{N}_{k+1}} \,\ldots\, \hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}) \prod_{i \in \mathcal{N}_k} T_i\,, \qquad k = 1(1)J. \tag{8}$$
Die Darstellung ist korrekt, da die T_i für $i \in \mathcal{N}_k$ alle miteinander vertauschbar sind. Die sukzessive Anwendung obiger Transformation mit $k = 1(1)J$ liefert schließlich die Transformation der gleichmäßigen hierarchischen Basis in die gleichmäßige FE-Basis des Levels J:
$$(\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_0}\, \hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_1} \,\ldots\, \hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}) \;=\; (\hat{\theta}^0_{\mathcal{N}_0}\, \hat{\theta}^1_{\mathcal{N}_1} \,\ldots\, \hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}) \left(\prod_{i \in \mathcal{N}_1} T_i\right) \cdots \left(\prod_{i \in \mathcal{N}_J} T_i\right). \tag{9}$$

Für die algorithmische Realisierung der hierarchischen Transformation (9) ist es wegen der Vertauschbarkeitseigenschaft *3.* der Matrizen T_i nicht notwendig, die elementaren hierarchischen Transformationen nach Levels geordnet und vom unteren zum oberen Level hin auszuführen. Es reicht aus, wenn die zu den Vätern eines Knotens gehörenden Transformationen vor der zum Knoten selbst gehörenden Transformation erfolgen. Diese Bedingung an die Indexreihenfolge werde symbolisch als $V(i) \prec i$ dargestellt. Durchläuft bei Produkten die Knotennummer i eine Indexmenge, so bedeute $V(i) \prec i$, daß die Faktoren der Vaterknoten $V1(i), V2(i)$, soweit selbige überhaupt zur Indexmenge gehören, links vom Faktor des Knotens i stehen müssen. Entsprechend bedeute $i \prec V(i)$ eine umgekehrte Reihenfolge. Die hierarchische Transformation (9) kann damit allgemeiner wie folgt beschrieben werden:

$$(\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_0}\, \hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_1}\, \ldots\, \hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}) \quad = \quad (\hat{\theta}^0_{\mathcal{N}_0}\, \hat{\theta}^1_{\mathcal{N}_1}\, \ldots\, \hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}) \prod_{\substack{i \in \mathcal{N}^{(J)} \\ V(i) \prec i}} T_i\,. \tag{10}$$

Bemerkung: Erfüllt der Index i beim Durchlaufen einer Knotenmenge $A \subset \mathcal{N}^{(J)}$ die Bedingung $V(i) \prec i$, so ist dies äquivalent zur Berücksichtigung folgender Relation $i \prec j$ in A im Sinne von „i kommt vor j".

$$i \prec j \qquad \Longleftrightarrow \qquad i \neq j \text{ und in } \hat{G}_{\mathcal{N}}[A] \text{ führt ein gerichteter Weg von } i \text{ zu } j.$$

Diese Relation ist irreflexiv, asymmetrisch und transitiv und definiert eine teilweise Ordnung in A, die beim Durchlauf beachtet wird. $i \prec V(i)$ entspricht der Teilordnung bei Umkehr der Wegrichtungen.

2.5 Ungleichmäßige hierarchische Basen und deren Netze

2.5.1 Ungleichmäßige hierarchische Basis

Im Fall regulärer Dreiecksnetze wird üblicherweise die FE-Basis zur Festlegung des FEM-Schemas für ein Variationsproblem benutzt. Sie besteht durchgängig aus Funktionen mit kleinem Träger (Durchmesser $O(h)$), die einfach beschreibbar sind. Das FEM-Gleichungssystem wird daher unter Benutzung der FE-Basis erzeugt und besitzt eine schwach besetzte Steifigkeitsmatrix. Die hierarchische Basis wird erst im Zusammenhang mit effektiven Multilevel-Vorkonditionierern eingeführt, so daß beide Basen den gleichen FE-Raum aufspannen. Die Steifigkeitsmatrix des FEM-Schemas in der hierarchischen Basis ist auch für große Knotenzahlen gut konditioniert, aber nicht schwach besetzt und deshalb zumeist nicht speicherbar.

Bei ungleichmäßiger hierarchischer Verfeinerung ist die direkte Festlegung einer FE-Basis wegen der irregulären Knoten problematisch, vor allem auch im Hinblick auf eine effektive Assemblierung. Eine für die konforme FEM geeignete ungleichmäßige hierarchische Basis läßt sich als Teilmenge der gleichmäßigen hierarchischen Basis jedoch relativ einfach definieren. Auch Basisänderungen zur Verfeinerung oder Vergröberung der diskreten Lösungsdarstellung lassen sich durch Hinzu- oder Wegnahme hierarchischer Funktionen leicht realisieren. Für die Festlegung und Veränderung des FE-Raumes im Rahmen irregulärer hierarchischer Netze ist somit die ungleichmäßige hierarchische Basis besser geeignet als eine entsprechende FE-Basis.

Mit Blick auf den FE-Adaptionsprozeß werden deshalb nachfolgend die ungleichmäßige hierarchische Basis und ein zugehöriges Netz definiert und untersucht. Es bleibt jedoch das Besetztheitsproblem der entsprechenden Steifigkeitsmatrix und damit die Notwendigkeit des Überganges von der ungleichmäßigen hierarchischen zu einer geeigneten FE-Basis mit schwach besetzter Steifigkeitsmatrix durch geeignete Transformation analog zu (10), worauf später eingegangen wird.

Definition: Sei $\mathcal{M}_{(a)}$ eine Knotenmenge mit $\mathcal{N}_0 \subset \mathcal{M}_{(a)} \subset \mathcal{N}^{(J)}$, $J > 0$, und $\mathcal{N}_J \cap \mathcal{M}_{(a)} \neq 0$. Dann heiße die Menge linear unabhängiger Funktionen

$$\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)}) = \{\, \hat{\theta}_i^k \mid i \in \mathcal{N}_k \cap \mathcal{M}_{(a)}\,,\ k = 0(1)J \,\} \tag{11}$$

die zur Knotenmenge $\mathcal{M}_{(a)}$ *gehörende hierarchische Basis*, auch allgemein bezeichnet als *ungleichmäßige hierarchische Basis* (mit der gleichmäßigen hierarchischen Basis als Spezialfall $\mathcal{M}_{(a)} = \mathcal{N}^{(J)}$). Ihr maximales Level ist gleich J. Die Knoten der Menge $\mathcal{M}_{(a)}$ werden die *aktiven Knoten* genannt.

Somit wird eine ungleichmäßige hierarchische Basis als Teilmenge der gleichmäßigen hierarchischen Basis des Levels J eindeutig beschrieben durch Vorgabe ihrer Menge $\mathcal{M}_{(a)}$ aktiver Knoten. Die Basis $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ ist per definitionem endlich und enthält immer die Ausgangsbasis auf dem Hauptnetz. Im Zusammenhang mit der ungleichmäßigen hierarchischen Basis finden die folgenden Teilmengen aktiver Knoten im weiteren häufig Verwendung

$$\mathcal{M}_{k,a} = \mathcal{N}_k \cap \mathcal{M}_{(a)}\,, \qquad \mathcal{M}_a^{(k)} = \mathcal{N}^{(k)} \cap \mathcal{M}_{(a)} = \bigcup_{l=0}^{k} \mathcal{M}_{l,a}\,, \qquad k = 0(1)J.$$

2.5.2 Ungleichmäßiges hierarchisches Netz

Der nachfolgende Begriff des ungleichmäßigen hierarchischen Netzes soll nicht allein das geometrische Objekt widerspiegeln, auf dessen Grundlage die bezüglich des Elementtyps vorbestimmte FE-Basis dann konkret festgelegt wird, sondern im weiteren Sinne die Informationsstruktur, die zur Beschreibung und Veränderung einer bereits vor dem Netz gegebenen ungleichmäßigen hierarchischen Basis nötig ist, wobei verschiedene Basen durchaus das gleiche Netz haben können. Das Netz muß daher einerseits geometrische Informationen in elementorientierter Darstellung bereitstellen, die für die Assemblierung des FEM-Gleichungssystems und ggf. die Visualisierung der FEM-Lösung benötigt werden, andererseits Strukturinformationen über die Hierarchien, die für lokale Veränderungen der Basis (Erweiterungen oder Einschränkungen) und hierarchiebezogene Vorkonditionierungen verschiedener Art notwendig sind.

Das in diesem Sinne erforderliche Netz sollte aus Speicherplatzgründen möglichst wenig Redundanz enthalten, wird also in der Regel nicht das gleichmäßige hierarchische Netz des Levels J sein, sondern ein Netz mit ungleichmäßigen Hierarchien, das mittels regulärer Verfeinerung gleichzeitig mit der Basis erzeugt wird. Es muß die Beschreibung jeder Basisfunktion $\hat{\theta}_i^k$ aus (11) ermöglichen, nicht notwendig aber weiterer Funktionen der gleichmäßigen hierarchischen Basis vom Level J. Unter der *Beschreibung von* $\hat{\theta}_i^k$ werde hier die Angabe einer Menge von Elementen verstanden, die zusammen genau den Träger von $\hat{\theta}_i^k$ bilden. Für jeden aktiven Knoten $i \in \mathcal{M}_{k,a}$ heißt das, daß die ihn unmittelbar umgebenden Elemente aus $\mathcal{E}_k$ im Netz verfügbar sein müssen bzw. erzeugbar aus im Netz verfügbaren Nachfolgerelementen im weiteren Sinn. Für $k = 0$ ist das immer der Fall und für $k > 0$ genau dann, wenn die beiden Elemente aus $\mathcal{E}_{k-1}$, die an der Kante aus $\mathcal{K}_{k-1}$ mit dem Mittelpunkt i anliegen (bzw. bei Randkante nur ein Element), auch regulär verfeinert sind. Bei Umkehr des Betrachtungsstandpunktes ergibt sich das folgende

Elementverfeinerungsprinzip:
Ein Element aus $\mathcal{E}_{k-1}$ muß regulär verfeinert sein genau dann, wenn außer möglicherweise aktiven Eckknoten, die somit zu $\mathcal{M}_a^{(k-1)}$ gehören, wenigstens ein weiterer aktiver Knoten, der dann nur aus $\mathcal{M}_{(a)} \setminus \mathcal{M}_a^{(k-1)}$ sein kann, auf dem Rand oder im Inneren des Elementes liegt.

Mittels dieses Prinzips kann schrittweise eine Zerlegung von Ω erzeugt werden, die zur Beschreibung aller Funktionen der ungleichmäßigen hierarchischen Basis (11) geeignet ist. Ausgangspunkt sei die Zerlegung $\mathcal{E}_0^* = \mathcal{E}_0$ des Hauptnetzes. Für $k = 1(1)J$ werden rekursiv folgende Mengen definiert (die Elemente e sind als abgeschlossen zu betrachten), wobei $\Gamma_{\mathcal{E}}^+(A)$ die Nachfolgermenge einer Menge A von Elementen im Graphen $G_{\mathcal{E}}$ bezeichne,

$$\begin{aligned} E_{k-1} &= \{\, e \in \mathcal{E}_{k-1}^* \mid e \cap (\mathcal{M}_{(a)} \setminus \mathcal{M}_a^{(k-1)}) = \emptyset \,\}\,, \\ \mathcal{E}_k^* &= \Gamma_{\mathcal{E}}^+(\mathcal{E}_{k-1}^* \setminus E_{k-1})\,. \end{aligned}$$

Wegen $\mathcal{M}_a^{(J)} = \mathcal{M}_{(a)}$ liefert analoge Erklärung $E_J = \mathcal{E}_J^*$, es gilt $E_k \subset \mathcal{E}_k^* \subset \mathcal{E}_k$, $k = 0(1)J$. Seien außerdem $E^{(-1)} = \emptyset$ und $E^{(k)} = E^{(k-1)} \cup E_k$, $k = 0(1)J$, also

$$E^{(k)} = \bigcup_{l=0}^{k} E_l\,.$$

Die Mengen $E^{(k)} \cup \mathcal{E}_{k+1}^*$ stellen Zerlegungen von Ω dar. Zunächst ist $E^{(-1)} \cup \mathcal{E}_0^* = \mathcal{E}_0$ Zerlegung von Ω, und wenn $E^{(k-1)} \cup \mathcal{E}_k^* = E^{(k)} \cup (\mathcal{E}_k^* \setminus E_k)$ Zerlegung von Ω ist, so folgt das auch für $E^{(k)} \cup \mathcal{E}_{k+1}^* = E^{(k)} \cup \Gamma_{\mathcal{E}}^+(\mathcal{E}_k^* \setminus E_k)$, es werden nur Elemente durch ihre vier Söhne ersetzt.

Mit der Zerlegung $E^{(-1)} \cup \mathcal{E}_0^*$ sind alle Funktionen $\hat{\theta}_i^0$ beschreibbar, $i \in \mathcal{M}_{0,a} = \mathcal{N}_0$. Sei mittels der Zerlegung $E^{(k-1)} \cup \mathcal{E}_k^*$ die Beschreibung aller Funktionen aus der Menge $\{\, \hat{\theta}_i^l \mid i \in \mathcal{M}_{l,a}\,,\, l = 0(1)k \,\}$ möglich. Dafür ist auch $E^{(k)} \cup \mathcal{E}_{k+1}^*$ geeignet, es müssen dann nur die Elemente von $\mathcal{E}_k^* \setminus E_k$ aus ihren Söhnen zusammengesetzt werden. Mittels $E^{(k)} \cup \mathcal{E}_{k+1}^*$ sind jedoch auch die Funktionen $\hat{\theta}_i^{k+1}$ mit $i \in \mathcal{M}_{k+1,a}$ beschreibbar, somit also alle Funktionen aus $\{\, \hat{\theta}_i^l \mid i \in \mathcal{M}_{l,a}\,,\, l = 0(1)k+1 \,\}$. Die Aussage für $\mathcal{M}_{k+1,a}$ ergibt sich, weil zunächst aus der Definition der E_l folgt, daß Knoten aus $\mathcal{M}_{k+1,a}$ bezüglich der Zerlegung $E^{(k-1)} \cup \mathcal{E}_k^* = E^{(k)} \cup (\mathcal{E}_k^* \setminus E_k)$ nur auf den Elementen aus $\mathcal{E}_k^* \setminus E_k \subset \mathcal{E}_k$ liegen können, notwendigerweise als Kantenmittelknoten. Nach dem Elementverfeinerungsprinzip gewährleistet dann der Übergang von $\mathcal{E}_k^* \setminus E_k$ zu $\mathcal{E}_{k+1}^*$ die Beschreibbarkeit der $\hat{\theta}_i^{k+1}$, $i \in \mathcal{M}_{k+1,a}$. Somit folgt induktiv: *Die Funktionen der ungleichmäßigen hierarchischen Basis (11) können mittels der Zerlegung $E^{(J-1)} \cup \mathcal{E}_J^* = E^{(J)}$ von Ω beschrieben werden.*

Definition: Es seien

$$\mathcal{E} = \bigcup_{k=0}^{J} \mathcal{E}_k^* , \qquad E = E^{(J)} = \bigcup_{k=0}^{J} E_k ,$$

$\mathcal{K}$ die Menge aller Kanten der Elemente aus $\mathcal{E}$ und $\mathcal{M}$ die Menge aller Eckknoten der Elemente aus E. Dann heiße die Gesamtheit der induzierten gerichteten Graphen

$$G_{\mathcal{E}}[\mathcal{E}] , \quad G_{\mathcal{K}}[\mathcal{K}] , \quad G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}]$$

das zur aktiven Knotenmenge $\mathcal{M}_{(a)}$ bzw. zur Basis (11) gehörende hierarchische Netz, auch kurz bezeichnet als *ungleichmäßiges hierarchisches Netz.* $\mathcal{M}$ heiße die *Menge seiner Knoten* und die Elemente aus der Zerlegung E von Ω heißen seine *aktuellen Elemente.* $\hat{G}_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}]$ werde als der *zum Netz gehörende Transformationsgraph* bezeichnet.
(Die schon früher eingeführten Indizes ε, κ, $\mathcal{N}$ an den Bezeichnungen der Graphen verweisen nur auf Elemente, Kanten und Knoten als die Natur der Ecken der Graphen und haben insbesondere nichts mit entsprechend bezeichneten Mengen zu tun.)

Bemerkungen: 1. Die Menge $\mathcal{M}$ enthält zu jedem Knoten i auch dessen beide Väter in $\hat{G}_{\mathcal{N}}$, außer zu den Hauptknoten, die keine Väter besitzen. Das folgt aus der Definition des Netzes, da jeder Knoten aus $\mathcal{M}_k\,, k > 0$, durch reguläre Verfeinerung eines Elementes $e \in \mathcal{E}_{k-1}^* \setminus E_{k-1}$ zum Eckknoten eines Elementes aus $\mathcal{E}_k^*$ wird, wobei seine beiden Väter bereits Eckknoten von e darstellen. Eckknoten bleiben bei weiteren Verfeinerungen immer Eckknoten und gehören schließlich zu $\mathcal{M}$. Somit besitzen in dem zum Netz gehörenden Transformationsgraphen $\hat{G}_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}]$ alle Knoten mit Ausnahme der Hauptknoten auch *zwei Väter.*
2. Zur Menge $\mathcal{M}$ der Eckknoten aktueller Elemente gehören auch solche, die gleichzeitig Kantenmittelknoten anderer aktueller Elemente und somit irreguläre Netzknoten darstellen. Die Menge der übrigen Kantenmittelknoten von Elementen aus E, also derjenigen, die nicht gleichzeitig auch Eckknoten von Elementen aus E sind, werde mit $\Delta\widetilde{\mathcal{M}}$ bezeichnet. $\widetilde{\mathcal{M}} = \mathcal{M} \cup \Delta\widetilde{\mathcal{M}}$ ist dann die Menge aller Eck- und Kantenmittelknoten aktueller Elemente. Die Menge $\widetilde{\mathcal{M}}$ repräsentiert die Kanten des Netzes zuzüglich der Hauptknoten, $\widetilde{\mathcal{M}} = \kappa(\mathcal{K}) \cup \mathcal{N}_0$, da sämtliche Netzknoten des Levels $k > 0$ genau durch die reguläre Verfeinerung der Elemente von $\mathcal{E}_{k-1}^* \setminus E_{k-1}$ als deren Kantenmittelknoten zu späteren Netzknoten werden, wozu dann mit $\Delta\widetilde{\mathcal{M}}$ noch die nicht erfaßten Kantenmittelknoten aktueller Elemente kommen. Die Grapheninklusionen (4), (5) übertragen sich in der Gestalt

$$G_{\mathcal{K}}[\mathcal{K}] \subset G_{\mathcal{N}}[\widetilde{\mathcal{M}}] \subset \hat{G}_{\mathcal{N}}[\widetilde{\mathcal{M}}] . \tag{12}$$

Bei der praktischen Realisierung des Netzes und des Transformationsgraphen ist es effektiv, die drei Graphen $G_{\mathcal{K}}[\mathcal{K}]$, $G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}]$, $\hat{G}_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}]$ auf der Grundlage einer $\hat{G}_{\mathcal{N}}[\widetilde{\mathcal{M}}]$ entsprechenden *gemeinsamen Datenstruktur* zu implementieren und dafür auch immer die Verfügbarkeit der Knoten aus $\Delta\widetilde{\mathcal{M}}$ vorauszusetzen. Die Elemente werden deshalb im weiteren als 6-Knoten-Dreiecke aufgefaßt, vgl. auch die entsprechende Bemerkung zum gleichmäßigen hierarchischen Netz in 2.2.

Jeder Knoten aus $\mathcal{M}_{k+1,a}$ tritt durch die Verfeinerung aller Elemente aus $\mathcal{E}_k^* \setminus E_k$ nur noch als Eckknoten der ihn umgebenden Elemente vom Level $k{+}1$ aus der Zerlegung $E^{(k)} \cup \mathcal{E}_{k+1}^*$ auf, nicht mehr als Kantenmittelknoten. Auch bei weiteren Verfeinerungen bleibt er immer

Eckknoten der ihn umgebenden Elemente. *Somit können alle Knoten von $\mathcal{M}_{(a)}$ bezüglich der Elemente der Zerlegung E von Ω nur Eckknoten darstellen, und zwar von Elementen mindestens des gleichen Levels.* Insbesondere folgt $\mathcal{M}_{(a)} \subset \mathcal{M}$. Im weiteren werden die Knoten aus $\mathcal{M}_{(p)} = \mathcal{M} \setminus \mathcal{M}_{(a)}$ als *passive Netzknoten* bezeichnet und in Analogie die folgenden Mengen eingeführt, auch auf dem Level $J+1$ wegen obiger Bemerkung,

$$\mathcal{M}_{k,p} = \mathcal{N}_k \cap \mathcal{M}_{(p)}\,, \qquad \mathcal{M}_p^{(k)} = \mathcal{N}^{(k)} \cap \mathcal{M}_{(p)} = \bigcup_{l=0}^{k} \mathcal{M}_{l,p}\,,$$

$$\mathcal{M}_k = \mathcal{N}_k \cap \mathcal{M}\,, \qquad \mathcal{M}^{(k)} = \mathcal{N}^{(k)} \cap \mathcal{M} = \bigcup_{l=0}^{k} \mathcal{M}_l\,, \qquad k = 0(1)J+1.$$

Der Zusammenhang zwischen aktiven/passiven Knoten einerseits und regulären/irregulären Knoten andererseits ist der folgende. *Aktive Knoten sind immer regulär,* da entsprechend dem Elementverfeinerungsprinzip *beide* an der zugeordneten Kante anliegenden Elemente gleichen Levels verfeinert werden, falls es sich nicht sowieso um eine Randkante handelt. Umgekehrt müssen dann *irreguläre Knoten immer passiv* sein. Es kann jedoch auch passive reguläre Knoten geben, zufällig entstanden durch Verfeinerung der Elemente beiderseits einer Kante, wobei die aktiven Knoten als Verfeinerungsursache auf anderen Kanten liegen. Aus diesem Grunde ist das ungleichmäßige hierarchische Netz durch die Basis bzw. $\mathcal{M}_{(a)}$ zwar eindeutig bestimmt, aber nicht eineindeutig. Wird etwa ein passiver regulärer Knoten in einen aktiven gewandelt, ändert sich zwar die Basis, nicht jedoch das Netz.

Das Netz des kleinen Beispiels in Abb. 6 wird durch die Menge $\mathcal{M}_{(a)}$ erzeugt, die aus den unnumerierten Hauptknoten sowie den beiden aktiven Knoten 1,2 vom Level 1 besteht. Dieses Netz enthält außerdem sieben passive Knoten: den regulären inneren Knoten 3, die regulären Randknoten 4,5,6 und 7 sowie die beiden irregulären inneren Knoten 8 und 9. Die Wandlung der Knoten 3 bis 7 in aktive würde das zugehörige Netz nicht ändern, die Wandlung von Knoten 8 oder 9 würde jedoch eine Verfeinerung des jeweils links vom Knoten liegenden Hauptelementes erfordern.

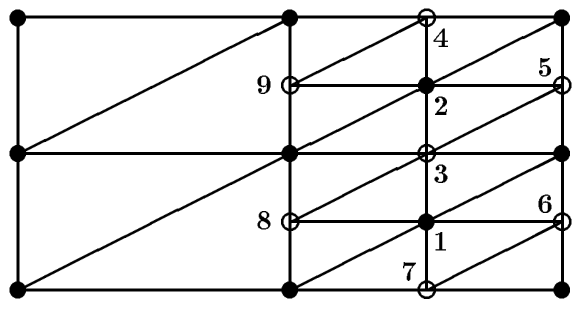

Abbildung 6: Aktive $\bullet$ und passive $\circ$ Knoten eines Netzes

2.6 Ein Konzept der Adaptivität

2.6.1 Vorstellung vom FEM-Adaptionsalgorithmus

Die adaptive FEM für das Modellproblem (1) soll durch folgende Merkmale charakterisiert sein, die zum Teil noch weiter spezifiziert werden.

• Jeder Adaptionsschritt werde als *gesteuerte Basisänderung in einer von der aktuellen Basis abhängigen zulässigen Menge von Basen und anschließende Lösung des FEM-Gleichungssystems in der neuen Basis* verstanden. Diese zulässige Menge von Basen muß geeignet definiert werden. Einerseits ist zu sichern, daß potentiell jedes Element des Raumes V im Rahmen endlich vieler Basisänderungen mit vorgegebener Genauigkeit approximiert und in diesem Sinn der gesamte Raum V ausgeschöpft werden kann. Andererseits darf die zulässige Menge für den einzelnen Schritt insgesamt nur eine endliche Menge von möglichen Basisfunktionen in sich vereinen, da für eine Auswahlentscheidung im Rahmen der Steuerung nur endlich viele Informationen verarbeitbar sind.

• Bei Benutzung ungleichmäßiger hierarchischer Basen zur Festlegung der FE-Räume ist es möglich, die lokale Verfeinerung oder Vergröberung der Lösungsdarstellung besonders einfach als reine Hinzu- oder Wegnahme von Basisfunktionen ohne Veränderung der vorhandenen Basisfunktionen zu realisieren, d.h. als Basiserweiterung oder -einschränkung. Bei entsprechenden FE-Basen, die zur Assemblierung schwach besetzter Matrizen führen, ändern sich vorhandene Basisfunktionen bei Hinzu- oder Wegnahme von Basisfunktionen. *Die FE-Räume sowie deren Veränderung werden* deshalb *mittels ungleichmäßiger hierarchischer Basen beschrieben, Assemblierung und Lösung der FEM-Gleichungssysteme nutzen zugehörige FE-Basen.*

• *Basiserweiterung und Basiseinschränkung sind getrennte elementare Teilschritte des Basisumbaus.* Diese Trennung empfiehlt sich zum einen aus technologischer Sicht und zum anderen, um Überlagerungseffekten bei der Fehlersteuerung aus dem Wege zu gehen. Dabei kann auch bei stationären Problemen die Basiseinschränkung als Aktion im Adaptionsprozeß sinnvoll sein: An Levelgrenzen sind zusätzliche Approximationsfehler möglich, vgl. die Beispiele in [5], die wiederum Verfeinerungen nach sich ziehen. Handelt es sich um zeitweilige, weil sich verschiebende Levelgrenzen, so sollte es ermöglicht werden, die unnötigen Verfeinerungen rückgängig zu machen.

• Das ungleichmäßige hierarchische Netz wird als Informationsstruktur zur Beschreibung der Basis benutzt und ist in jedem Adaptionsschritt entsprechend der Basis zu verändern. Damit sich dieser Netzumbau algorithmisch möglichst einfach realisieren läßt, *werden als zulässige Basisänderungen im Adaptionsschritt nur solche in Betracht gezogen, die die Netzstrukturen lokal um höchstens ein Level ändern,* also eine Verfeinerung oder Vergröberung aktueller Elemente um höchstens ein Level erforderlich machen.

• Fehlerschätzer als berechenbare Informationen über den lokalen Fehler der erzeugten FEM-Näherung werden zur Bewertung der zulässigen Basiserweiterungen herangezogen. Die beabsichtigte Nutzung hierarchischer Fehlerschätzer, wie sie von Verfürth in [13] untersucht wurden, paßt dann in das Konzept. *Als Fehlerschätzer für die Basiserweiterung werden die*

Residuen der FEM-Lösung auf denjenigen hierarchischen Basisfunktionen als Testfunktionen verwendet, die die zulässige Basiserweiterung definieren. Ein analoges Vorgehen ist bei Basiseinschränkung zu realisieren.

• Die Steuerung des Adaptionsprozesses besteht dann aus einer *Fehlerverminderungsstrategie, die in jedem Adaptionsschritt die Auswahlentscheidung aus der Menge der zulässigen Basen determiniert.* Sie stellt einen wesentlichen Bestandteil des Adaptionsprozesses dar, der in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht untersucht wird.

2.6.2 Zulässige Basiserweiterungen

Für die Definition der zulässigen Basiserweiterung gibt es verschiedene Möglichkeiten, auch bei Beschränkung des zugehörigen Netzumbaus auf ein Level. Naheliegend und natürlich erscheint die Vorstellung, *für jede bereits vorhandene lokale Feinheitsstufe der Lösungsapproximation den Übergang zur nächstfeineren zuzulassen,* also zu jeder vorhandenen Basisfunktion die Hinzunahme aller noch nicht vorhandenen Basisfunktionen des nächstfeineren Levels aus der unmittelbaren Nachbarschaft zu gestatten, wobei unter unmittelbarer Nachbarschaft die Nachfolgerknoten des Bezugsknotens im Knotenverfeinerungsgraphen zu verstehen sind. Würden diese unmittelbar benachbarten hierarchischen Funktionen tatsächlich *alle* in die Basis einbezogen, könnte die lokale Lösungsdarstellung um den Knoten herum auf dem nächstfeineren Level realisiert werden, andernfalls nur partiell und damit richtungsabhängig.

Definition: *Aktivierbarer Knoten* heiße jeder nicht aktive Nachfolger eines Knotens aus $\mathcal{M}_{(a)}$ im Graphen $G_{\mathcal{N}}$. Bezeichnet $\Gamma^+_{\mathcal{N}}(A)$ die Nachfolgermenge einer Menge A von Knoten in $G_{\mathcal{N}}$, so ist

$$\Delta\mathcal{M}^+_{(a)} = \Gamma^+_{\mathcal{N}}(\mathcal{M}_{(a)}) \setminus \mathcal{M}_{(a)}$$

die Menge aller aktivierbaren Knoten zur Menge $\mathcal{M}_{(a)}$ der aktiven Knoten. Sei weiterhin $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)} \subset \Delta\mathcal{M}^+_{(a)}$ eine beliebige Menge aktivierbarer Knoten und $\mathcal{M}^\diamond_{(a)} = \mathcal{M}_{(a)} \cup \Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$. Dann heiße

$$\Theta_a(\mathcal{M}^\diamond_{(a)}) = \Theta_a(\mathcal{M}_{(a)}) \cup \Theta_a(\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)})$$

die *zulässige Basiserweiterung von* $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$*, entstanden durch Aktivierung der Knoten aus* $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$. Insbesondere werde $\Theta_a(\mathcal{M}^+_{(a)})$ mit $\mathcal{M}^+_{(a)} = \mathcal{M}_{(a)} \cup \Delta\mathcal{M}^+_{(a)}$ als *maximale zulässige Basiserweiterung von* $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ bezeichnet.

Bemerkungen: 1. Die Verfügbarkeit der aktivierbaren Knoten im Netz zur Menge $\mathcal{M}_{(a)}$ aktiver Knoten läßt sich wie folgt charakterisieren. Die in $\mathcal{N}_{k+1}$ enthaltenen aktivierbaren Knoten sind Kantenmittelknoten von jeweils ein oder zwei Elementen $e \in \mathcal{E}_k$. Diese Knoten stellen Nachfolger von aktiven Knoten $i \in \mathcal{M}_{k,a}$ im Knotenverfeinerungsgraphen dar, deshalb gehören die Elemente e zu den Elementen aus $\mathcal{E}_k$, die zur Beschreibung des Trägers von $\hat{\theta}^k_i$ benötigt werden und entsprechend der Netzkonstruktion in $\mathcal{E}^*_k$ enthalten sind. Liegt zum aktivierbaren Knoten wenigstens ein Element e in $\mathcal{E}^*_k \setminus E_k$, so ist wegen der nachfolgenden Verfeinerung von $\mathcal{E}^*_k \setminus E_k$ zu $\mathcal{E}^*_{k+1}$ der betreffende aktivierbare Knoten auch passiver Netzknoten, d.h. aus $\mathcal{M}_{(p)}$. Ist der aktivierbare Knoten jedoch *nur* in Elementen $e \in E_k$ Kantenmittelknoten, so gehört er *nicht* der Menge der Netzknoten $\mathcal{M}$ an, wohl aber der Knotenmenge $\widetilde{\mathcal{M}}$, die bei Realisierung der Elemente als 6-Knoten-Dreiecke zur Verfügung steht, vgl. die Bemerkung zur Definition des ungleichmäßigen hierarchischen Netzes. Auch die Menge $\mathcal{M}^+$ der Knoten des von $\mathcal{M}^+_{(a)}$ erzeugten Netzes gehört noch $\widetilde{\mathcal{M}}$ an. $\widetilde{\mathcal{M}}$ kann aufgefaßt werden als Menge der Eckknoten der Elemente, die durch reguläre Verfeinerung *aller* Elemente aus E hervorgehen. $\mathcal{M}^+$ hingegen ist die Eckknoten-Menge der Zerlegung E^+, die durch reguläre Verfeinerung *mancher* Elemente aus E entsteht, derjenigen mit wenigstens einem aktivierbaren Kantenmittelknoten. Also gilt

$$\mathcal{M}_{(a)} \subset \mathcal{M}^+_{(a)} \subset \mathcal{M}^+ \subset \widetilde{\mathcal{M}}.$$

Bei Verwendung von 6-Knoten-Dreiecken kann im Algorithmus der Basiserweiterung also davon ausgegangen werden, daß sowohl die aktivierbaren Knoten als auch die bei ihrer Aktivierung neu erzeugten Netzknoten schon in den Datenstrukturen verfügbar sind, nur die noch nicht vorhandenen Kantenmittelknoten aus $\widetilde{\mathcal{M}}^+ \setminus \widetilde{\mathcal{M}}$ sind neu zu erzeugen.
2. Die Definition aktivierbarer Knoten als nicht aktive Nachfolger aktiver Knoten zieht nach sich, daß bei Aktivierung solcher Knoten das zugehörige Netz lokal höchstens um ein Level verfeinert werden muß. Dies könnte nicht mehr gewährleistet werden, wenn auch Nachfolger nicht aktiver Knoten als aktivierbare Knoten definiert würden, insbesondere nicht bei gleichzeitiger Hinzunahme mehrerer Schichten von Nachfolgern. Lokale Verfeinerungen des Netzes um mehrere Level sollen hier jedoch nicht betrachtet werden.
3. Entsprechend obiger Definition können die aktivierbaren Knoten bestimmt werden, wenn zu jedem Knoten seine Nachfolger im Knoten-Verfeinerungsgraphen $G^{J+1}_{\mathcal{N}}$ zur Verfügung stehen und von allen Knoten bekannt ist, ob sie aktiv sind. Ist der Transformationsgraph, der den Knoten-Verfeinerungsgraphen enthält, nur als rückwärts verkettete Liste verfügbar, so erscheint bei Nutzung der Definition ein Wechsel der Betrachtungsposition vom aktiven zum aktivierbaren Knoten zweckmäßig. Die aktivierbaren Knoten können dann bestimmt werden, wenn zu jedem Knoten seine Knotenväter im Transformationsgraphen zur Verfügung stehen und von allen Knoten bekannt ist, ob sie Wurzelkanten-Mittelknoten darstellen und ob sie aktiv sind: *Ein aktivierbarer Knoten ist ein nicht aktiver Knoten, der im Transformationsgraphen $\hat{G}^{J+1}_{\mathcal{N}}$ entweder Mittelknoten einer Wurzelkante ist mit wenigstens einem aktiven Vaterknoten, oder der kein Mittelknoten einer Wurzelkante ist und einen aktiven ersten Vaterknoten besitzt.*
4. In [5] wurde der Begriff des aktivierbaren Knotens enger gefaßt, nämlich als nicht aktiver Knoten, dessen *beide Väter im Transformationsgraphen aktive Knoten* sind. Die auf dieser Grundlage erzeugbaren hierarchischen Basen sind allerdings geometrisch weniger anpassungsfähig, besitzen jedoch eine später dargestellte zusätzliche Möglichkeit zu Auflösung des FEM-Gleichungssystems.

2.6.3 Zulässige Basen

Entsprechend den Vorstellungen vom Adaptionsprozeß sollen nur noch solche hierarchischen Basen $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ betrachtet werden, die durch endlich viele aufeinanderfolgende zulässige Basiserweiterungen aus der Hauptnetzbasis $\Theta_a(\mathcal{N}_0)$ erzeugbar sind. Da außer den Hauptknoten alle weiteren aktiven Knoten nur durch Aktivierung im Rahmen einer zulässigen Basiserweiterung entstanden sein können, handelt es sich um Basen mit folgender Eigenschaft.

Definition: Die Menge aktiver Knoten $\mathcal{M}_{(a)}$ und die ihr zugeordnete ungleichmäßige hierarchische Basis $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ heißen *zulässig* genau dann, wenn von den Knoten aus $\mathcal{M}_{(a)}$ nur die Hauptknoten im gerichteten Graphen $G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}_{(a)}]$ keinen Vorgänger besitzen.

Offenbar ist auch umgekehrt jede zulässige Basis durch endlich viele zulässige Basiserweiterungen aus der Hauptnetzbasis erzeugbar: Ist J das Maximallevel der zulässigen Basis, so werden etwa im i-ten von J Schritten die Knoten aus $\mathcal{M}_{i,a}$ aktiviert, die nach Definition der zulässigen Basis in diesem Moment alles aktivierbare Knoten darstellen. Für die Erzeugung der Basis gibt es jedoch zumeist weitere Möglichkeiten.

Die Zulässigkeit der Basis ist gleichbedeutend damit, daß jeder aktive Knoten in $G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}_{(a)}]$ von wenigstens einem Hauptknoten aus erreichbar ist, d.h. daß von wenigstens einem Hauptknoten aus ein gerichteter Weg in $G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}_{(a)}]$ zum Knoten existiert. Auf jedem dieser gerichteten Wege erhöht sich mit jedem Schritt das Level des erreichten Zwischenknotens um genau 1, das Level jedes erreichten Zwischenknotens ist somit gleich seiner Entfernung von seinem am Weganfang stehenden Hauptknoten. Die Aktivierung weiterer Knoten entspricht dann der Fortsetzung solcher gerichteten Wege um einen Schritt. Eine zulässige Erweiterung einer zulässigen Basis erzeugt offenbar wieder eine zulässige Basis.

2.6.4 Zulässige Basiseinschränkungen

Die vorhandene Basis kann Resultat vorangegangener Basiserweiterungen sein. Die zulässige Basiseinschränkung sollte deshalb so definiert werden, daß sie zu einer denkbaren vorherigen Basiserweiterung nicht in Widerspruch steht. Vor allem sollte die Basiseinschränkung nicht die Voraussetzung einer solchen Erweiterung beseitigen und gleichzeitig das Resultat der Erweiterung anerkennen: Die Aktivierung eines Knotens im Rahmen der Basiserweiterung ist an die Voraussetzung gebunden, daß dieser im Knoten-Verfeinerungsgraphen Nachfolger eines aktiven Knotens ist. Von einem nunmehr aktiven Knoten darf also wenigstens ein aktiver Vorgänger in $G_{\mathcal{N}}$ nicht deaktiviert werden, damit der aktive Knoten auch weiterhin als Resultat einer zulässigen Basiserweiterung aufgefaßt werden kann. Bei einem aktiven Wurzelkanten-Mittelknoten heißt das, einer der beiden Vorgänger muß aktiv bleiben, bei jedem anderen aktiven Knoten mit Ausnahme der Hauptknoten muß der einzige Vorgänger aktiv bleiben, Hauptknoten dürfen prinzipiell nicht deaktiviert werden.

Bei Wechsel der Betrachtungsposition zum zu deaktivierenden Knoten wird ein Problem sichtbar. Ein aktiver Knoten positiven Levels ohne aktive Nachfolger in $G_{\mathcal{N}}$ kann problemlos deaktiviert werden. Das Deaktivieren eines Knotens ist auch bei vorhandenen aktiven Nachfolgern denkbar. Ein solcher aktiver Nachfolger müßte aber einer der vier möglichen Wurzelkanten-Mittelknoten sein und einen zweiten aktiven Vorgänger besitzen, der nicht deaktiviert wird. Diesem könnte der aktive Nachfolger bei Deaktivierung des ersten Vorgängers dann zugeschrieben werden. Aus Symmetriegründen ist jedoch die Entscheidung zu fällen, welcher der beiden Vorgänger des aktiven Wurzelkanten-Mittelknotens deaktiviert werden und welcher aktiv bleiben soll, wobei die übrigen Nachfolger beider Vorgänger die Entscheidung beeinflussen. Die Menge derartiger Entscheidungen im Gebiet Ω kann stark vernetzt sein, die Bestimmung der deaktivierbaren Knoten aufwendig und bereits in einfachen Fällen nicht eindeutig. Aus diesen Gründen empfiehlt es sich, den Begriff der Deaktivierbarkeit von Knoten mit der zuerst erwähnten Situation zu verbinden und damit etwas enger als möglich, dafür aber praktikabel zu fassen.

Definition: *Deaktivierbarer Knoten* heiße jeder Knoten aus $\mathcal{M}_{(a)}$, der im Graphen $G_{\mathcal{N}}$ keine aktiven Nachfolger besitzt und auch kein Hauptknoten ist. Bezeichnet $\Gamma^-_{\mathcal{N}}(A)$ die Vorgängermenge einer Menge A von Knoten in $G_{\mathcal{N}}$, so ist

$$\Delta\mathcal{M}^-_{(a)} = \mathcal{M}_{(a)} \setminus \left(\Gamma^-_{\mathcal{N}}(\mathcal{M}_{(a)}) \cup \mathcal{N}_0\right)$$

die Menge aller deaktivierbaren Knoten zur Menge $\mathcal{M}_{(a)}$ der aktiven Knoten. Sei weiterhin $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)} \subset \Delta\mathcal{M}^-_{(a)}$ eine beliebige Menge deaktivierbarer Knoten und $\mathcal{M}^\diamond_{(a)} = \mathcal{M}_{(a)} \setminus \Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$. Dann heiße

$$\Theta_a(\mathcal{M}^\diamond_{(a)}) = \Theta_a(\mathcal{M}_{(a)}) \setminus \Theta_a(\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)})$$

die *zulässige Basiseinschränkung von $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$, entstanden durch Deaktivierung der zu $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$ gehörenden Knoten.* Insbesondere werde $\Theta_a(\mathcal{M}^-_{(a)})$ mit $\mathcal{M}^-_{(a)} = \mathcal{M}_{(a)} \setminus \Delta\mathcal{M}^-_{(a)}$ als *maximale zulässige Basiseinschränkung von $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$* bezeichnet.

Eine zulässige Basiseinschränkung überführt eine zulässige Basis wieder in eine zulässige Basis, weil nach Definition der deaktivierbaren Knoten keinem aktiven Knoten, der einen aktiven Vorgänger in $G_{\mathcal{N}}$ besitzt, dieser Vorgänger deaktiviert wird. Aus dem gleichen Grunde ist jeder auf $\mathcal{M}_{(a)}$ bezogen deaktivierbare Knoten ein Nachfolger eines Knotens aus $\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$ und deshalb auf $\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$ bezogen ein aktivierbarer Knoten. Ist also die Basis $\Theta_a(\mathcal{M}^\diamond_{(a)})$ durch zulässige Einschränkung der zulässigen Basis $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ entstanden, so ist umgekehrt die Erweiterung von $\Theta_a(\mathcal{M}^\diamond_{(a)})$ zu $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ auch eine zulässige Basiserweiterung. Ist jedoch die Basis $\Theta_a(\mathcal{M}^\diamond_{(a)})$ durch eine zulässige Erweiterung der zulässigen Basis $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ entstanden, so muß die Einschränkung von $\Theta_a(\mathcal{M}^\diamond_{(a)})$ zu $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ nicht notwendig eine zulässige Basiseinschränkung sein, vgl. die Überlegungen vor der Definition deaktivierbarer Knoten.

2.6.5 Netzumbau bei Basisänderung

Ohne immer wieder gesondert darauf hinzuweisen, sollen von nun an nur noch zulässige Basen, Basiserweiterungen und Basiseinschränkungen benutzt werden.

Die Änderung der Basis von $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ zu $\Theta_a(\mathcal{M}^\diamond_{(a)})$ durch Erweiterung oder Einschränkung zieht einen Umbau des ungleichmäßigen hierarchischen Netzes nach sich:

$$G_{\mathcal{E}}[\mathcal{E}]\,, \quad G_{\mathcal{K}}[\mathcal{K}]\,, \quad G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}] \qquad \rightsquigarrow \qquad G_{\mathcal{E}}[\mathcal{E}^\diamond]\,, \quad G_{\mathcal{K}}[\mathcal{K}^\diamond]\,, \quad G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}^\diamond]\,,$$

wobei mit $^\diamond$ die zur geänderten Basis gehörenden Mengen indiziert werden. Die Steuerung des Netzumbaus kann primär über den Umbau der Elementehierarchie erfolgen, die Kanten- und Knotenstrukturen werden dann begleitend mit verändert. Dieser Umbau der Elementehierarchie wird auf der Grundlage des Elementverfeinerungsprinzips abgewickelt, das die Beschreibbarkeit der Basisfunktionen sichert und der Netzdefinition zugrunde liegt.

Bei Basiserweiterung durch Aktivierung der Knoten aus $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)} \subset \Delta\mathcal{M}^+_{(a)}$ stellt sich die Situation wie folgt dar. Die Elementemenge $\mathcal{E} = \bigcup_{k=0}^{J} \mathcal{E}^*_k$ ist konstruktiv definiert durch schrittweise Verfeinerung derjenigen der vorhandenen Elemente des Levels $k-1$, d.h. aus $\mathcal{E}^*_{k-1}$, auf deren Rand oder in deren Innerem wenigstens ein aktiver Knoten mindestens des Levels k liegt,

$$\mathcal{E}^*_k \;=\; \Gamma^+_{\mathcal{E}}(\mathcal{E}^*_{k-1} \setminus E_{k-1})\,.$$

Durch Aktivierung der Knoten aus $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$ entfallen keine der bisherigen Elementverfeinerungen, weil sie auf Grundlage auch weiterhin vorhandener aktiver Knoten getroffen wurden, weitere Elementverfeinerungen und damit Elemente können jedoch hinzukommen. Somit gilt $\mathcal{E}^*_k \subset (\mathcal{E}^*_k)^\diamond$, $k=0(1)J+1$, also $\mathcal{E} \subset \mathcal{E}^\diamond$, wobei $\mathcal{E}^*_{J+1} = \emptyset$. Die neuen aktiven Knoten aus $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)} \cap \mathcal{N}_k$ treten alle als Kantenmittelknoten von Elementen aus $\mathcal{E}^*_{k-1}$ auf, vgl. die Bemerkung 1. zur zulässigen Basiserweiterung. E^f_{k-1} sei die Menge der noch unverfeinerten derartigen Elemente, d.h. allgemein sei

$$E^f_k = \{e \in E_k \mid \text{wenigstens ein Kantenmittelknoten von } e \text{ ist aktiv}\}\,, \qquad k = 0(1)J\,.$$

Diese Elemente aus E^f_{k-1} sind wegen der aktiven Kantenmittelknoten alle in die Verfeinerung einzubeziehen. Elemente aus $E_{k-1} \setminus E^f_{k-1}$ hingegen kommen dafür nicht in Frage. Sie können weder im Inneren noch auf dem Rand einen aktiven Knoten vom Level k oder höher enthalten, da wegen der Zulässigkeit der Basiserweiterung zu diesem ein gerichteter Weg über einen aktiven Kantenmittelknoten führen müßte. Bei Basiserweiterung sind also von den unverfeinerten Elementen aus $\mathcal{E}^*_{k-1}$ genau die Elemente aus E^f_{k-1} zusätzlich zu verfeinern. Unter den durch diese Verfeinerung entstandenen Elemente aus $\Gamma^+_{\mathcal{E}}(E^f_{k-1})$ gibt es keine, die im Inneren oder auf dem Rand Knoten vom Level $k+1$ oder höher enthalten und deshalb weiter zu verfeinern wären, denn nach Definition der zulässigen Basiserweiterung wurde lokal nur um ein Level erweitert. Die Elemente aus $\Gamma^+_{\mathcal{E}}(E^f_{k-1})$ stellen also alles neue aktuelle Elemente des Levels k dar. Weiter verfeinert werden nur genau die alten aktuellen Elemente aus E^f_k, so daß gilt

$$(\mathcal{E}^*_0)^\diamond \;=\; \mathcal{E}^*_0 \;=\; \mathcal{E}_0\,, \quad E^\diamond_0 \;=\; E_0 \setminus E^f_0\,,$$
$$(\mathcal{E}^*_k)^\diamond \;=\; \mathcal{E}^*_k \,\cup\, \Gamma^+_{\mathcal{E}}(E^f_{k-1})\,, \quad E^\diamond_k \;=\; (E_k \setminus E^f_k) \,\cup\, \Gamma^+_{\mathcal{E}}(E^f_{k-1})\,, \quad k = 1(1)J\,,$$
$$(\mathcal{E}^*_{J+1})^\diamond \;=\; E^\diamond_{J+1} \;=\; \Gamma^+_{\mathcal{E}}(E^f_J)\,.$$

Werden die entsprechenden Gleichungen aufaddiert, so liefert dies mit der Menge E^f der zu verfeinernden aktuellen Elemente

$$E^f = \bigcup_{k=0}^{J} E^f_k\,, \qquad \mathcal{E}^\diamond = \mathcal{E} \cup \Gamma^+_{\mathcal{E}}(E^f) \qquad E^\diamond = (E \setminus E^f) \cup \Gamma^+_{\mathcal{E}}(E^f)\,.$$

Zusammengefaßt ergibt sich also nach Aktivierung der Knoten aus $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)} \subset \Delta\mathcal{M}^+_{(a)}$ folgende Regel für die zugehörigen Elementverfeinerungen, die E in $E^\diamond$ und damit auch $\mathcal{E}$ in $\mathcal{E}^\diamond$ überführt.

Elementverfeinerungsregel (zur zulässigen Erweiterung einer zulässigen Basis):
Nach der Aktivierung von Knoten sind genau diejenigen aktuellen Elemente regulär zu verfeinern, die mindestens einen aktiven Kantenmittelknoten besitzen.

Bei Basiseinschränkung durch Deaktivierung der Knoten aus $\Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)} \subset \Delta\mathcal{M}^-_{(a)}$ kann auch umgekehrt (s.o.) der Übergang von $\Theta_a(\mathcal{M}^\diamond_{(a)})$ zu $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ als zulässige Basiserweiterung betrachtet werden. Dann ist die Rolle von $\mathcal{E}$, E einerseits und $\mathcal{E}^\diamond$, $E^\diamond$ andererseits zu vertauschen, die Elementverfeinerungsregel läßt sich wie folgt uminterpretieren.

Elementvergröberungsregel (zur zulässigen Einschränkung einer zulässigen Basis):
Nach der Deaktivierung von Knoten sind genau diejenigen Elemente als aktuelle Elemente zu rekonstruieren, die vier aktuelle Elemente als Söhne besitzen, aber keinen aktiven Kantenmittelknoten.

Der Wortlaut beider Regeln läßt den Schluß zu, daß sich die aus den zulässigen Basisänderungen ergebenden Netzänderungen als Zyklen über der Menge der aktuellen Elemente organisieren lassen, und zwar im Anschluß an die Aktivierung bzw. Deaktivierung des maximal einen erlaubten lokalen Knotenlevels.

Bemerkung: In [5] wurden eine Implementation der Datenstrukturen des Netzes, deren Verwaltung sowie die Module für die Basis- und zugehörige Netzänderungen ausführlich beschrieben.

2.6.6 Ablauf des Adaptionsschrittes

Die bisherigen Überlegungen führen zu folgender Ablaufstruktur des Adaptionsschrittes, ausgehend von einer vorhandenen FEM-Näherung:

- □ Feststellung der deaktivierbaren Knoten
- □ Bewertung aller deaktivierbaren Knoten (Fehlerschätzer)
- □ Deaktivierungsentscheidung
- □ Netzrückbau
- □ Feststellung der aktivierbaren Knoten
- □ Bewertung aller aktivierbaren Knoten (Fehlerschätzer)
- □ Aktivierungsentscheidung
- □ Netzausbau
- □ Erzeugung des FEM-Gleichungssystems
- □ Lösung des FEM-Gleichungssystems

2.7 Hierarchische und FE-Basis, aktive und verfügbare Basis

In diesem Abschnitt werden vier Basen zusammengestellt, die bei der nachfolgenden Realisierung eines FEM-Schemas auf dem ungleichmäßigen hierarchischen Netz und dessen iterativer Lösung eine Rolle spielen. Sie wurden bereits in [5] eingeführt und berücksichtigen auch das hier etwas allgemeinere Aktivierungskonzept. Allen vier Basen liege dabei ein und dieselbe zulässige Menge aktiver Knoten $\mathcal{M}_{(a)}$ zugrunde, die im weiteren als fest angenommen und deshalb als Argument der Basis meist weggelassen werde.

Der FE-Raum werde zunächst – den Vorstellungen vom Adaptionsschritt entsprechend – durch eine ungleichmäßige hierarchische Basis $\Theta_a = \Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ beschrieben, im Ensemble der vier Basen wegen Nutzung der hierarchischen Funktionen zu den aktiven Knoten als *aktive hierarchische Basis* bezeichnet.

Für die Einführung weiterer Basen gibt es zwei Gründe:
Erstens darf aus Gründen von Speicherökonomie und arithmetischem Operationsaufwand der Vorteil der FEM nicht aufgegeben werden, *schwach besetzte Systemmatrizen* zu erzeugen. Wenn also die FE-Räume hier – im Gegensatz zur FEM auf regulären Netzen – primär mittels hierarchischer Basen definiert werden, so müssen diese Basen für die Assemblierung der FEM-Gleichungssysteme in äquivalente FE-Basen transformiert werden, d.h. in solche Basen, deren Funktionen einen möglichst kleinen Träger (Ziel: Durchmesser $O(h)$) besitzen. Als elementares Mittel zur Trägerverkleinerung dienen wie im Falle gleichmäßiger hierarchischer Netze die hierarchischen Transformationen, wobei an diesen Transformationen natürlich nur vorhandene Basisfunktionen teilnehmen können, an der Transformation von Θ_a also die Funktionen von Θ_a.

Zweitens darf aus Sicht des algorithmischen Aufwandes nicht auf die *einfache Assemblierungstechnik* für FEM-Systemmatrix und zugehörige rechte Seite verzichtet werden. Da bei der Transformation mittels der Funktionen von Θ_a das Zusammentreffen hierarchischer Basisfunktionen hinsichtlich Level und Position zueinander lokal sehr unterschiedlich sein kann, sind nach der hierarchischen Transformation in der Regel FE-Basisfunktionen unterschiedlichster Gestalt zu erwarten, schwer geometrisch beschreibbar und mit komplizierteren Trägerdurchschnitten, so daß die übliche einfache Assemblierungstechnologie für die Steifigkeitsmatrix nicht funktioniert. Dieses Problem kann wie bereits in [5] dargestellt durch eine geeignete Erweiterung der aktiven hierarchischen Basis um zumeist nichtkonforme Basisfunktionen gelöst werden, so daß in der zugehörigen erweiterten FE-Basis wieder wie üblich assembliert werden kann. Das FEM-Problem ist dann allerdings in dem durch die aktive hierarchische Basis bestimmten Unterraum zu lösen.

2.7.1 Zwei hierarchische Basen

Die aktive hierarchische Basis wird so erweitert, daß sie auch für die passiven und damit für alle in $\mathcal{M}$ verfügbaren Netzknoten Basisfunktionen enthält. In den regulären Knoten (auch den passiven) werden die üblichen hierarchischen Funktionen $\hat\theta_i^k$ benutzt, in den irregulären Knoten $i \in \mathcal{M}_k$ die *unstetigen „halben" Hütchenfunktionen* $\theta_{i,e}^k$. Diese entstehen aus $\hat\theta_i^k$ durch Annullierung der Funktion auf demjenigen aktuellen Element $e \in E_l$, $l < k$, auf dessen Kante Knoten i liegt, ohne Kantenendpunkt zu sein. Wird mit χ_e die charakteristische Funktion von $e \setminus \partial e$ bezeichnet, so ist $\theta_{i,e}^k = (1-\chi_e)\,\hat\theta_i^k$.

Definition: *Verfügbare hierarchische Basis zur Menge $\mathcal{M}_{(a)}$ aktiver Knoten* heiße dann

$$\Theta = \Theta(\mathcal{M}_{(a)}) = \tag{13}$$
$$\{\, \theta_i^k \mid \theta_i^k = \hat\theta_i^k,\ i \in \mathcal{M}_k \text{ und } i \text{ regulär};\ \theta_i^k = \theta_{i,e}^k,\ i \in \mathcal{M}_k \text{ und } i \text{ irregulär};\ k = 0(1)J \,\}.$$

Zum Vergleich: die zugehörige aktive hierarchische Basis ist

$$\Theta_a = \Theta_a(\mathcal{M}_{(a)}) = \{\, \theta_i^k \mid \theta_i^k = \hat\theta_i^k,\ i \in \mathcal{M}_{k,a}\,,\ k = 0(1)J \,\}. \tag{14}$$

Die ungleichmäßigen Basen, insbesondere (13), (14), sollen im weiteren wie die gleichmäßigen Basen als Zeilenvektoren (unterschiedlicher Länge) geschrieben werden. Dabei seien die

Knoten levelweise aufsteigend und innerhalb der $\mathcal{M}_{k,a}$, $\mathcal{M}_{k,p}$ beliebig, aber fest geordnet entsprechend

$$\mathcal{M}_{0,a}\ \ \mathcal{M}_{0,p}\ \ \mathcal{M}_{1,a}\ \ \mathcal{M}_{1,p}\ \ \cdots\ \ \mathcal{M}_{J,a}\ \ \mathcal{M}_{J,p} \qquad \text{(verfügbare Basen)}\,, \tag{15}$$

$$\mathcal{M}_{0,a}\ \ \mathcal{M}_{1,a}\ \ \cdots\ \ \mathcal{M}_{J,a} \qquad \text{(aktive Basen)}\,, \tag{16}$$

wobei $N = |\mathcal{M}|$, $N_a = |\mathcal{M}_{(a)}|$ die entsprechenden Knotenzahlen und damit Anzahlen von Basisfunktionen bedeuten sollen.

Praktisch würde (15) eine nachträgliche Umnumerierung der Knoten bedeuten, die mit einer Permutationsmatrix $\Pi \in \mathbf{R}^{N\times N}$ beschrieben werden kann. Diese Umnumerierung beträfe alle Matrizen und dabei Zeilen und Spalten in gleicher Weise, hätte für die nachfolgenden Ergebnisse wegen $\Pi\Pi^\top = \Pi^\top\Pi = I$ jedoch keine Bedeutung. Es wird deshalb davon ausgegangen, daß die Knoten aus $\mathcal{M}$ von vornherein entsprechend (15) numeriert sind.

2.7.2 Basiseinschränkung und elementare hierarchische Transformationen

Der Übergang von (15) zu (16) durch Auslassen der passiven Knoten ist verbunden mit einer weiteren Umnumerierung. Ist $I_a \in \mathbf{R}^{N\times N_a}$ die *Matrix der Basiseinschränkung auf die aktiven Knoten*, also eine Rechteckmatrix, die aus der entsprechenden Einheitsmatrix des $\mathbf{R}^{N\times N}$ entsteht durch Streichen der Spalten der passiven Knoten, so gilt

$$\Theta_a = \Theta\, I_a. \tag{17}$$

I_a definiert eine Diagonalmatrix $P_a \in \mathbf{R}^{N\times N}$, die wegen $I_a^\top I_a = I \in \mathbf{R}^{N_a\times N_a}$ einen Orthoprojektor in $\mathbf{R}^N$ darstellt

$$P_a \;=\; I_a\, I_a^\top\,, \tag{18}$$

$$P_a^2 = I_a\, I_a^\top\, I_a\, I_a^\top = P_a\,, \quad P_a^\top = P_a\,.$$

(Ohne Unterscheidung der Raumdimension bezeichne I immer die Einheitsmatrix, solange dies zu keinen Mißverständnissen führt.) Offensichtlich gilt auch $I_a = P_a\, I_a$.

Alle Transformationsmatrizen T_i usw. beziehen sich im weiteren auf die Darstellung in der verfügbaren Basis, d.h. $T_i \in \mathbf{R}^{N\times N}$. Seien weiterhin $V1 = V1(i)$, $V2 = V2(i)$ die Väter des Knotens i im Transformationsgraphen $\hat{G}_{\mathcal{N}}$. Für $i \in \mathcal{M}$, $Vj \in \{V1, V2\}$ werden dann Anteile von T_i definiert, die auf aktive bzw. passive Väter wirken:

$$T_{i,a}^{(Vj)} \;=\; T_i^{(Vj)}, \quad T_{i,p}^{(Vj)} \;=\; I, \qquad \text{falls} \quad Vj \in \mathcal{M}_{(a)}\,,$$

$$T_{i,p}^{(Vj)} \;=\; T_i^{(Vj)}, \quad T_{i,a}^{(Vj)} \;=\; I, \qquad \text{falls} \quad Vj \in \mathcal{M}_{(p)}\,,$$

$$T_{i,a} \;=\; T_{i,a}^{(V1)}\, T_{i,a}^{(V2)} \;=\; T_{i,a}^{(V2)}\, T_{i,a}^{(V1)}\,, \qquad T_{i,p} \;=\; T_{i,p}^{(V1)}\, T_{i,p}^{(V2)} \;=\; T_{i,p}^{(V2)}\, T_{i,p}^{(V1)}\,.$$

Offensichtlich folgt

$$T_i^{(Vj)} \;=\; T_{i,a}^{(Vj)}\, T_{i,p}^{(Vj)} \;=\; T_{i,p}^{(Vj)}\, T_{i,a}^{(Vj)}\,, \qquad T_i \;=\; T_{i,a}\, T_{i,p} \;=\; T_{i,p}\, T_{i,a}\,.$$

Folgende Vertauschbarkeitseigenschaften ergeben sich durch einfaches Nachrechnen

$$\begin{aligned} T_{i,a}^{(Vj)}\,P_a \;&=\; P_a\,T_{i,a}^{(Vj)} \;=\; T_{i,a}^{(Vj)} - I + P_a\,, \quad i\in\mathcal{M}_{(a)}\,,\ \ Vj\in\{V1,\,V2\}\,,\\ T_{i,a}\;\;P_a \;&=\; P_a\,T_{i,a} \;\;\;=\; T_{i,a} \;\;\; - I + P_a\,, \quad i\in\mathcal{M}_{(a)}\,. \end{aligned} \tag{19}$$

In den letzten beiden Zeilen können die Matrizen $T_{i,a}^{(Vj)}$ und $T_{i,a}$ auch durch die zugehörigen transponierten, inversen oder transponierten inversen Matrizen ersetzt werden.

2.7.3 Zwei FE-Basen

Zu den beiden hierarchischen Basen werden äquivalente FE-Basen analog zu (9) definiert.

Definition: *Aktive FE-Basis* $\Phi_a = \Phi_a(\mathcal{M}_{(a)})$ *und verfügbare FE-Basis* $\Psi = \Psi(\mathcal{M}_{(a)})$ *zur Menge* $\mathcal{M}_{(a)}$ *aktiver Knoten* heißen dann

$$\Phi_a \;=\; \Phi\, I_a \qquad \text{mit} \tag{20}$$

$$\Phi \;=\; \Theta\, T_a \qquad \text{und} \tag{21}$$

$$T_a \;=\; \Bigg(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,a}} T_{i,a}\Bigg)\cdots\Bigg(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,a}} T_{i,a}\Bigg) \;=\; \prod_{\substack{i\in\mathcal{M}_{(a)}\\ V(i)\prec i}} T_{i,a}\,, \tag{22}$$

$$\Psi \;=\; \Theta\, T \qquad \text{mit} \tag{23}$$

$$T \;=\; \Bigg(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1}} T_{i}\Bigg)\cdots\Bigg(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J}} T_{i}\Bigg) \;=\; \prod_{\substack{i\in\mathcal{M}\\ V(i)\prec i}} T_{i}\,. \tag{24}$$

Die Transformationen T_a bzw. T entsprechen dem (nicht zusammenhängenden) Ablaufen der Transformationsgraphen $\hat{G}_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}_{(a)}]$ bzw. $\hat{G}_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}]$ unter Berücksichtigung der aus $\hat{G}_{\mathcal{N}}$ übertragenen Teilordnung $\prec$. Diese Transformationen sind korrekt definiert, weil für $i\in\mathcal{M}$ auch immer beide Väter zu $\mathcal{M}$ gehören, vgl. Bemerkung 1. zum ungleichmäßigen hierarchischen Netz, und weil für $i\in\mathcal{M}_{(a)}$ die transformierten Väter nach Definition von $T_{i,a}$ zu $\mathcal{M}_{(a)}$ gehören.

Eigenschaft (19) läßt sich analog auf T_a, T_a^{-1}, $T_a^{\top}$, $T_a^{-\top}$ übertragen, d.h. zum Beispiel

$$T_a\,P_a \;=\; P_a\,T_a \;=\; T_a - I + P_a \quad \text{usw.} \tag{25}$$

Die Transformationsmatrix $S_a\in\mathbf{R}^{N_a\times N_a}$ für die Erzeugung der aktiven FE-Basis aus der aktiven hierarchischen Basis

$$\Phi_a \;=\; \Theta_a\, S_a \tag{26}$$

kann dann auch unmittelbar angegeben werden. Es ist

$$\begin{aligned} \Phi_a \;=\; \Theta\,T_a\,I_a \;=\; \Theta\,T_a\,P_a\,I_a \;=\; \Theta\,P_a\,T_a\,I_a \;&=\; \Theta_a\,I_a^{\top}\,T_a\,I_a\,,\\ S_a \;&=\; I_a^{\top}\,T_a\,I_a\,. \end{aligned}$$

Die Matrix S_a ist regulär, entsprechend gilt

$$S_a^{-1} \;=\; I_a^{\top}\,T_a^{-1}\,I_a\,.$$

2.7.4 Einige Eigenschaften der FE-Basen

1. Aktive FE-Basis:
Ist Θ_a eine *zulässige* aktive hierarchische Basis, so haben die Funktionen der aktiven FE-Basis Φ_a auf jeder Wurzelkante des Netzes folgende Eigenschaft, die die systematische Trägerreduzierung durch die hierarchische Transformation T_a in Analogie zur Situation auf dem gleichmäßigen hierarchischen Netz charakterisiert: *Die zu den aktiven Knoten einer Wurzelkante gehörenden Funktionen aus Φ_a fallen auf der Wurzelkante vom Wert eins im jeweiligen aktiven Knoten linear auf null im unmittelbar benachbarten aktiven Knoten ab bzw. im Wurzelkantenendknoten, falls auf der entsprechenden Seite kein aktiver Nachbarknoten existiert.* In jedem Punkt der Wurzelkante sind also maximal zwei zu den aktiven Knoten der Wurzelkante gehörende Funktionen aus Φ_a von null verschieden. Die Eigenschaft folgt durch Induktion nach dem Level. Bei nicht zulässigen Basen Θ_a gibt es Wurzelkanten, auf denen - eindimensional betrachtet - sich mehr als zwei entsprechende Funktionen mit positiven Werten überlappen können.

2. Verfügbare FE-Basis:
Die verfügbare hierarchische Basis Θ enthält im allgemeinen unstetige Funktionen und ist daher für ein bezüglich $W_2^1(\Omega)$ konformes FEM-Schema ungeeignet. Sie besitzt jedoch gegenüber der aktiven hierarchischen Basis Θ_a einen Vorteil. Werden die Basisfunktionen nur im Inneren eines verfeinerten Elementes betrachtet, d.h. „weiß man nichts“ vom möglichen unstetigen Verhalten auf den Kanten, so stellt sich während der Transformation T die Situation wie bei der gleichmäßigen hierarchischen Basis dar: Alle Eckknoten besitzen Basisfunktionen vom Level des Elementes und alle Kantenmittelknoten besitzen solche vom nächsthöheren Level, so daß die hierarchische Transformation (mit den T_i zu den Kantenmittelknoten) ein Level höher auf den vier Teildreiecken die Situation der Eckknoten reproduziert. Die verfügbare FE-Basis Ψ schließlich sieht lokal auf jedem aktuellen Element aus wie im gleichmäßigen Fall, so daß die zum Knoten $i \in \mathcal{M}$ gehörende Funktion ψ_i der verfügbaren FE-Basis wie folgt zu veranschaulichen ist: Auf allen i als Eckknoten enthaltenden aktuellen Elementen $e(i)$ fällt ψ vom Wert eins in i linear zur gegenüberliegenden Kante auf null ab, auf den übrigen aktuellen Elementen ist die Funktion identisch null. Dadurch können die von i ausgehenden Kanten Sprunglinien der Basisfunktion sein, die Funktion ist dort nicht eindeutig bestimmt. Reguläre Netzknoten i sind aber immer Stetigkeitspunkte, da sie nur als Eckknoten aktueller Elemente auftreten. Bezeichne x_j die Koordinaten des Knotens j und δ_{ij} das Kroneckersymbol, so folgt aus obigem für die Funktionen aus Ψ und daraus für Linearkombinationen der Gestalt $u(x) = \sum_{i\in\mathcal{M}} u_i\, \psi_i\,(x)$

$$\lim_{\substack{x\to x_j\\ x\in e(j)}} \psi_i\,(x) = \delta_{ij}\,, \quad i,j \in \mathcal{M}\,, \qquad \text{speziell:} \quad \psi_i\,(x_j) = \delta_{ij} \;\text{ für reguläre Knoten } j, \tag{27}$$

$$u_j = \lim_{\substack{x\to x_j\\ x\in e(j)}} u(x)\,, \qquad \text{speziell:} \quad u_j = u(x_j) \;\text{ für reguläre Knoten } j. \tag{28}$$

3. Steifigkeitsmatrix in der verfügbaren FE-Basis:
Da die verfügbare FE-Basis Ψ lokal auf jedem aktuellen Element wie im gleichmäßigen Fall aussieht, können mit ihr auch die entsprechenden Elementsteifigkeitsmatrizen berechnet werden, wegen der Unstetigkeiten auf den Elementkanten allerdings nur mit formalem Bezug

zum Modellproblem (1). Die übliche Assemblierungstechnik für lineare Dreieckselemente auf der Zerlegung E von Ω entspricht dann der Erzeugung des Gleichungssystems für ein nichtkonformes FEM-Schema mit einem durch die verfügbare Basis definierten FE-Raum und Funktionalen $\tilde{a}$, $\tilde{f}$, die Erweiterungen der Funktionale a, f auf diesen FE-Raum darstellen. Die Erweiterungen werden erzeugt durch Summation der Funktionalanteile auf den aktuellen Elementen unter Verwendung entsprechender Funktionseinschränkungen. Dieses nichtkonforme FEM-Schema wird weiter unten zur Lösung des mit der aktiven Basis definierten konformen Schemas herangezogen.

Die zur verfügbaren FE-Basis gehörende Steifigkeitsmatrix ist dabei schwach besetzt: Ein Netzknoten i besitzt auf den beiden Seiten der vom Knoten i ausgehenden Kantenlinie unterschiedliche unmittelbare Nachbarn, wenn die beiden an der Kantenlinie anliegenden aktuellen Elemente $e(i)$ unterschiedlichen Levels angehören. Beim formalen Assemblieren der Steifigkeitsmatrix in der verfügbaren FE-Basis können deshalb in Zeile i bis zu zweimal soviele Nebendiagonalelemente auftreten wie Kantenlinien vom Knoten i ausgehen, also maximal die doppelte Anzahl gegenüber der analogen Situation auf einem regulären Netz. Ist n_H die Maximalzahl unmittelbarer Nachbarknoten im Hauptnetz (Hauptknoten), so gilt wegen der regulären Verfeinerungstechnik

$$\text{Anzahl der Nebendiagonalelemente} \leq 2 * \max\{n_H, 6\}.$$

3 FEM auf irregulären hierarchischen Netzen

In diesem Abschnitt wird die Technik der FEM für die Modellaufgabe (1) behandelt

$$\overset{*}{u} \in V : \quad a(\overset{*}{u}, v) = f(v) \quad \forall v \in V ,$$

wobei die im vorangegangenen Abschnitt eingeführten ungleichmäßigen hierarchischen Basen zur Definition der FE-Räume benutzt werden. Die Modellaufgabe stehe für ein verallgemeinertes lineares elliptisches Problem zweiter Ordnung in einem polygonalen Gebiet Ω, formuliert als Variationsgleichung im Hilbertraum $V = W_2^1(\Omega)$ (bzw. analoges Herangehen, wenn V einen Teilraum von $W_2^1(\Omega)$ darstellt). Das bilineare Funktional $a(.,.) : V \times V \to \mathbf{R}^1$ sei stetig, V-elliptisch und bei den Betrachtungen zur Methode der konjugierten Gradienten auch symmetrisch, das lineare Funktional $f : V \to \mathbf{R}^1$ sei stetig.

Aus dem vorangegangenen Abschnitt geht hervor, daß die Assemblierung des FEM-Gleichungssystems in der verfügbaren FE-Basis erfolgen muß, um einen einfachen Assemblierungsalgorithmus und eine schwach besetzte Systemmatrix zu erhalten. Damit entsteht die Frage, wie das ursprüngliche, durch Verwendung der aktiven FE-Basis definierte konforme FEM-Problem gelöst werden kann, ohne dessen Gleichungssystem zu erzeugen. Im Allgemeinfall ist das möglich durch Transformation der Lösungsalgorithmen aus der aktiven in die verfügbare FE-Basis, so daß aus Sicht des Gleichungssystems in der verfügbaren FE-Basis modifizierte Algorithmen zur Lösung eines Unterraum-Problems (Projektions-Aufgabe) entstehen. Im Spezialfall [5] der engeren Definition der Aktivierbarkeit und damit der engeren Definition zulässiger Basen ist auch eine praktisch realisierbare Transformation des FEM-Gleichungssystems aus der verfügbaren in die aktive FE-Basis möglich, so daß dann Standard-Solver benutzbar sind.

Den Schwerpunkt des Abschnittes bildet ein entsprechender Lösungsalgorithmus mittels vorkonditionierter Methode der konjugierten Gradienten (PCG). Als Vorkonditionierer werden die hierarchische Vorkonditionierung nach Yserentant [14] und die BPX-Vorkonditionierung [3] betrachtet. Im ersten Fall erfordert das Unterraum-Problem im Rahmen des Algorithmus für das Gesamtproblem nur die besonders einfache Projektion des Defektes aus der verfügbaren in die aktive hierarchische Basis, im zweiten eine ähnlich einfache Modifikation.

Abschließend wird die Realisierung des Gesamtkonzeptes auf MIMD-Parallelrechnern mit verteiltem Speicher untersucht. Aus der Verwendung irregulärer FEM-Netze entstehen keine zusätzlichen Aufwendungen für die Kommunikation, der Verzicht auf zusätzliche Maßnahmen zum Erhalt der Netz-Regularität scheint aus Sicht der Parallelisierung daher einen Vorteil darzustellen.

3.1 FE-Räume und FEM-Isomorphismen

Wurde die Menge aktiver Knoten $\mathcal{M}_{(a)}$ festgelegt, so liegen auch die aktiven bzw. verfügbaren Basen fest und diese bestimmen einen konformen FE-Raum $\tilde{V}$ und einen i.a. nichtkonformen FE-Raum $\tilde{U}$

$$\tilde{V} \;=\; \tilde{V}\left(\mathcal{M}_{(a)}\right) \;=\; \operatorname{span}\Phi_a \;=\; \operatorname{span}\Theta_a \;\subset\; V \;=\; W_2^1(\Omega)\,,$$

$$\tilde{U} \;=\; \tilde{U}\left(\mathcal{M}_{(a)}\right) \;=\; \operatorname{span}\Psi \;=\; \operatorname{span}\Theta \;\not\subset\; V, \qquad \text{aber} \quad \tilde{V} \subset \tilde{U}\,.$$

Die Basisdarstellungen der Funktionen aus $\tilde{V}$ und $\tilde{U}$ mit den Koeffizientenvektoren $\underline{v}_a$, $\underline{\underline{v}}_a$, $\underline{v}$, $\underline{\underline{v}}$ entsprechend

$$\begin{aligned} \tilde{V} \ni v &= \Phi_a \underline{v}_a = \Theta_a \underline{\underline{v}}_a, \qquad && \underline{v}_a, \underline{\underline{v}}_a \in \mathbf{R}^{N_a}, \\ \tilde{U} \ni v &= \Psi\, \underline{v} \;\,= \Theta\, \underline{\underline{v}}\,, && \underline{v}, \;\underline{\underline{v}} \;\in \mathbf{R}^{N} \end{aligned}$$

definieren vier FEM-Isomorphismen zwischen $\tilde{V}$ und $\mathbf{R}^{N_a}$ bzw. $\tilde{U}$ und $\mathbf{R}^N$

$$\tilde{V} \ni v \leftrightarrow \underline{v}_a \in \mathbf{R}^{N_a}, \qquad \tilde{V} \ni v \leftrightarrow \underline{\underline{v}}_a \in \mathbf{R}^{N_a}, \qquad \tilde{U} \ni v \leftrightarrow \underline{v} \in \mathbf{R}^{N}, \qquad \tilde{U} \ni v \leftrightarrow \underline{\underline{v}} \in \mathbf{R}^{N}.$$

Werden speziell für die Funktionen aus $\tilde{V}$ die Koeffizientenvektoren $\underline{v}$, $\underline{\underline{v}}$ in den Basen von $\tilde{U}$ mit $\underline{v}_{(a)}$, $\underline{\underline{v}}_{(a)}$ bezeichnet

$$\tilde{V} \ni v \;=\; \Psi\, \underline{v}_{(a)} \;=\; \Theta\, \underline{\underline{v}}_{(a)},$$

so liefern die Basistransformationen (26), (23) und (17) nach Vergleich der Darstellungen die folgenden Zusammenhänge zwischen den Koeffizientenvektoren einer Funktion $v \in \tilde{V}$

$$\begin{tikzcd}[column sep=huge, row sep=huge]
\boxed{\Theta} & \underline{\underline{v}}_{(a)} \arrow[r, shift right, "T^{-1}"'] \arrow[d, shift right, "I_a^{\top}"'] & \underline{v}_{(a)} \arrow[l, shift right, "T"'] \arrow[d, shift right, "I_a^{\top}\, T_a^{-1}\, T"'] & \boxed{\Psi} \\
\boxed{\Theta_a} & \underline{\underline{v}}_a \arrow[u, shift right, "I_a"'] \arrow[r, shift right, "I_a^{\top}\, T_a^{-1}\, I_a"'] & \underline{v}_a \arrow[l, shift right, "I_a^{\top}\, T_a\, I_a"'] \arrow[u, shift right, "T^{-1}\, T_a\, I_a"'] & \boxed{\Phi_a}
\end{tikzcd}$$

Abbildung 7: Transformationen der Koeffizientenvektoren von $v \in \tilde{V}$

Für die linearen Funktionale über $\tilde{V}$ bzw. $\tilde{U}$ ergeben sich die entsprechenden FEM-Isomorphismen bei analoger Bezeichnungsweise aus

$$\begin{aligned} f \in \tilde{V}^* : \; f(v) &= f(\Phi_a \underline{v}_a) = \underline{f}_a^{\top} \underline{v}_a = f(\Theta_a \underline{\underline{v}}_a) = \underline{\underline{f}}_a^{\top} \underline{\underline{v}}_a \quad && \forall\, v = \Phi_a \underline{v}_a = \Theta_a \underline{\underline{v}}_a \in \tilde{V}, \\ f \in \tilde{U}^* : \; f(v) &= f(\Psi\, \underline{v}) \;\;= \underline{f}^{\top} \underline{v} \;\;= f(\Theta\, \underline{\underline{v}}) \;\;= \underline{\underline{f}}^{\top} \underline{\underline{v}} && \forall\, v = \Psi\, \underline{v} = \Theta\, \underline{\underline{v}} \in \tilde{U}. \end{aligned}$$

Bemerkung: Man denke daran, daß die zu den linearen Funktionalen isomorphen Vektoren anders transformiert werden als die Koeffizientenvektoren, und zwar mit der *transponierten Matrix der inversen Transformation.* da für lineare Funktionale $f \in \tilde{U}^*$, analog aus $\tilde{V}^*$,

$$\underline{f}^\top \underline{v} \;=\; \underline{\underline{f}}^\top \underline{\underline{v}} \;=\; \underline{\underline{f}}^\top T\, \underline{v} \;=\; (T^\top \underline{\underline{f}})^\top \underline{v} \qquad \forall\, v = \Psi\, \underline{v} = \Theta\, \underline{\underline{v}} \in \tilde{U}\,,$$

so daß

$$\underline{\underline{f}} \;=\; T^{-\top}\, \underline{f}\,, \qquad \underline{\underline{f}}_a \;=\; S_a^{-\top}\, \underline{f}_a \;=\; I_a^\top\, T_a^{-\top} I_a\, \underline{f}_a\,.$$

3.2 Zwei FEM-Schemata und deren Assemblierung

3.2.1 Konformes Schema in $\tilde{V}$

Der FE-Raum $\tilde{V} \subset V$ definiert das konforme FEM-Schema zur Modellaufgabe (1)

$$\mathring{u} \in \tilde{V}: \quad a(\mathring{u}, v) \;=\; f(v) \quad \forall v \in \tilde{V}\,. \tag{29}$$

Werden die zur aktiven FE-Basis Φ_a gehörende Steifigkeitsmatrix K_a und rechte Seite $\underline{f}_a$ eingeführt

$$\begin{aligned} (K_a\, \underline{u}_a)^\top\, \underline{v}_a &= a(\Phi_a\, \underline{u}_a,\, \Phi_a\, \underline{v}_a) \qquad && \forall \underline{u}_a\,,\, \underline{v}_a \in \mathbf{R}^{N_a}\,, \\ \underline{f}_a^\top\, \underline{v}_a &= f(\Phi_a\, \underline{v}_a) && \forall \underline{v}_a \in \mathbf{R}^{N_a}\,, \end{aligned}$$

so ergibt sich für $\mathring{u} = \Phi_a\, \underline{\mathring{u}}_a$ das zugehörige FEM-Gleichungssystem

$$\underline{\mathring{u}}_a \in \mathbf{R}^{N_a}: \quad K_a\, \underline{\mathring{u}}_a = \underline{f}_a\,. \tag{30}$$

3.2.2 Nichtkonformes Schema in $\tilde{U}$

Die beiden Funktionale a, f seien bezüglich Ω additiv in der Form, daß sie als Summe elementbezogener bilinearer bzw. linearer Funktionale a_e, f_e über $W_2^1(e)$ dargestellt werden können

$$a(u,v) \;=\; \sum_{e\in E} a_e(u_e, v_e) \;=:\; \tilde{a}(u,v)\,,$$

$$f(v) \;=\; \sum_{e\in E} f_e(v_e) \;=:\; \tilde{f}(v)\,,$$

wobei u_e, v_e die Einschränkungen von u, v auf $e \in E$ bedeuten. Diese Darstellung ist zumindest bei Funktionalen möglich, die durch Integration von Ausdrücken der Funktionen und ihrer Ableitungen über Ω erklärt sind. Die durch die Summenschreibweise erklärten Funktionale $\tilde{a}, \tilde{f}$ sind in $\tilde{V}$ zu a, f äquivalent, jedoch im Gegensatz zu a, f auch in $\tilde{U}$ definiert, so daß in $\tilde{U}$ mit ihnen das bereits früher erwähnte nichtkonforme Schema für die Modellaufgabe (1) definiert werden kann

$$\tilde{u} \in \tilde{U}: \quad \tilde{a}(\tilde{u}, v) \;=\; \tilde{f}(v) \quad \forall v \in \tilde{U}\,. \tag{31}$$

Werden hier analog die zur verfügbaren FE-Basis Ψ gehörende Steifigkeitsmatrix K und rechte Seite $\underline{f}$ eingeführt

$$\begin{aligned} (K\,\underline{u})^\top\,\underline{v} &= \tilde{a}(\Psi\,\underline{u},\,\Psi\,\underline{v}) \qquad \forall \underline{u}\,,\,\underline{v} \in \mathbf{R}^N\,,\\ \underline{f}^\top\,\underline{v} &= \tilde{f}(\Psi\,\underline{v}) \qquad\qquad \forall \underline{v} \in \mathbf{R}^N\,, \end{aligned}$$

so ergibt sich für $\tilde{u} = \Psi\,\underline{\tilde{u}}$ das zugehörige FEM-Gleichungssystem

$$\underline{\tilde{u}} \in \mathbf{R}^N : \quad K\,\underline{\tilde{u}} = \underline{f}\,. \tag{32}$$

K_a ist positiv definit und bei Symmetrie von a auch symmetrisch. Analoges gilt für die - wie bereits erläutert - einfach zu assemblierende Steifigkeitsmatrix K, wenn sich V-Elliptizität bzw. Symmetrie von a auf $\tilde{a}$ übertragen.

3.2.3 Zusammenhang der Gleichungssysteme beider Schemata

Aus den Definitionen der Basen in (20), (21) und (23) folgt der Zusammenhang zwischen der aktiven FE-Basis Φ_a und der verfügbaren FE-Basis Ψ

$$\Phi_a = \Phi\,I_a = \Theta\,T_a\,I_a = \Psi\,T^{-1}\,T_a\,I_a = \Psi\,Q \qquad \text{mit} \quad Q = T^{-1}\,T_a\,I_a\,. \tag{33}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} (K_a\,\underline{u}_a)^\top\,\underline{v}_a &= a(\Phi_a\,\underline{u}_a,\,\Phi_a\,\underline{v}_a) = \tilde{a}(\Phi_a\,\underline{u}_a,\,\Phi_a\,\underline{v}_a) = \tilde{a}(\Psi\,Q\,\underline{u}_a,\,\Psi\,Q\,\underline{v}_a)\\ &= (KQ\,\underline{u}_a)^\top\,Q\,\underline{v}_a = (Q^\top KQ\,\underline{u}_a)^\top\underline{v}_a\,, \end{aligned}$$

das ergibt für die Steifigkeitsmatrizen und eine analog Rechnung für die rechten Seiten

$$K_a = Q^\top\,K\,Q\,, \qquad \underline{f}_a = Q^\top\,\underline{f}\,.$$

Wird die Transformation Q durch Anwendung von T^{-1} und T_a realisiert, bildet die Darstellung in der verfügbaren hierarchischen Basis Θ ein Zwischenstadium. Insbesondere bei der Transformation der Steifigkeitsmatrix aus der verfügbaren in die aktive FE-Basis ist deshalb zwischenzeitlich mit einer starken Aufweitung des erforderlichen Speicherplatzes zu rechnen. Wenn es jedoch gelingt, die in T_a enthaltenen Transformationen $T_{i,a}$ mittels ihrer Inversen aus T^{-1} zu neutralisieren, entschärft sich dieses Problem weitgehend. Nur dann scheint es zweckmäßig zu sein, das FEM-Gleichungssystem in der aktiven FE-Basis Φ_a durch Transformation des Systems aus der verfügbaren FE-Basis Ψ zu erzeugen und dann zu lösen.

Die Neutralisierung der $T_{i,a}$ ist auf jeden Fall dann möglich, wenn die Aktivierbarkeit passiver Knoten in dem bereits erwähnten engeren Sinne [5] so definiert wird, daß *beide* Vaterknoten aktiv sein müssen; die Vielfalt möglicher aktiver Basen wird hierdurch allerdings eingeschränkt. In diesem Falle gilt $T_{i,a} = T_i$ für $i \in \mathcal{M}_{(a)}$, und die T_i, $i \in \mathcal{M}_{(a)}$, sind mit allen T_j, $j \in \mathcal{M}_{(p)}$, vertauschbar, wenn j von niedrigerem Level oder vom gleichen Level wie i ist. Dann lassen sich in T die elementaren Transformationen zu aktiven und passiven Knoten separieren:

$$\begin{aligned} T &= \left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,a}} T_i\right)\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,p}} T_i\right)\cdots\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,a}} T_i\right)\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,p}} T_i\right) \\ &= \left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,a}} T_i\right)\cdots\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,a}} T_i\right)\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,p}} T_i\right)\cdots\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,p}} T_i\right), \end{aligned}$$

so daß T darstellbar ist als

$$\begin{aligned} T &= T_a\,T_p \qquad (\text{i.a.} \neq T_p\,T_a) \quad \text{mit} \\ T_a &= \left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,a}} T_i\right)\cdots\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,a}} T_i\right) = \left(\prod_{\substack{i\in\mathcal{M}_{(a)}\\ V(i)\prec i}} T_i\right), \\ T_p &= \left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,p}} T_i\right)\cdots\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,p}} T_i\right) = \left(\prod_{\substack{i\in\mathcal{M}_{(p)}\\ V(i)\prec i}} T_i\right). \end{aligned}$$

Die Transformation Q erfordert dann nur noch die elementaren Transformationen in den passiven Knoten

$$Q = (T_a\,T_p)^{-1}\,T_a\,I_a = T_p^{-1}\,I_a = \left(\prod_{\substack{i\in\mathcal{M}_{(p)}\\ i\prec V(i)}} T_i^{-1}\right) I_a\,. \tag{34}$$

Wird jedoch die Aktivierbarkeit der Knoten nicht in obigem engeren Sinne definiert, werden also auch passive Väter bei aktiven Knoten zugelassen, so ist wegen $T_i = T_{i,a}\,T_{i,p}$ von folgender, sich aus (24) ergebender Darstellung auszugehen:

$$T^{-1} = \left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,p}} T_i^{-1}\right)\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,a}} T_{i,p}^{-1}\right)\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{J,a}} T_{i,a}^{-1}\right)\cdots\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,p}} T_i^{-1}\right)\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,a}} T_{i,p}^{-1}\right)\left(\prod_{i\in\mathcal{M}_{1,a}} T_{i,a}^{-1}\right).$$

Für die Neutralisierung der $T_{i,a}$, $i \in \mathcal{M}_{(a)}$, in $Q = T^{-1}T_a\,I_a$ müßten sämtliche dieser Faktoren aus T_a unter Beibehaltung ihrer Reihenfolge nach links bis zu den $T_{i,a}^{-1}$ tauschbar sein. Der Tausch vorbei an den T_j^{-1}, $j \in \mathcal{M}_{(p)}$, mit j von niedrigerem Level als i ist möglich, da j kein aktiver Vater von i ist. Der Tausch vorbei an $T_{j,p}^{-1}$, $j \in \mathcal{M}_{(a)}$, mit j von niedrigerem Level als i ist jedoch genau dann nicht möglich, wenn j Vater von i und $T_{j,p} \neq I$ ist, der aktive Vater j von i also selbst einen passiven Vater k besitzt. Wird die Vertauschung trotzdem vorgenommen, so erfolgt eine Transformation der Basisfunktion von

k mit einer vorfristig transformierten Funktion von j. Der Fehler in der Basistransformation Q wirkt sich dann nicht nur auf die Basisfunktion des passiven Vaters aus, die später mit I_a beseitigt wird, sondern auch auf wenigstens eine Basisfunktion eines aktiven Knotens, da im Sinne des Transformationsgraphen jeder Knoten irgendwelche aktiven Vorfahren besitzt, zumindest entsprechende Hauptknoten.

Ein Hindernis für die systematische Neutralisierung aller $T_{i,a}$, $i \in \mathcal{M}_{(a)}$, in $Q = T^{-1} T_a I_a$ ist somit jeder Fall, in dem ein aktiver Knoten sowohl einen aktiven Sohnknoten als auch einen passiven Vaterknoten besitzt. Das Auftreten solcher Fälle kann letzten Endes nur durch obige engere Definition der Aktivierbarkeit verhindert werden, vom Zulassen passiver Väter auf dem jeweils obersten Level aktiver Knoten abgesehen.

Schlußfolgerung: Wird die Aktivierbarkeit der Knoten im engeren Sinne von [5] definiert, dann nimmt die Transformation Q die einfachere Gestalt (34) an und die Erzeugung des FEM-Gleichungssystems (30) in der aktiven FE-Basis Φ_a durch Transformation des Systems aus der verfügbaren FE-Basis Ψ ist relativ problemlos möglich. Insbesondere kann die Steifigkeitsmatrix bei einer $V(i) \prec i$ erfüllenden Knotennumerierung nach folgendem einfachen Algorithmus transformiert werden, die rechte Seite analog,

$$
\begin{aligned}
K^{(N)} &= K\,, \\
K^{(i)} &= \begin{cases} K^{(i+1)} & \text{für i aktiv,} \\ T_i^{-\top} K^{(i+1)}\, T_i^{-1} & \text{für i passiv,} \end{cases} \qquad i = N-1(-1)1\,, \\
K_a &= I_a^{\top} K^{(1)}\, I_a\,.
\end{aligned}
$$

Als Spezialfall von [5] kann auch das Vorgehen in [1], [2] betrachtet werden, wo irreguläre Knoten nur einzeln auf der Kante zwischen zwei aktiven Knoten zugelassen werden, so daß sämtliche Knoten positiven Levels zwei aktive Väter besitzen.

Wird die Aktivierbarkeit wie in der vorliegenden Arbeit definiert, so muß von der allgemeinen Gestalt (33) ausgegangen werden, die eine Transformation der Steifigkeitsmatrix i.a. nicht empfiehlt, so daß für die Berechnung der FEM-Näherungslösung das Gleichungssystem (32) in der verfügbaren FE-Basis Ψ auf geeignete Weise zu nutzen ist.

3.3 Realisierung der Methode der konjugierten Gradienten

3.3.1 PCG-Algorithmus für das $\tilde{V}$-Problem

Das FEM-Gleichungssystem (30) des konformen FEM-Problems (29) in $\tilde{V}$ werde mit einer vorkonditionierten Methode der konjugierten Gradienten (PCG) gelöst. Es sei $C_a \in \mathbf{R}^{N_a \times N_a}$ eine geeignete Vorkonditionierungsmatrix, $\underline{u}_a^0 \in \mathbf{R}^{N_a}$ ein Startvektor, etwa der Nullvektor, und mit $\hat{}$ werden die neuen Iterierten gekennzeichnet. $\varepsilon > 0$ sei ein Abbruchparameter, der den relativen Fehlerverminderungsfaktor in der energetischen Norm von $K_a\, C_a^{-1}\, K_a$ darstellt. Ein üblicher PCG-Algorithmus ist dann der folgende.

Start:

$$
\begin{array}{lcl}
\underline{u}_a & = & \underline{u}_a^0 \\
\underline{r}_a & = & K_a\, \underline{u}_a - \underline{f}_a \\
\underline{w}_a & = & C_a^{-1}\, \underline{r}_a \\
\sigma & = & \sigma_0 \; = \; \underline{r}_a^\top\, \underline{w}_a \\
\underline{s}_a & = & \underline{w}_a
\end{array}
$$

Iteration:

$$
\begin{array}{llcll}
1. & \underline{v}_a & = & K_a\, \underline{s}_a & \\
2. & \delta & = & \underline{v}_a^\top\, \underline{s}_a\,, & \alpha = -\sigma/\delta \\
3. & \hat{\underline{u}}_a & = & \underline{u}_a + \alpha\, \underline{s}_a & \\
4. & \hat{\underline{r}}_a & = & \underline{r}_a + \alpha\, \underline{v}_a & \\
5. & \hat{\underline{w}}_a & = & C_a^{-1}\, \hat{\underline{r}}_a & \\
6. & \hat{\sigma} & = & \hat{\underline{r}}_a^\top\, \hat{\underline{w}}_a\,, & \beta = \hat{\sigma}/\sigma \\
7. & \hat{\underline{s}}_a & = & \hat{\underline{w}}_a + \beta\, \underline{s}_a & \\
8. & \hat{\sigma} & \le & \varepsilon^2\, \sigma_0 \quad ? & \\
 & \text{nein} & \Rightarrow & \text{zu } 1. \text{ mit} & \\
 & & & \underline{u}_a := \hat{\underline{u}}_a\,,\; \underline{r}_a := \hat{\underline{r}}_a\,,\; \underline{s}_a := \hat{\underline{s}}_a\,,\; \sigma := \hat{\sigma} & \\
 & \text{ja} & \Rightarrow & \text{Abbruch:} \quad \hat{\underline{u}}_a \text{ ist Näherung für } \underline{\mathring{u}}_a &
\end{array}
$$

Abbildung 8: PCG für das konforme FEM-Problem in der Basis Φ_a

3.3.2 PCG-Algorithmus für das $\tilde{V}$-Problem in der FE-Basis von $\tilde{U}$

Soll die Lösung des konformen FEM-Problems (29) in $\tilde{V}$ mittels PCG ermittelt werden, ohne das zugehörige FEM-Gleichungssystem (30) zu erzeugen, so bietet es sich an, den PCG-Algorithmus für (30) in die Basisdarstellung bezüglich Ψ zu transformieren, so daß das einfach zu assemblierende Gleichungssystem (32) genutzt werden kann.

Start:

$$\begin{array}{lcll}
\underline{u}_{(a)} & = & Q\,\underline{u}^0_a & \\
\underline{r} & = & K\,\underline{u}_{(a)} - \underline{f} & \\
\underline{w}_{(a)} & = & R\,\underline{r} & \text{mit} \quad R = Q\,C_a^{-1}\,Q^\top \\
\sigma & = & \sigma_0 \;=\; \underline{r}^\top\,\underline{w}_{(a)} & \\
\underline{s}_{(a)} & = & \underline{w}_{(a)} &
\end{array}$$

Iteration:

$$\begin{array}{llcll}
1. & \underline{v} & = & K\,\underline{s}_{(a)} & \\
2. & \delta & = & \underline{v}^\top\,\underline{s}_{(a)}\,, & \alpha = -\sigma/\delta \\
3. & \underline{\hat{u}}_{(a)} & = & \underline{u}_{(a)} + \alpha\,\underline{s}_{(a)} & \\
4. & \underline{\hat{r}} & = & \underline{r} \quad + \alpha\,\underline{v} & \\
5. & \underline{\hat{w}}_{(a)} & = & R\,\underline{\hat{r}} & \\
6. & \hat{\sigma} & = & \underline{\hat{r}}^\top\,\underline{\hat{w}}_{(a)}\,, & \beta = \hat{\sigma}/\sigma \\
7. & \underline{\hat{s}}_{(a)} & = & \underline{\hat{w}}_{(a)} + \beta\,\underline{s}_{(a)} & \\
8. & \hat{\sigma} & \leq & \varepsilon^2\,\sigma_0 \quad ? & \\
 & \text{nein} & \Rightarrow & \text{zu 1. mit} & \\
 & & & \underline{u}_{(a)} := \underline{\hat{u}}_{(a)}\,,\; \underline{r}_{(a)} := \underline{\hat{r}}_{(a)}\,,\; \underline{s}_{(a)} := \underline{\hat{s}}_{(a)}\,,\; \sigma := \hat{\sigma} & \\
 & \text{ja} & \Rightarrow & \text{Abbruch:} & \\
 & & & \underline{\hat{u}}_a = I_a^\top\,T_a^{-1}\,T\,\underline{\hat{u}}_{(a)} \;\text{ ist Näherung für }\; \underline{\mathring{u}}_a &
\end{array}$$

Abbildung 9: PCG für das konforme FEM-Problem in der Basis Ψ

Dieser transformierte Algorithmus ergibt sich aus folgenden Überlegungen. Anstelle der Koeffizientenvektoren $\underline{u}_a$, $\underline{w}_a$, $\underline{s}_a$ werden ihre Bilder nach Abb. 7

$$\underline{u}_{(a)} = Q\,\underline{u}_a\,, \qquad \underline{w}_{(a)} = Q\,\underline{w}_a\,, \qquad \underline{s}_{(a)} = Q\,\underline{s}_a$$

verwendet, 3. und 7. haben dann mit diesen Vektoren eine analoge Gestalt, auch der Startvektor ist zu transformieren. Die für Funktionale stehenden Vektoren $\underline{r}_a$, $\underline{v}_a$ werden durch

$$\underline{r} = K\,\underline{u}_{(a)} - \underline{f}, \qquad \underline{v} = K\,\underline{s}_{(a)}$$

ersetzt, so daß $\underline{r}_a = Q^\top \underline{r}$, $\underline{v}_a = Q^\top \underline{v}$ gilt. Schritt 4. kann dann mittels einer analogen Formulierung für $\underline{r}$, $\underline{v}$ dargestellt werden. Für die Skalarprodukte folgt

$$\sigma = \underline{r}_a^\top \underline{w}_a = (Q^\top \underline{r})^\top \underline{w}_a = \underline{r}^\top \underline{w}_{(a)}, \qquad \delta = \underline{v}_a^\top \underline{s}_a = \underline{v}^\top \underline{s}_{(a)}.$$

Der Vektor $\underline{\hat{w}}_{(a)}$ berechnet sich mit der Matrix $R = Q\,C_a^{-1}\,Q^\top$ aus

$$\underline{\hat{w}}_{(a)} = Q\,\underline{\hat{w}}_a = Q\,C_a^{-1}\,Q^\top\,\underline{\hat{r}} = R\,\underline{\hat{r}}.$$

Dies zusammen liefert den zum Algorithmus aus Abb. 8 äquivalenten PCG-Algorithmus der Abb. 9.

Die Transformationen von Start- und Abbruchvektor im Algorithmus der Abb. 9 vollziehen nur den Basiswechsel von Φ_a zu Ψ durch Übergang von $\mathbf{R}^{N_a}$ zu $Q\,\mathbf{R}^{N_a} \subset \mathbf{R}^N$ bzw. umgekehrt. Die Transformation des Startvektors ist trivial, wenn $\underline{u}_a^0$ der Nullvektor ist. Für die Interpretation der Abbruchiterierten, insbesondere für auf den aktuellen Elementen arbeitende Visualisierungstechniken, ist die Darstellung $\underline{\hat{u}}_{(a)}$ in der verfügbaren FE-Basis wegen der Eigenschaft (27) sogar besser geeignet als die Darstellung $\underline{\hat{u}}_a$ in der aktiven FE-Basis.

Somit unterscheidet sich der PCG für das Gleichungssystem (30) *des konformen FEM-Schemas in der Basis* Φ_a *bei Darstellung in der Basis* Ψ *vom PCG für das Gleichungssystem* (32) *des nichtkonformen FEM-Schemas in der gleichen Basis im wesentlichen nur durch den spezifisch zusammengesetzten Operator zur Realisierung der Vorkonditionierung*

$$R = Q\,C_a^{-1}\,Q^\top = T^{-1}\,T_a\,I_a\,C_a^{-1}\,I_a^\top\,T_a^\top\,T^{-\top}, \tag{35}$$

mit dem auch das Verbleiben der Iterierten $\underline{u}_{(a)}$, $\underline{w}_{(a)}$, $\underline{s}_{(a)}$ in $Q\,\mathbf{R}^{N_a}$ abgesichert wird. Die Umsetzung des Operators R soll für die Yserentant- und die BPX-Vorkonditionierung noch genauer betrachtet werden.

3.3.3 Hierarchische Vorkonditionierung in der FE-Basis von $\tilde{U}$

Die hierarchische Vorkonditionierung nach Yserentant für das Gleichungssystem (30) wird analog zu [14] definiert, und zwar mit der Basistransformationsmatrix S_a als

$$C_a = S_a^\top\,S_a. \tag{36}$$

Wegen der Vertauschbarkeit von P_a mit T_a ist

$$\begin{aligned} C_a &= I_a^\top\,T_a^\top\,I_a\,I_a^\top\,T_a\,I_a = I_a^\top\,T_a^\top\,P_a\,T_a\,I_a \\ &= I_a^\top\,T_a^\top\,T_a\,P_a\,I_a \quad = I_a^\top\,T_a^\top\,T_a\,I_a \end{aligned}$$

und analog

$$C_a^{-1} = S_a^{-1}\,S_a^{-\top} = I_a^\top\,T_a^{-1}\,T_a^{-\top}\,I_a. \tag{37}$$

Ausführlich geschrieben bedeutet dies

$$C_a^{-1} \;=\; I_a^\top \left(\prod_{\substack{i \in \mathcal{M}_{(a)} \\ i \prec V(i)}} T_{i,a}^{-1} \right) \left(\prod_{\substack{i \in \mathcal{M}_{(a)} \\ V(i) \prec i}} T_{i,a}^{-\top} \right) I_a \,. \tag{38}$$

Zum Vergleich: die entsprechende hierarchische Vorkonditionierung C des Gleichungssystems (32) für das nichtkonforme Schema führt auf

$$C^{-1} \;=\; T^{-1}\, T^{-\top} \,. \tag{39}$$

Für die Realisierung der Vorkonditionierung C_a im PCG der Abb. 9 ergibt sich

$$\begin{aligned} R \;&=\; T^{-1}\, T_a\, I_a\, (I_a^\top\, T_a^{-1}\, T_a^{-\top}\, I_a)\, I_a^\top\, T_a^\top\, T^{-\top} \\ &=\; T^{-1}\, T_a\, P_a\, T_a^{-1}\, T_a^{-\top}\, P_a\, T_a^\top\, T^{-\top} \\ &=\; T^{-1}\, P_a\, T_a\, T_a^{-1}\, T_a^{-\top}\, T_a^\top\, P_a\, T^{-\top} \,, \end{aligned}$$

$$R \;=\; T^{-1}\, P_a\, T^{-\top} \;=\; \left(\prod_{\substack{i \in \mathcal{M} \\ i \prec V(i)}} T_i^{-1} \right) P_a \left(\prod_{\substack{i \in \mathcal{M} \\ V(i) \prec i}} T_i^{-\top} \right) . \tag{40}$$

Damit ist der PCG für das Gleichungssystem (30) *des konformen FEM-Schemas in der Basis* Φ_a *bei Verwendung der hierarchischen Vorkonditionierung* (36) *äquivalent zum PCG für das Gleichungssystem* (32) *des nichtkonformen FEM-Schemas in der Basis* Ψ *bei Verwendung der zugehörigen hierarchischen Vorkonditionierung mit zwischengeschalteter Projektion* P_a *und bei entsprechend transformiertem Startvektor.*

Der Projektor P_a hat dabei eine extrem einfache Gestalt, bei der Projektion sind nur die Koeffizienten in den passiven Knoten auf null zu setzen.

Bemerkung: Das Ergebnis gilt auch bei Einbeziehung eines Grobgitter-Lösers unverändert. Dieser werde durch Invertierung einer Block-Diagonalmatrix dargestellt, die als ersten Block die Steifigkeitsmatrix des Hauptnetzes oder eine geeignete Näherung dafür enthält und als zweiten und gleichzeitig letzten Diagonalblock eine Einheitsmatrix. Beim nichtkonformen Schema sei dies die Matrix $K^0 \in \mathbf{R}^{N\times N}$, dem entspricht beim konformen Schema - da alle Hauptknoten auch aktive sind - die Matrix $K_a^0 \;=\; I_a^\top\, K^0\, I_a \in \mathbf{R}^{N_a\times N_a}$. Dann folgt

$$C = T^\top\, K^0\, T\,, \qquad C_a = S_a^\top\, K_a^0\, S_a\,,$$

$$C^{-1} \;=\; T^{-1}\, (K^0)^{-1}\, T^{-\top}\,, \quad C_a^{-1} \;=\; I_a^\top\, T_a^{-1}\, (K^0\,)^{-1}\, T_a^{-\top}\, I_a\,, \quad R \;=\; T^{-1}\, (K^0\,)^{-1}\, P_a\, T^{-\top} \,.$$

3.3.4 BPX-Vorkonditionierung in der FE-Basis von $\tilde{U}$

Bei der BPX-Vorkonditionierung [3] stellt sich die Situation ähnlich dar wie bei der hierarchischen. Zunächst müssen jedoch einige Bezeichnungen eingeführt werden, die nur im Zusammenhang mit der BPX-Vorkonditionierung notwendig sind.

Hierarchische Transformationen des Levels k bzw. bis zum Level j:

$$\begin{aligned} T_{(k)} &= \prod_{i\in\mathcal{M}_k} T_i\,, & T_{(k,a)} &= \prod_{i\in\mathcal{M}_{k,a}} T_{i,a}\,, & k &= 1(1)J\,,\\ T^{(j)} &= T_{(1)}\ldots T_{(j)}\,, & T_a^{(j)} &= T_{(1,a)}\ldots T_{(j,a)}\,, & j &= 1(1)J\,. \end{aligned}$$

Matrizen $I^{(j)}$, $I_a^{(j)}$ der Basiseinschränkung auf die Knoten bzw. aktiven Knoten bis Level j: diejenigen Matrizen, die aus $I \in \mathbf{R}^{N\times N}$ entstehen durch Streichen der Spalten zu allen Knoten des Levels größer als j bzw. zusätzlich zu den passiven Knoten. Insbesondere gilt $I^{(J)} = I$, $I_a^{(J)} = I_a$, die Matrizen $(I^{(j)})^\top I^{(j)}$ und $(I_a^{(j)})^\top I_a^{(j)}$ sind Einheitsmatrizen.

$$P^{(j)} = I^{(j)}\,(I^{(j)})^\top\,, \qquad P_a^{(j)} = I_a^{(j)}\,(I_a^{(j)})^\top = P_a\,P^{(j)} = P^{(j)}\,P_a\,, \qquad j = 0(1)J\,,$$

sind Diagonalmatrizen und stellen wie $P_a = P_a^{(J)}$ Projektoren in $\mathbf{R}^{N\times N}$ dar mit analogen Eigenschaften: $P^{(j)}$ ist mit T_i, T_i^{-1} für $i \in \mathcal{M}_k$, $k \le j$, vertauschbar und somit auch vertauschbar mit $T^{(k)}$, $(T^{(k)})^{-1}$, $(T^{(k)})^\top$, $(T^{(k)})^{-\top}$ für $k \le j$. Gleiches gilt für $P_a^{(j)}$ bezüglich $T_{i,a}$, $T_{i,a}^{-1}$, $i \in \mathcal{M}_{k,a}$, sowie $T_a^{(k)}$, $(T_a^{(k)})^{-1}$, $(T_a^{(k)})^\top$, $(T_a^{(k)})^{-\top}$, falls $k \le j$. Offenbar ist auch

$$P^{(k)}\,P^{(j)} = P^{(j)}\,P^{(k)} = P^{(k)}\,, \quad P_a^{(k)}\,P_a^{(j)} = P_a^{(j)}\,P_a^{(k)} = P_a^{(k)} \qquad \text{für } k \le j\,.$$

Verfügbare hierarchische Basis bis Level j: $\quad \Theta^{(j)} = \Theta\, I^{(j)}$,

Aktive hierarchische Basis bis Level j: $\quad \Theta_a^{(j)} = \Theta\, I_a^{(j)}$,

Verfügbare FE-Basis des Levels j: $\quad \Psi^{(j)} = \Theta\, T^{(j)}\, I^{(j)}$,

Aktive FE-Basis des Levels j: $\quad \Phi_a^{(j)} = \Theta\, T_a^{(j)}\, I_a^{(j)}$, $\qquad j = 0(1)J$.

Für die zugehörigen Basistransformationen $\Phi_a^{(j)} = \Theta_a^{(j)}\, S_a^{(j)}$ gilt dann

$$S_a^{(j)} = (I_a^{(j)})^\top\, T_a^{(j)}\, I_a^{(j)}\,, \qquad (S_a^{(j)})^{-1} = (I_a^{(j)})^\top\, (T_a^{(j)})^{-1}\, I_a^{(j)}\,.$$

BPX-Vorkonditionierung:
Diese werde analog zum Fall der gleichmäßigen hierarchischen Basen definiert, wobei die Matrix $G_a^{(j)}$ der Erzeugung der aktiven FE-Basis $\Phi_a^{(j)}$ aus der aktiven FE-Basis $\Phi_a^{(J)} = \Phi_a$ Verwendung findet

$$C_a^{-1} = \sum_{j=0}^{J} G_a^{(j)}\,(G_a^{(j)})^\top.$$

Die Einbeziehung des Grobgitter-Lösers kann analog zum hierarchischen Vorkonditionierer erfolgen, indem $(I_a^{(0)})^\top\,(K^0)^{-1}\,I_a^{(0)}$ zwischen $G_a^{(0)}$ und $(G_a^{(0)})^\top$ geschaltet wird. Matrix $G_a^{(j)}$ ergibt sich aus folgender Rechnung in naheliegender Gestalt

$$\begin{aligned} \Phi_a^{(j)} &= \Theta_a^{(j)}\, S_a^{(j)} = \Theta\, P_a^{(j)}\, T_a^{(j)}\, I_a^{(j)} = \Phi\, T_a^{-1}\, P_a^{(J)}\, P_a^{(j)}\, T_a^{(j)}\, I_a^{(j)}\\ &= \Phi\, P_a\, T_a^{-1}\, T_a^{(j)}\, P_a^{(j)}\, I_a^{(j)} = \Phi_a\, I_a^\top\, T_a^{-1}\, T_a^{(j)}\, I_a^{(j)} = \Phi_a\, G_a^{(j)}\,,\\ G_a^{(j)} &= I_a^\top\, T_a^{-1}\, T_a^{(j)}\, I_a^{(j)} = I_a^\top\, T_{(J,a)}^{-1}\ldots T_{(j+1,a)}^{-1}\, I_a^{(j)}. \end{aligned}$$

Dann ist

$$C_a^{-1} \;=\; I_a^\top \left(\sum_{j=0}^{J} T_{(J,a)}^{-1} \ldots T_{(j+1,a)}^{-1} \; P_a^{(j)} \; T_{(j+1,a)}^{-\top} \ldots T_{(J,a)}^{-\top} \right) I_a \,. \tag{41}$$

Zum Vergleich: die entsprechende BPX-Vorkonditionierung C des Gleichungssystems (32) für das nichtkonforme Schema führt mit der Matrix $T^{-1}\, T^{(j)}\, I^{(j)}$ der Erzeugung der verfügbaren FE-Basis $\Psi^{(j)}$ aus der verfügbaren FE-Basis $\Psi^{(J)} = \Psi$ auf

$$C^{-1} \;=\; \sum_{j=0}^{J} T_{(J)}^{-1} \ldots T_{(j+1)}^{-1} \; P^{(j)} \; T_{(j+1)}^{-\top} \ldots T_{(J)}^{-\top} \,. \tag{42}$$

Realisierung der BPX-Vorkonditionierung in der Basis Ψ:
Die Darstellung (35) der Vorkonditionierung in der Basis Ψ liefert für (41) wegen der Vertauschbarkeit von $P_a = P_a^{(J)}$ mit allen $T_{(j,a)}^{-1}$, $T_{(j,a)}^{-\top}$ und wegen $P_a\, P_a^{(j)}\, P_a = P_a^{(j)}$

$$R \;=\; T^{-1}\, T_a \left(\sum_{j=0}^{J} T_{(J,a)}^{-1} \ldots T_{(j+1,a)}^{-1} \; P_a^{(j)} \; T_{(j+1,a)}^{-\top} \ldots T_{(J,a)}^{-\top} \right) T_a^\top\, T^{-\top} \,.$$

Je nach vorliegenden Eigenschaften der Basis empfehlen sich unterschiedliche Umformungen für eine effiziente Realisierung von R. Dabei wird immer von einer geklammerten Organisation der Summenabarbeitung derart ausgegangen, daß jeder Operator $T_{(k,a)}^{-1}$, $T_{(k,a)}^{-\top}$ usw. bei der Berechnung der Summe nur einmal auszuführen ist.

a) Allgemeinfall: Die Umformung mittels $T_a = T_{(1,a)} \ldots T_{(J,a)}$ führt zu

$$R \;=\; T^{-1} \left(\sum_{j=0}^{J} T_{(1,a)} \ldots T_{(j,a)} \; P_a^{(j)} \; T_{(j,a)}^\top \ldots T_{(1,a)}^\top \right) T^{-\top} \,. \tag{43}$$

Die Anwendung von R erfordert neben der Akkumulation der Summanden einen Aufwand äquivalent zu zwei Transformationen T und zwei Transformationen T_a.

b) Spezialfall 1: $T = T_a$
Dies gilt für $\mathcal{M} = \mathcal{M}_{(a)}$, d.h. wenn das Netz keine passiven Knoten enthält. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit betrifft das nur die gleichmäßigen hierarchischen Basen, allgemeiner auch Verfeinerungstechniken mit anderem Herangehen auf regulären Netzen. Dann folgt

$$R \;=\; C^{-1} \,,$$

der Aufwand neben der Akkumulation über die Levels ist äquivalent zu nur noch zwei hierarchischen Transformationen T.

c) Spezialfall 2: $T = T_a\, T_p$
bei Aktivierbarkeit im engeren Sinn, wie sie in [5] benutzt wurde (alle aktivierbare Knoten haben zwei aktive Väter, vgl. Seite 37).

$$R \;=\; T_p^{-1} \left(\sum_{j=0}^{J} T_{(J,a)}^{-1} \ldots T_{(j+1,a)}^{-1} \; P_a^{(j)} \; T_{(j+1,a)}^{-\top} \ldots T_{(J,a)}^{-\top} \right) T_p^{-\top} \,.$$

Auch hier ist der Aufwand neben der Akkumulation äquivalent zu zwei Transformationen T, jedoch sind diese getrennt nach aktiven und passiven Knoten zu organisieren.

Die höhere geometrische Variabilität im Allgemeinfall der hier benutzten ungleichmäßigen hierarchischen Basen muß also durch einen zusätzlichen Aufwand bei der BPX-Vorkonditionierung erkauft werden, der zu zwei Transformationen T_a pro Iterationsschritt äquivalent ist. Dieser zusätzliche arithmetische Aufwand ist möglicherweise reduzierbar, indem mit zusätzlichem organisatorischen Aufwand geklärt wird, welche elementaren Transformationsmatrizen T_i, $i \in \mathcal{M}_{(a)}$, in (43) bis zu ihren Inversen vertauscht werden können.

3.3.5 PCG-Variante für das $\tilde{V}$-Problem bei relativ vielen passiven Knoten

Der PCG-Algorithmus benötigt (abgesehen von inneren Erfordernissen der jeweiligen Vorkonditionierung) Speicherplatz für 4 Vektoren sowie pro Iteration einen arithmetischen Aufwand von 1 Multiplikation {Matrix $*$ Vektor}, 2 Skalarprodukten und 3 linearen Vektor-Aufdatierungen der Gestalt {Vektor + Skalar $*$ Vektor}. Bei Transformation des PCG für (30) in die Basisdarstellung von Ψ gehören alle Vektoren dem $\mathbf{R}^N$ an, so daß die Dimension N für den Aufwand an Speicherplatz und arithmetischen Operationen maßgeblich ist. Gegenüber dem ursprünglichen PCG in $\mathbf{R}^{N_a}$ entsteht durch die Transformation des gesamten PCG ein redundanter Aufwand, der allein durch die Absicht motiviert ist, das einfach zu assemblierende, eine schwach besetzte Matrix aufweisende System (32) zu benutzen.

Unterscheiden sich N und N_a wesentlich, also bei relativ vielen passiven Knoten, empfiehlt sich daher ein modifizierter PCG-Algorithmus. Bei diesem wird nur die Multiplikation {Matrix $*$ Vektor} (bzw. die Berechnung des Startresiduums) in der Basisdarstellung von Ψ, also im $\mathbf{R}^N$ ausgeführt, die übrigen Operationen werden jedoch im $\mathbf{R}^{N_a}$ belassen. Um unnötigen Transformationsaufwand zu vermeiden, ist es zweckmäßig, die aufzudatierenden Vektoren in der hierarchischen Basis Θ_a zu führen. Diese Darstellung bildet sowieso eine Zwischenstation bei der hierarchischen und der BPX-Vorkonditionierung. Die Transformation in die aktive FE-Basis Φ_a während des Iterationsprozesses ist unnötig, nur die Startnäherung wird praktischerweise in dieser Darstellung eingesetzt und bei Bedarf die Abbruchiterierte dahin zurücktransformiert. Für die Visualisierung der Abbruchiterierten ist allerdings die Darstellung in der Basis Ψ wegen der Eigenschaft (28) besser geeignet.

Der PCG aus Abb. 8 ist somit folgendermaßen zu verändern. Koeffizientenvektoren und Funktionale werden in die aktive hierarchische Basis transformiert

$$\underline{\underline{u}}_a = S_a \underline{u}_a , \quad \underline{\underline{w}}_a = S_a \underline{w}_a , \quad \underline{\underline{s}}_a = S_a \underline{s}_a , \qquad \underline{\underline{r}}_a = S_a^{-\top} \underline{r}_a , \quad \underline{\underline{v}}_a = S_a^{-\top} \underline{v}_a .$$

Außerdem ist

$$Q\, S_a^{-1} \;=\; T^{-1} T_a I_a I_a^\top T_a^{-1} I_a \;=\; T^{-1} T_a P_a T_a^{-1} I_a \;=\; T^{-1} I_a ,$$

$$\underline{\underline{v}}_a \;=\; S_a^{-\top} K_a S_a^{-1} \underline{\underline{s}}_a \;=\; S_a^{-\top} Q^\top K\, Q\, S_a^{-1} \underline{\underline{s}}_a \;=\; I_a^\top T^{-\top} K\, T^{-1} I_a \underline{\underline{s}}_a ,$$

$$\underline{\underline{r}}_a \;=\; S_a^{-\top}(K_a S_a^{-1} \underline{\underline{u}}_a - \underline{f}_a) \;=\; S_a^{-\top} Q^\top (K\, Q\, S_a^{-1} \underline{\underline{u}}_a - \underline{f}) \;=\; I_a^\top T^{-\top} (K\, T^{-1} I_a \underline{\underline{u}}_a - \underline{f}).$$

Start:

$$
\begin{array}{lcl@{\qquad\qquad}rcl}
\underline{\underline{u}}_a & = & I_a^\top T_a \, I_a \, \underline{u}_a^0 & \underline{u}_{(a)} & = & T^{-1} I_a \, \underline{\underline{u}}_a \\
\underline{r} & = & K \, \underline{u}_{(a)} - \underline{f} & \underline{\underline{r}}_a & = & I_a^\top T^{-\top} \, \underline{r} \\
\underline{\underline{w}}_a & = & \bar{R}_a \, \underline{\underline{r}}_a & \text{mit} \quad \bar{R}_a & = & I_a^\top T \, R \, T^\top I_a \\
\sigma & = & \sigma_0 \; = \; \underline{\underline{r}}_a^\top \, \underline{\underline{w}}_a & & & \\
\underline{\underline{s}}_a & = & \underline{\underline{w}}_a & & &
\end{array}
$$

Iteration:

$$
\begin{array}{llcl}
1.a & \underline{s}_{(a)} & = & T^{-1} I_a \, \underline{\underline{s}}_a \\
1.b & \underline{v} & = & K \, \underline{s}_{(a)} \\
1.c & \underline{\underline{v}}_a & = & I_a^\top T^{-\top} \, \underline{v} \\
2. & \delta & = & \underline{\underline{v}}_a^\top \, \underline{\underline{s}}_a \, , \qquad\qquad \alpha \; = \; -\sigma/\delta \\
3. & \hat{\underline{\underline{u}}}_a & = & \underline{\underline{u}}_a + \alpha \, \underline{\underline{s}}_a \\
4. & \hat{\underline{\underline{r}}}_a & = & \underline{\underline{r}}_a + \alpha \, \underline{\underline{v}}_a \\
5. & \hat{\underline{\underline{w}}}_a & = & \bar{R}_a \, \hat{\underline{\underline{r}}}_a \\
6. & \hat{\sigma} & = & \hat{\underline{\underline{r}}}_a^\top \, \hat{\underline{\underline{w}}}_a \, , \qquad\qquad \beta \; = \; \hat{\sigma}/\sigma \\
7. & \hat{\underline{\underline{s}}}_a & = & \hat{\underline{\underline{w}}}_a + \beta \, \underline{\underline{s}}_a \\
8. & \hat{\sigma} & \leq & \varepsilon^2 \, \sigma_0 \quad ? \\
 & \text{nein} & \Rightarrow & \text{zu } 1.a \text{ mit} \\
 & & & \underline{\underline{u}}_a := \hat{\underline{\underline{u}}}_a \, , \;\; \underline{\underline{r}}_a := \hat{\underline{\underline{r}}}_a \, , \;\; \underline{\underline{s}}_a := \hat{\underline{\underline{s}}}_a \, , \;\; \sigma := \hat{\sigma} \\
 & \text{ja} & \Rightarrow & \text{Abbruch:} \\
 & & & \hat{\underline{u}}_a \; = \; I_a^\top \, T_a^{-1} \, I_a \, \hat{\underline{\underline{u}}}_a \;\; \text{ist Näherung für } \mathring{\underline{u}}_a
\end{array}
$$

Abbildung 10: PCG-Variante bei relativ vielen passiven Knoten

Die Skalarprodukte bleiben bei der Transformation in die aktive hierarchische Basis invariant, die Vorkonditionierung führt auf

$$\underline{\underline{w}}_a \; = \; S_a \, C_a^{-1} \, S_a^\top \, \underline{\underline{r}}_a \; = \; \bar{R}_a \, \underline{\underline{r}}_a$$

mit

$$\bar{R}_a \; = \; S_a \, C_a^{-1} \, S_a^\top \; = \; I_a^\top T_a \, I_a \, C_a^{-1} I_a^\top T_a^\top I_a \; = \; I_a^\top \bar{R} \, I_a \, , \quad \bar{R} \; = \; T \, R \, T^\top \, .$$

Bei entsprechender Berücksichtigung von Start und Abbruch ergibt sich damit der zu den Algorithmen aus Abb. 8 und 9 äquivalente Algorithmus von Abb. 10. Für die Visualisierung der Abbruchiterierten ist die Darstellung in Basis Ψ zu erzeugen

$$\underline{\hat{u}}_{(a)} \;=\; T^{-1}\, I_a\, \underline{\underline{\hat{u}}}_a\,.$$

Gegenüber dem ursprünglichen PCG wurde nur die Multiplikation {Matrix $*$ Vektor} in den $\mathbf{R}^N$ verlagert, alle anderen Operationen außerhalb 1. laufen im $\mathbf{R}^{N_a}$ ab. Wegen $\bar{R} \;=\; T\,R\,T^\top$ sind die hierarchischen Transformationen in 1.a und 1.c nur aus der Vorkonditionierung ausgelagert und stellen keinen zusätzlichen Aufwand dar. Aus (40) und (43) folgt für die hierarchische Vorkonditionierung, hier mit Grobgitterlöser,

$$\bar{R}_a \;=\; I_a^\top (K^0)^{-1}\, P_a\, I_a \;=\; (K_a^0)^{-1}$$

und für die BPX-Vorkonditionierung

$$\bar{R}_a \;=\; I_a^\top \left(\sum_{j=0}^{J} T_{(1,a)} \,\ldots\, T_{(j,a)}\; P_a^{(j)}\; T_{(j,a)}^\top \,\ldots\, T_{(1,a)}^\top \right) I_a\,.$$

Neben dem Speicherplatz für die drei Vektoren $\underline{\underline{u}}_a\,,\; \underline{\underline{r}}_a\,,\; \underline{\underline{s}}_a \in \mathbf{R}^{N_a}$ wird Platz für die beiden Vektoren $\underline{s}_{(a)}\,,\; \underline{v} \in \mathbf{R}^N$ benötigt, die Transformationen 1.a und 1.c sind innerhalb dieses Speicherplatzes ausführbar, auch $\underline{\underline{\hat{w}}}_a$ kann den Platz von $\underline{v}$ nutzen. Verglichen mit dem PCG in Basis Ψ reduziert sich also die Länge dreier der vier Vektoren von N auf N_a, zusätzlich zu $\underline{\underline{s}}_a$ ist jedoch der Vektor $\underline{s}_{(a)}$ abzuspeichern, wofür ggf. innerhalb der Vorkonditionierung $\bar{R}_a$ genutzter weiterer Speicher eingesetzt werden kann.

3.4 Parallelisierung auf MIMD-Rechnern

Zur Lösung großdimensionierter FE-Gleichungssysteme bietet sich der Einsatz leistungsfähiger Parallelrechner an. Es soll deshalb abschließend untersucht werden, welche speziellen Konsequenzen die Realisierung der betrachteten FEM-Technik auf *MIMD-Parallelrechnern* mit verteiltem Speicher hat, deren Prozessoren durch Austausch von Botschaften miteinander kommunizieren.

3.4.1 Nichtüberlappendes FEM-Parallelisierungskonzept

Als grundlegendes Parallelisierungsprinzip bezüglich Geometrie und Daten wird die Zerlegung des Gesamtgebietes Ω in paarweise disjunkte Teilgebiete $\Omega_s,\ s=1(1)p$,

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{s=1}^{p} \overline{\Omega}_s, \qquad \Omega_s \cap \Omega_t = \emptyset \quad \text{für} \quad s \neq t,$$

und deren Abbildung auf die p Prozessoren P_s entsprechend $\overline{\Omega}_s \to P_s,\ s=1(1)p$, vorausgesetzt, wobei die Teilgebiete Ω_s separat so vernetzt werden, daß das resultierende Netz in Ω regulär ist. Dies liefert eine Verteilung der Elemente und der N Knoten des FEM–Netzes auf die Prozessoren, auf gleiche Weise werden auch die Knotenwerte der FE-Ansatzfunktionen auf die Prozessoren aufgeteilt, das heißt die Koordinaten x_i von Vektoren $\underline{x} \in \mathbf{R}^N$ usw. Anwendungen dieser Technik der Gebietszerlegung findet man zum Beispiel in [10], [8], [7].

Eine effektive Implementierung der schnellen Lösungsalgorithmen für die zugehörigen FE-Gleichungssysteme erfordert, grundlegende Vektoroperationen (vor allem Skalarprodukt, Matrix mal Vektor) unter Ausnutzung der Datenverteilung weitgehend lokal zu realisieren, das heißt durch voneinander unabhängige Operationen auf den einzelnen Prozessoren und mit möglichst wenig zusätzlicher Kommunikation zwischen den Prozessoren. Probleme entstehen durch Knoten (und damit Knotenwerte), die sich im Besitz mehrerer Prozessoren befinden, sogenannte *Koppelknoten*.

Das für diese Problematik von Meyer [10] entwickelte Konzept beruht auf zwei unterschiedlichen *lokalen Speichertypen* von Vektoren, die einerseits den Vektoren der Unbekannten entsprechen (Typ I: Näherungen, Korrekturen, Suchrichtungen), andererseits den linearen Funktionalen in der Variationsformulierung des diskreten Problems (Typ II: rechte Seiten, Defekte). Während Vektoren vom Typ I auf den Prozessoren in allen Knoten die zugehörigen Knotenwerte enthalten und demzufolge in den Koppelknoten kompatibel sein müssen, werden Vektoren vom Typ II so gespeichert, daß sie zwar in den Nicht-Koppelknoten (*innere Knoten*) die zugehörigen Knotenwerte enthalten, in den Koppelknoten jedoch nur additive Anteile dieser Werte. Die korrekten Werte in jedem Koppelknoten und damit der Übergang vom Typ II zum Typ I ergeben sich erst durch Aufsummieren der Anteile der am jeweiligen Koppelknoten beteiligten Prozessoren.

Skalarprodukte zwischen Vektoren vom Typ II und solchen vom Typ I können als anteilige lokale Skalarprodukte auf den einzelnen Prozessoren realisiert werden, die dann in einer Kommunikation über die Prozessoren zu addieren sind. Multiplikationen {Systemmatrix $*$ Vektor} und Residuen-Berechnungen lassen sich verteilt durch entsprechende rein lokale Rechnungen auf den Prozessoren realisieren, wenn der zu multiplizierende Vektor als Typ I gespeichert ist und lokale Systemmatrizen und rechte Seiten auf den einzelnen Prozessoren durch den üblichen Assemblierungsprozeß erzeugt wurden, jedoch bezogen auf das lokale Teilgebiet Ω_s. Dies alles erfolgt ohne Kommunikation, das Produkt bzw. das Residuum hat den Typ II. Das lineare Aufdatieren von Vektoren in der Gestalt {Vektor + Skalar $*$ Vektor} ist innerhalb jedes Typs lokal, also ohne Kommunikation ausführbar.

Für die Realisierung von Multilevel-Vorkonditionierern ist wesentlich, daß die Multiplikation mit elementaren Transformationsmatrizen T_i^{-1} innerhalb des Typs I und mit ihren Transponierten $T_i^{-\top}$ innerhalb des Typs II ohne Kommunikation funktioniert. Dadurch wird aber sowohl während der hierarchischen als auch der BPX-Vorkonditionierung ein Typwechsel von II zu I und damit Kommunikation notwendig. Insgesamt erfordert eine derartige parallele PCG-Realisierung also pro Iterationsschritt zwei Kommunikationen für die Skalarprodukte und eine für den Typwechsel während der Vorkonditionierung (sogar bei $C = I$!), während die vorangehende Assemblierung des verteilten FE-Gleichungssystems kommunikationsfrei erfolgt. Das Konzept von Meyer wurde in [4] systematisch weiter aufbereitet, einen Schwerpunkt stellt dort die Herleitung notwendiger und hinreichender Bedingungen für die lokale Realisierbarkeit der Multiplikation {Matrix $*$ Vektor} dar.

Die Übertragung dieses Parallelisierungskonzeptes auf die dargestellte Technik irregulärer hierarchischer Netze ist unproblematisch. Nachfolgend sollen die Konsequenzen einer solchen Übertragung beleuchtet werden. Das betrifft einerseits die Assemblierung des FEM-Gleichungssystems und den PCG-Lösungsalgorithmus entsprechend Abb. 9 oder 10 in einer festen Basis mit zugehörigem Netz, andererseits den Prozeß der Bewertung und des Veränderns von Basis und Netz im Rahmen des früher formulierten Konzeptes der Adaption.

3.4.2 Datenverteilung bei irregulären hierarchischen Netzen

Auch bei den irregulären Netzen finde die Verteilung der Daten auf die Prozessoren dadurch statt, daß die Daten (z.B. Beschreibungen von Knoten und Kanten, Stoffdaten) an die Elemente gekoppelt sind und mit diesen entsprechend der Gebietszerlegung den Prozessoren zugeordnet werden. Mit $\langle A \rangle_s$ werde dabei diejenige Teilmenge einer Menge A bezeichnet, die auf Prozessor P_s verfügbar ist. Die Startsituation und damit die verwendete Gebietszerlegung sei durch eine Verteilung der Hauptelemente e (abgeschlossen!) auf die Prozessoren P_s beschrieben

$$\overline{\Omega}_s = \bigcup_{e \in \langle \mathcal{E}_0 \rangle_s} e \, ,$$

umgekehrt stellt dann $\langle \mathcal{E}_0 \rangle_s$ eine Zerlegung von Ω_s dar. Bei dynamischer Lastverteilung bilden die Elemente aus $\mathcal{E}_0$, wie früher betont, die Migrationseinheiten, die dann mit sämtlichen an sie gekoppelten Informationen von Prozessor zu Prozessor verschoben werden können.

Genauer formuliert, verfüge jeder Prozessor P_s in der Startsituation und nach jeder Änderung der Basis über folgende Informationen zu Basis und Netz:
1. die anteilige Menge aktiver Knoten

$$\left\langle \mathcal{M}_{(a)} \right\rangle_s = \mathcal{M}_{(a)} \cap \overline{\Omega}_s \, , \tag{44}$$

2. das zur aktiven Knotenmenge (44) *gehörende, aus der Startzerlegung* $\langle \mathcal{E}_0 \rangle_s$ *von* Ω_s *erzeugte lokale hierarchische Netz.*
Werden dessen entsprechende Elemente-, Kanten- und Knotenmengen bezeichnet als

$$\langle \mathcal{E} \rangle_s \, , \, \langle E \rangle_s \, , \, \langle \mathcal{K} \rangle_s \, , \, \langle \mathcal{M} \rangle_s \, , \, \left\langle \widetilde{\mathcal{M}} \right\rangle_s \, ,$$

so verfüge Prozessor P_s also über die hierarchischen Strukturen

$$G_{\mathcal{E}}[\langle \mathcal{E} \rangle_s] \, , \quad G_{\mathcal{K}}[\langle \mathcal{K} \rangle_s] \, , \quad G_{\mathcal{N}}[\langle \mathcal{M} \rangle_s] \, , \quad \hat{G}_{\mathcal{N}}[\langle \mathcal{M} \rangle_s] \, .$$

Da die Definition der Elemente und aktuellen Elemente eines ungleichmäßigen hierarchischen Netzes rekursiv über das Vorhandensein aktiver Knoten im Inneren und auf dem Rand von Elementen erfolgt (vgl. Seite 19), muß wegen (44) das Vorgehen bei der Erzeugung des lokalen Netzes auf P_s mit dem Vorgehen in $\overline{\Omega}_s$ bei der nichtparallelisierten Vernetzung von Ω übereinstimmen, so daß

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{E} \rangle_s &= \{ e \in \mathcal{E} \mid e \subset \overline{\Omega}_s \} \, , \\ \langle E \rangle_s &= \{ e \in E \mid e \subset \overline{\Omega}_s \} \, . \end{aligned}$$

Diese Übereinstimmung auf $\overline{\Omega}_s$ betrifft jedoch nur die Elemente, denn zum lokalen Netz auf P_s gehören *nicht* solche Objekte und entsprechende Teilstrukturen auf dem Rand von Ω_s, die allein durch den Nachbarprozessor bzw. dessen Elemente veranlaßt wurden. Das sind passive Knoten und zugehörige Teilkanten, die nur durch Elementverfeinerungen des Nachbarprozessors entstehen, etwa durch neue aktive innere Knoten im Teilgebiet des Nachbarprozessors initiiert. Es kann also nur gelten

$$\langle\mathcal{K}\rangle_s \subset \{k \in \mathcal{K} \mid k \subset \overline{\Omega}_s\}\,, \qquad \langle\mathcal{M}\rangle_s \subset \mathcal{M} \cap \overline{\Omega}_s\,, \qquad \left\langle\widetilde{\mathcal{M}}\right\rangle_s \subset \widetilde{\mathcal{M}} \cap \overline{\Omega}_s\,.$$

3.4.3 Paralleles Assemblieren und parallele PCG-Iteration

Zunächst werde das parallele Lösen des FEM-Gleichungssystems (30) mittels PCG-Algorithmus aus Abb. 9 oder 10 bei fester Basis untersucht. Gegenüber dem Vorgehen auf dem regulären Netz gibt es keine wesentlichen Änderungen.

Assemblieren des FE-Gleichungssystems:
Es sind die Systemmatrix K und die rechte Seite $\underline{f}$ auf die Prozessoren verteilt zu assemblieren. Dieses lokale Assemblieren in der verfügbaren FE-Basis Ψ geschieht auf Prozessor P_s mit der üblichen Technik unter Verwendung der lokalen Menge aktueller Elemente $\langle E\,\rangle_s$ und damit auch hier *ohne Kommunikation.*

PCG-Iteration:
Die Verwendung der Speichertypen I und II für die Vektoren erfolgt völlig analog zur Vorgehensweise auf dem regulären Netz, unabhängig davon, in welcher Basis die Vektoren dargestellt sind, also

$$\begin{array}{llll} \text{Typ I} & : \quad \underline{u}_{(a)}\,,\ \underline{s}_{(a)}\,,\ \underline{w}_{(a)} & \text{bzw.} & \underline{\underline{u}}_a\,,\ \underline{\underline{s}}_a\,,\ \underline{s}_{(a)}\,,\ \underline{\underline{w}}_a \\ \text{Typ II} & : \quad \underline{r}\,,\ \underline{v} & \text{bzw.} & \underline{\underline{r}}_a\,,\ \underline{\underline{v}}_a\,,\ \underline{v} \end{array}$$

Entsprechend werden pro Iterationsschritt wieder zwei globale Kommunikationen zum Aufsummieren der lokalen Skalarprodukte notwendig sowie eine Kommunikation mit den Nachbarprozessoren zum Typwechsel von II zu I während der hierarchischen oder BPX-Vorkonditionierung. Letztere ist eine *Kommunikation nur über die Werte in den aktiven Koppelknoten!* Beim Algorithmus von Abb. 9 gilt das, weil in der hierarchischen Basis alle Werte in den passiven Knoten sowieso annulliert werden (Projektoren P_a bzw. $P_a^{(j)}$), beim Algorithmus von Abb. 10, weil der entsprechende Typwechsel vor oder nach der Anwendung von $\bar{R}_a$ stattfinden muß.

3.4.4 Paralleles Verändern von Basis und Netz

Nun werde das parallelisierte Verändern von Basis und Netz im Rahmen des Konzeptes der Adaptivität aus 2.6.1 betrachtet. Parallelisierung bedeute auch hier – wie beim PCG-Algorithmus – die exakte Realisierung eines zunächst rechnerunabhängig formulierten Vorgehens auf dem Parallelrechner. Die entscheidende Frage beim Übergang zu einer neuen

Basis mit der aktiven Knotenmenge $\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$ ist die korrekte Aktualisierung der Information (44) über den Anteil aktiver Knoten auf jedem Prozessor P_s, d.h. die Gewährleistung von

$$\left\langle \mathcal{M}^\diamond_{(a)} \right\rangle_s = \mathcal{M}^\diamond_{(a)} \cap \overline{\Omega}_s . \tag{45}$$

Dabei steht $\mathcal{M}^\diamond_{(a)}$ im Falle der Basiserweiterung bzw. Basiseinschränkung für

$$\mathcal{M}^\diamond_{(a)} = \mathcal{M}_{(a)} \cup \Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)}, \quad \Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)} \subset \Delta\mathcal{M}^+_{(a)} \qquad \text{bzw.} \tag{46}$$

$$\mathcal{M}^\diamond_{(a)} = \mathcal{M}_{(a)} \setminus \Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)}, \quad \Delta\mathcal{M}^\diamond_{(a)} \subset \Delta\mathcal{M}^-_{(a)} . \tag{47}$$

Sobald die Information (45) auf Prozessor P_s vorliegt, bereitet die *Aktualisierung des lokalen hierarchischen Netzes auf* Ω_s kein Problem und ist *ohne weitere Kommunikation* nur durch lokale Anwendung von Elementverfeinerungs- bzw. -vergröberungsregel realisierbar. Die Erzeugung der Information (45) erfolgt in Teilschritten.

a) Feststellung der aktivierbaren bzw. deaktivierbaren Knoten:
Diese Knoten beschreiben den zulässigen Bereich beim Steuern der Basisänderung. Das Ziel des Teilschrittes besteht darin, die lokalen Mengen aktivierbarer bzw. deaktivierbarer Knoten so zu erzeugen, daß

$$\left\langle \Delta\mathcal{M}^+_{(a)} \right\rangle_s = \Delta\mathcal{M}^+_{(a)} \cap \overline{\Omega}_s \qquad \text{bzw.} \qquad \left\langle \Delta\mathcal{M}^-_{(a)} \right\rangle_s = \Delta\mathcal{M}^-_{(a)} \cap \overline{\Omega}_s . \tag{48}$$

Basiserweiterung:
Durch die hierarchische Netzkonstruktion gehören Kantenmittelknoten immer gemeinsam mit ihrer Kante und damit ihren beiden Vätern zu $\overline{\Omega}_s$, die ein oder zwei aktiven Väter eines aktivierbaren Knotens aus $\overline{\Omega}_s$ liegen daher in $\left\langle \mathcal{M}_{(a)} \right\rangle_s$. Daraus folgt einerseits, daß diese aktiven Väter Eckknoten aktueller Elemente aus $\langle E \rangle_s$ sind, bei Verwendung von 6-Knoten-Dreiecken sind die aktivierbaren Knoten aus $\overline{\Omega}_s$ also bereits auf P_s vorhanden, zumindest als Kantenmittelknoten eines aktuellen Elementes aus $\langle E \rangle_s$,

$$\Delta\mathcal{M}^+_{(a)} \cap \overline{\Omega}_s \subset \left\langle \widetilde{\mathcal{M}} \right\rangle_s .$$

Andererseits folgt aus der Verfügbarkeit der aktiven Väter auf P_s, daß die (48) entsprechende lokale Menge aktivierbarer Knoten $\left\langle \Delta\mathcal{M}^+_{(a)} \right\rangle_s$ in der lokalen Menge aller Elementknoten $\left\langle \widetilde{\mathcal{M}} \right\rangle_s$ ohne Kommunikation feststellbar ist, und zwar mit dem Algorithmus aus der Bemerkung 3. auf der Seite 24.

Basiseinschränkung:
Die deaktivierbaren Knoten aus $\overline{\Omega}_s$ gehören zu der lokalen Menge aktiver Knoten $\left\langle \mathcal{M}_{(a)} \right\rangle_s$ und sind deshalb auf P_s vorhanden, es ist jedoch nicht möglich, sie in dieser Menge ohne Kommunikation festzustellen. Bei der Prüfung auf Deaktivierbarkeit muß geklärt werden, ob die Nachfolger eines aktiven Knotens im Knoten-Verfeinerungsgraphen alle passiv sind. Da die Nachfolger von Koppelknoten, die keine Hauptknoten sind, in der Regel auf zwei benachbarten Prozessoren liegen, kann dies nur durch Kommunikation mit den Nachbarn geschehen. Jeder beteiligte Prozessor informiert dabei den Nachbarn, wenn aus

seiner Sicht Einwände gegen die Deaktivierung irgendwelcher Koppelknoten aus $\mathcal{M}_{(a)}$ bestehen, d.h. wenn auf dem Prozessor wenigstens ein aktiver Nachfolger vorliegt. Einwände dieser Art und damit Kommunikation tritt nur zu den Koppelknoten aus $\mathcal{M}^-_{(a)} \subset \mathcal{M}_{(a)}$ auf. Danach ist auf jedem Prozessor die (48) entsprechende Menge deaktivierbarer Knoten $\left\langle \Delta\mathcal{M}^-_{(a)} \right\rangle_s \subset \left\langle \mathcal{M}_{(a)} \right\rangle_s$ bekannt.

b) Bewertung der aktivierbaren bzw. deaktivierbaren Knoten:
In diesen Knoten werden zugehörige Werte von Fehlerschätzern ermittelt, die Eingangsinformationen für die Fehlersteuerung darstellen, und zwar einerseits zum Erfassen der globalen Fehlersituation, andererseits als lokale Entscheidungsgrößen für die Aktivierung oder Deaktivierung der Knoten. Da sämtliche aktivierbaren und deaktivierbaren Knoten Kantenmittelknoten sind, können die ihnen zugeordneten Fehlerschätzer auch als kantenorientierte Fehlerschätzer betrachtet werden.

Basiserweiterung:
Nach der Konzeption aus 2.6.1 sollen als Fehlerschätzer für die Basiserweiterung die Residuen der FEM-Lösung mit den hierarchischen Basisfunktionen aus $\Theta_a(\Delta\mathcal{M}^+_{(a)})$ als Testfunktionen verwendet werden. Diese lassen sich als Koordinaten des Residuums des FEM-Gleichungssystems in der aktiven hierarchischen Basis $\Theta_a(\mathcal{M}^+_{(a)})$ darstellen. Zur Berechnung dieses Residuums sind analog zum PCG-Algorithmus die Steifigkeitsmatrix und die rechte Seite in der verfügbaren FE-Basis zur Menge aktiver Knoten $\mathcal{M}^+_{(a)}$ zu assemblieren, d.h. auf der Knotenmenge $\mathcal{M}^+$. Die Residuumsberechnung kann dann analog parallelisiert werden wie für die Menge aktiver Knoten $\mathcal{M}_{(a)}$, mit entsprechend verteilter Speicherung von Matrix und rechter Seite, Speicherung des Koeffizientenvektors der FEM-Lösung als Typ I und rein lokaler Erzeugung des Residuums als Typ II. Vor der Residuumsberechnung ist die FEM-Lösung in die Basis $\Psi(\mathcal{M}^+_{(a)})$ zu transformieren, danach das Residuum in die Basis $\Theta_a(\mathcal{M}^+_{(a)})$, beides ist lokal realisierbar. Damit die Werte der Fehlerschätzer auch in den Koppelknoten aus $\Delta\mathcal{M}^+_{(a)}$ korrekt erzeugt werden, ist ein Typwechsel des Residuums von II zu I nötig, zumindest für die Fehlerschätzer-Knoten. Das erfordert eine Kommunikation mit den Nachbarprozessoren über die Koppelknoten aus $\Delta\mathcal{M}^+_{(a)}$.

Basiseinschränkung:
Bei Basiseinschränkung könnte analog die Nutzbarkeit der Residuen der auf span $\{\Theta_a(\mathcal{M}^-_{(a)})\}$ eingeschränkten FEM-Lösung untersucht werden, wobei die hierarchischen Basisfunktionen zu $\Delta\mathcal{M}^-_{(a)}$ als Testfunktionen zu verwenden wären. Für die Berechnung der korrekten Fehlerschätzer wäre entsprechend eine Kommunikation mit den Nachbarprozessoren über die Koppelknoten aus $\Delta\mathcal{M}^-_{(a)} \subset \mathcal{M}_{(a)}$ nötig. Diese Kommunikation und diejenige aus *a)* zur Übermittlung von Einwänden gegen die Deaktivierung können zu einer einzigen Kommunikation über die Koppelknoten aus $\mathcal{M}_{(a)}$ zusammengefaßt werden, wenn die Nicht-Deaktivierbarkeit durch eine überhöhte Größe des Fehlerschätzers klar gekennzeichnet werden kann.

c) Ermittlung und Verteilung der globalen Steuerinformationen
Die dem Adaptionsprozeß zugrunde liegende Fehlerverminderungsstrategie wird als entsprechend begründeter Teilalgorithmus realisiert, der schrittweise die Menge der aktiven Knoten und damit den zugehörigen FE-Raum verändert. Dieser Algorithmus ist abhängig von

anfangs festzulegenden Steuerinformationen, die allen Prozessoren durch globale Kommunikation bekanntzugeben sind, z.B. auf den Prozessoren verfügbarer Speicherplatz, Verteilung des Hauptnetzes auf die Prozessoren, Steuerparameter der Lösungsalgorithmen für die FEM-Gleichungssysteme. Nach jedem Adaptionsschritt wird für die berechnete FEM-Näherung mittels der Fehlerschätzer die globale Fehlersituation in verteilter Form ermittelt. Wesentliche Charakteristika dieser Situation werden nun mittels einer globalen Kommunikation auf allen Prozessoren übereinstimmend erzeugt, z.B. Abschätzungen globaler Fehlernormen, Informationen über die Fehlerverteilung durch Einordnung der Fehlerschätzerwerte in ein absolutes Raster. Aus diesen globalen Fehler-Charakteristika und den bisherigen globalen Steuerinformationen werden durch übereinstimmende lokale Rechnung neue globale Steuerinformationen für die anstehende Basisänderung erzeugt, insbesondere global einheitliche Toleranzparameter für die nächste Aktivierung bzw. Deaktivierung von Knoten.

d) Aktivierungs- bzw. Deaktivierungsentscheidung
Mittels der in Koppelknoten übereinstimmend berechneten Fehlerschätzer und der einheitlichen Toleranzparameter wird auf den einzelnen Prozessoren lokal, aber kompatibel entschieden, welche Knoten

$$\left\langle \Delta\mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \right\rangle_s \subset \left\langle \Delta\mathcal{M}^{+}_{(a)} \right\rangle_s \qquad \text{bzw.} \qquad \left\langle \Delta\mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \right\rangle_s \subset \left\langle \Delta\mathcal{M}^{-}_{(a)} \right\rangle_s$$

tatsächlich aktiviert bzw. deaktiviert werden sollen, und diese Entscheidung ist umzusetzen, so daß

$$\left\langle \mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \right\rangle_s = \left\langle \mathcal{M}_{(a)} \right\rangle_s \cup \left\langle \Delta\mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \right\rangle_s \qquad \text{bzw.} \qquad \left\langle \mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \right\rangle_s = \left\langle \mathcal{M}_{(a)} \right\rangle_s \setminus \left\langle \Delta\mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \right\rangle_s \tag{49}$$

die neue lokale Menge aktiver Knoten bildet und die neue Basis damit bestimmt ist.
Wegen der Kompatibilität in den Koppelknoten ist

$$\Delta\mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \;=\; \bigcup_{s=1}^{p} \left\langle \Delta\mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \right\rangle_s$$

die zugehörige globale Menge, für welche gilt

$$\left\langle \Delta\mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \right\rangle_s \;=\; \Delta\mathcal{M}^{\diamond}_{(a)} \cap \overline{\Omega}_s \,. \tag{50}$$

Aus (49), (44), (50) und (46) bzw. (47) folgt dann die Gewährleistung von (45). Damit kann schließlich das lokale Netz auf P_s aktualisiert werden.

Zusammenfassung:
Die dargestellte Parallelisierung der Veränderung von Basis und Netz ist realisierbar mittels
– *einer Kommunikation mit den Nachbarprozessoren*, und zwar über die Koppelknoten aus
  $\Delta\mathcal{M}^{+}_{(a)}$ bei Basiserweiterung (Residuen-Fehlerschätzer) bzw. aus
  $\mathcal{M}_{(a)}$ bei Basiseinschränkung (Einwände gegen Deaktivierung, Residuen-Fehlerschätzer),
– *einer globalen Kommunikation* zur Verbreitung der Fehler-Charakteristika.

Literatur

[1] Becker, R.: *An Adaptive Finite Element Method for the Incompressible Navier-Stokes Equations on Time-dependent Domains.* Preprint 95-44 des SFB 359 „Reaktive Strömungen, Diffusion und Transport“ an der Universität Heidelberg, 1995.

[2] Becker, R., Rannacher, R.: *Weighted A Posteriori Error Control in FE Methods.* Preprint 96-1 des SFB 359 an der Universität Heidelberg, 1996.

[3] Bramble, J.H., Pasciak, J.E., Xu, J.: *Parallel multilevel preconditioners.* Mathematics of Computation, 55(191):1-22, 1990.

[4] Groh, U.: *Lokale Realisierung von Vektoroperationen auf Parallelrechnern.* Preprint SPC 94_2, Preprint–Reihe der Chemnitzer DFG-Forschergruppe „Scientific Parallel Computing“, Techn. Univ. Chemnitz 1994.

[5] Groh, U.: *Ein technologisches Konzept zur Erzeugung adaptiver hierarchischer Netze für FEM-Schemata.* Preprint SPC 95_6, Preprint–Reihe der Chemnitzer DFG-Forschergruppe „Scientific Parallel Computing“, Techn. Univ. Chemnitz 1995.

[6] Groh, U.: *FEM auf irregulären hierarchischen Dreiecksnetzen.* In: Proceedings, Workshop über „Parall. wiss. Rechnen in FEM und BEM“, Chemnitz, 27.09. – 30.09.1995

[7] Groh, U., Meinel, S., Meyer, A.: *On the Numerical Simulation of Coupled Transient Problems on MIMD Parallel Systems.* In: W. Hackbusch, G. Wittum (Hrsg.), Fast Solvers for Flow Problems, Proceedings of the Tenth GAMM–Seminar Kiel, January 14–16, 1994, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 49, Vieweg 1995.

[8] Haase, G., Langer, U., Meyer, A.: *Parallelisierung und Vorkonditionierung des CG – Verfahrens durch Gebietszerlegung.* In: G. Bader, R. Rannacher, G. Wittum (Hrsg.); Numerische Algorithmen auf Transputersystemen, Teubner-Skripten zur Numerik, Teubner–Verlag, Stuttgart 1993.

[9] Leinen, P.: *Ein schneller adaptiver Löser für elliptische Randwertprobleme auf Seriell- und Parallelrechnern.* Dissertation, Universität Dortmund, 1990.

[10] Meyer, A.: *A parallel preconditioned conjugate gradient method using domain decomposition and inexact solvers on each subdomain.* Computing, 45:217-234, 1990.

[11] Oswald, P.: *Multilevel Finite Element Approximation: Theory and Applications.* Teubner, Stuttgart, 1994.

[12] Rüde, U.: *Mathematical and Computational Techniques for Multilevel Adaptive Methods.* Series: Frontiers in Applied Mathematics, Vol. 13, SIAM, Philadelphia, 1993.

[13] Verfürth, R.: *A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh refinement techniques.* Report, Inst. f. Angew. Mathem., Univ. Zürich, 1993

[14] Yserentant, H.: *On the multilevel-splitting of finite element spaces.* Numer. Math., *49*, 379–412 (1986).

Other titles in the SFB393 series:

96-01 V. Mehrmann, H. Xu. Chosing poles so that the single-input pole placement problem is well-conditioned. Januar 1996.

96-02 T. Penzl. Numerical solution of generalized Lyapunov equations. January 1996.

96-03 M. Scherzer, A. Meyer. Zur Berechnung von Spannungs- und Deformationsfeldern an Interface-Ecken im nichtlinearen Deformationsbereich auf Parallelrechnern. March 1996.

96-04 Th. Frank, E. Wassen. Parallel solution algorithms for Lagrangian simulation of disperse multiphase flows. Proc. of 2nd Int. Symposium on Numerical Methods for Multiphase Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, July 7-11, 1996, San Diego, CA, USA. June 1996.

96-05 P. Benner, V. Mehrmann, H. Xu. A numerically stable, structure preserving method for computing the eigenvalues of real Hamiltonian or symplectic pencils. April 1996.

96-06 P. Benner, R. Byers, E. Barth. HAMEV and SQRED: Fortran 77 Subroutines for Computing the Eigenvalues of Hamiltonian Matrices Using Van Loans's Square Reduced Method. May 1996.

96-07 W. Rehm (Ed.). Portierbare numerische Simulation auf parallelen Architekturen. April 1996.

96-08 J. Weickert. Navier-Stokes equations as a differential-algebraic system. August 1996.

96-09 R. Byers, C. He, V. Mehrmann. Where is the nearest non-regular pencil? August 1996.

96-10 Th. Apel. A note on anisotropic interpolation error estimates for isoparametric quadrilateral finite elements. November 1996.

96-11 Th. Apel, G. Lube. Anisotropic mesh refinement for singularly perturbed reaction diffusion problems. November 1996.

96-12 B. Heise, M. Jung. Scalability, efficiency, and robustness of parallel multilevel solvers for nonlinear equations. September 1996.

96-13 F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Multifractal analysis of the metal-insulator transition in anisotropic systems. October 1996.

96-14 R. Schneider, P. L. Levin, M. Spasojević. Multiscale compression of BEM equations for electrostatic systems. October 1996.

96-15 M. Spasojević, R. Schneider, P. L. Levin. On the creation of sparse Boundary Element matrices for two dimensional electrostatics problems using the orthogonal Haar wavelet. October 1996.

96-16 S. Dahlke, W. Dahmen, R. Hochmuth, R. Schneider. Stable multiscale bases and local error estimation for elliptic problems. October 1996.

96-17 B. H. Kleemann, A. Rathsfeld, R. Schneider. Multiscale methods for Boundary Integral Equations and their application to boundary value problems in scattering theory and geodesy. October 1996.

96-18 U. Reichel. Partitionierung von Finite-Elemente-Netzen. November 1996.

96-19 W. Dahmen, R. Schneider. Composite wavelet bases for operator equations. November 1996.

96-20 R. A. Römer, M. Schreiber. No enhancement of the localization length for two interacting particles in a random potential. December 1996. to appear in: Phys. Rev. Lett., March 1997

96-21 G. Windisch. Two-point boundary value problems with piecewise constant coefficients: weak solution and exact discretization. December 1996.

96-22 M. Jung, S. V. Nepomnyaschikh. Variable preconditioning procedures for elliptic problems. December 1996.

97-01 P. Benner, V. Mehrmann, H. Xu. A new method for computing the stable invariant subspace of a real Hamiltonian matrix or Breaking Van Loan's curse? January 1997.

97-02 B. Benhammouda. Rank-revealing 'top-down' ULV factorizations. January 1997.

97-03 U. Schrader. Convergence of asynchronous Jacobi-Newton-Iterations. January 1997.

The complete list of current and former preprints is available via
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/sfb/sfb96pr.html`.