

2.1 Teilprojekt A3

Parallele Auflösungsstrategien für 3D-Finite-Elemente-Gleichungssysteme durch effektive Vorkonditionierung.

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Arnd Meyer, TU Chemnitz, Professur Numerische Analysis

Doz. Dr. Michael Jung, TU Chemnitz, Professur Numerik und Analysis partieller Differentialgleichungen (bis 2/2000), Dozentur für Wissenschaftliches Rechnen, Institut für Wissenschaftliches Rechnen, TU Dresden (seit 3/2000)

2.1.2 Projektbearbeiter

PD Dr. Thomas Apel, Professur Numerische Analysis, Grundausrüstung

Dr. Gerd Kunert, Professur Wissenschaftliches Rechnen, Grundausrüstung

Dr. Michael Theß, Professur Numerische Analysis, Grundausrüstung, bis 8/98

Dipl.-Math. Sven Beuchler, Professur Numerische Analysis, teils Grundausrüstung, teils Projektstelle, seit 1/2000

Prof. Dr. Sergey V. Nepomnyaschikh, Gast und Gastprofessur (Gästeprogramm) von 2/1999 bis 9/1999

Dr. Gerhard Globisch, Projektstelle bis 8/1999

Dipl.-Math. Uwe Reichel, Projektstelle bis 12/1999

Dipl.-Math. Mario Goppold, Projektstelle von 9/1999 bis 12/1999

Dipl.-Math. Falk Bräuer, Projektstelle von 9/1999 bis 12/1999

Dr. Uwe Schrader, Projektstelle von 1/2000 bis 6/2000

Dr. Frank Milde, Projektstelle von 7/2000 bis 12/2000

Dipl.-Math. Torsten Steidten, Projektstelle seit 11/2000

Dipl.-Math. techn. Kornelia Pietsch, Projektstelle seit 1/2001

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Die Computersimulation physikalisch-technischer Prozesse erfordert den Übergang vom kontinuierlichen Modell (Randwertproblem) zu einem diskreten Ersatzmodell. Als Diskretisierungsverfahren kommt in vielen Fällen die Finite-Elemente-Methode zum Einsatz. Im Ergebnis des Diskretisierungsprozesses entstehen im Allgemeinen sehr groß dimensionierte (nicht)lineare Gleichungssysteme. Bei einer gleichmäßigen Verkleinerung der Diskretisierungsschrittweite wächst die Dimension dieser Gleichungssysteme stark an, im 3D-Fall zum Beispiel um das Achtfache bei Halbierung der Schrittweite. Folglich ist selbst bei den heute zur Verfügung stehenden leistungsfähigen Computern die Speicherkapazität schon bei relativ groben gleichmäßigen Diskretisierungen ausgeschöpft. Somit besteht die zwingende Notwendigkeit, adaptive, d. h. lösungsangepasste, Diskretisierungen einzusetzen.

Im Rahmen dieses Teilprojekts sollten effiziente parallele adaptive Lösungsstrategien für elliptische Randwertprobleme entwickelt werden. Im einzelnen sollten die folgenden Teilaufgaben bearbeitet werden:

Adaptive FEM – Software. Die bereits begonnenen Arbeiten zur Entwicklung paralleler Multilevel-Löser bei adaptiven isotropen Finite-Elemente-Diskretisierungen sollten fortgesetzt werden. Insbesondere waren Fragestellungen zur dynamischen Lastbalancierung und zur Steuerung der adaptiven Verfahren zu klären.

Vorkonditionierung bei isotropen FE-Diskretisierungen. Bereits begonnene Arbeiten zur Konstruktion von Vorkonditionierern auf der Basis des Fictitious-Space-Lemmas sollten fortgesetzt werden. Insbesondere sollten diese Techniken auf lokal verfeinerten Netzen eingesetzt werden. Weiterhin sollte das Konvergenzverhalten bekannter Multilevel-Techniken auf graduierten Netzen analysiert werden.

Anisotropie: Fehlerschätzer und schnelle Löser. Adäquate Diskretisierungen bei Problemen in Gebieten mit einspringenden Kanten und bei singular gestörten Problemen basieren auf anisotropen FE-Netzen. Wie Voruntersuchungen gezeigt hatten, sind die üblichen Fehlerschätzer und Multilevel-Löser nicht robust bezüglich der Anisotropien. Deshalb sollten für die bei derartigen Diskretisierungen entstehenden linearen Gleichungssysteme robuste Mehrgitter- und BPX-artige Algorithmen entwickelt werden. Besonderes Augenmerk sollte ebenfalls auf die anisotrope Steuerung adaptiver Verfahren gelegt werden.

Löser für Platten- und Schalenprobleme. Die Arbeiten zu schnellen Auflösungsverfahren für die Gleichungssysteme, die bei der FE-Diskretisierung des Kirchhoffschen Plattenmodells und des Koiterschen Schalenmodells entstehen, sollten fortgesetzt werden.

p - und hp -Methoden. Eine Möglichkeit zur Überwindung von *Locking-Effekten* bei Schalenproblemen besteht in der Anwendung von p bzw. hp -Versionen der Finite-Elemente-Methode. Es sollten erste Untersuchungen bezüglich effizienter Multilevel-Löser für einfache Modellprobleme durchgeführt werden.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Adaptive FEM – Experimentalsoftware

Ein wesentliches Ziel dieser Teilaufgabe bestand im Studium des Gesamtverhaltens von adaptiver Technologie. Dies beinhaltet für den 2D-Fall hauptsächlich die Gesamtgestaltung eines „cascade“-artigen Lösungsprozesses (neue Datenstrukturen, möglichst großer Anwendungsbereich, effizient eingebettete Löser). Im 3D-Fall spielte die Parallelisierung des Gesamtprozesses die Hauptrolle, die wichtigsten anderen Merkmale wurden aus dem 2D-Fall übernommen. Wesentliche Arbeiten wa-

ren das Auffinden und der Einbau von Partitionierungs-Techniken für Lastabgabe, Disbalance-Messungen und Rebalancing-Techniken.

Insgesamt sind im Berichtszeitraum drei Programmrealisierungen entstanden, die adaptive 2D- und 3D-Rechnungen ausführen. Die Unterscheidung resultiert aus der Tatsache, dass die 3D-Rechnungen auch im adaptiven Fall Parallelrechneranwendungen bleiben, während eine 2D-adaptive Rechnung (zumindest im derzeitigen Leistungsumfang) dies nicht erfordert, wie aus den Beispielergebnissen in 2.4. hervorgeht. Trotzdem basieren beide Realisierungen auf gleichen Grundbibliotheken, die teilweise für neue Datenstrukturen (anders als bei gleichmäßiger Vernetzung) erweitert wurden. Wesentliche Kennzeichen dieser neuen Programmpakete sind:

SPC-PM-2Ad (2D-Programm – Adaptive FEM)

- (a) neue Datenstrukturen (Knoten / Kantenbaum / Elementstruktur);
- (b) realisiert Reaktions-Diffusions-Gleichungen und lineare Elastizität;
- (c) Rechnung in x, y - oder in r, z -(Zylinder-)Koordinaten;
- (d) Dreiecks-/Vierecks-, lineare/quadratische Elemente;
- (e) „cascade“-artige Lösergestaltung;
- (f) Fehlerschätzer zur Netzsteuerung;
- (g) Tests für anisotrope Netze möglich.

Da die Rechenzeiten für eine FE-Simulation bis zu einer Vernetzung von 50 000 ... 100 000 Freiheitsgraden (was höchste Genauigkeiten liefert und die höchstmögliche noch speicherbare Feinheit in Teilen des Gebietes erzeugt) auf modernen Pentium III-Prozessoren bei wenigen Sekunden (3 ... 5 s) liegen, wurde eine Parallelisierung nicht vorgesehen.

SPC-PM-3AdH (3D-Programm – Adaptive FEM – Hexaeder)

Eigenschaften wie oben, wobei (d) durch

- (d') 8-, 20- und 27-Knoten-Hexaederelemente

ersetzt wird.

SPC-PM-3AdT (3D-Programm – Adaptive FEM – Tetraeder)

Zusätzlich zu den Eigenschaften (a), (b),

- (d'') 4- und 10-Knoten-Tetraederelemente,

sowie (e) bis (g) von oben ist hier insbesondere die parallele Implementierung vorrangig gewesen, d. h., zusätzliche Eigenschaften sind:

- (h) Start auf *einem* Prozessor, Hinzunahme weiterer bei Bedarf;
- (i) Abspalten von Arbeitslast eines Prozessors (in Vielfachen von „Hauptnetz-Elementen“) und Auslagern auf wenig oder unbelastete Prozessoren;
- (j) Kontrolle der Disbalance, wenn alle verfügbaren Prozessoren mitarbeiten;
- (k) Rebalancierung, wenn nötig.

2.3.2 Teilaufgabe Vorkonditionierung bei isotropen Finite-Elemente-Diskretisierungen

Für Randwertprobleme in Gebieten mit einer komplizierten Geometrie oder mit einer komplizierten Geometrie von inneren Materialgrenzen ist es unmöglich, eine Hierarchie von Vernetzungen mit einem hinreichend groben größten Gitter zu erzeugen. Die Anwendung von klassischen Mehrgitter- und BPX-artigen Algorithmen führt dann nicht zu der von Multilevel-Verfahren erwarteten Effizienz. Um dieses Problem zu umgehen, sind aus der Literatur verschiedene Zugänge bekannt (siehe z. B. [BX94, CS93, KY94, Nep95, Xu96]).

Bereits im vorangegangenen Berichtszeitraum wurden unter Nutzung des Fictitious Space Lemmas und Multilevel-Zerlegungen von Funktionen auf hierarchischen Gittern effiziente Löser für die oben erwähnten Problemklassen beschrieben und analysiert. Insbesondere konnten mittels dieser Vorgehensweise auch effiziente Multilevel-Vorkonditionierer für FE-Gleichungssysteme konstruiert werden, die aus FE-Diskretisierungen mit unstrukturierten Netzen ohne Netzhierarchie resultieren [GN98, Glo97]. Eine der Grundideen bei der Konstruktion dieser Vorkonditionierer besteht darin, dass das betrachtete Gebiet Ω in ein Rechteck eingebettet wird. Für dieses Rechteck wird eine Folge von regelmäßigen Rechtecksgittern generiert, wobei für die Schrittweite im feinsten dieser Gitter $h \leq \frac{1}{2}\sqrt{2}d$ gilt. Dabei ist d der maximale Durchmesser eines Kreises, der genau einen Knoten der Vernetzung des Gebietes Ω enthält. Der Vorkonditionierer ergibt sich dann durch Abbildungen zwischen den Knoten der Vernetzung des Gebietes Ω und Knoten im erzeugten feinsten Rechtecksgitter sowie einem Multilevel-Zugang, der auf der Folge der Rechtecksgitter basiert. Für unstrukturierte Netze mit lokalen Netzverfeinerungen führt die obige Definition der Schrittweite im feinsten Rechtecksgitter zu extrem feinen Gittern und erfordert folglich sehr viel Speicherplatz und Rechenzeit bei der Anwendung des Vorkonditionierers. Deshalb wurde in diesem Berichtszeitraum untersucht, wie man für lokal verfeinerte unstrukturierte Netze effiziente Vorkonditionierer konstruieren kann.

Weiterhin wurden Multilevel-Vorkonditionierungsoperatoren auf lokal modifizierten Gittern entwickelt. Hierbei wird das zu vernetzende Gebiet Ω in ein Rechteck oder Dreieck eingebettet und für dieses zunächst eine Folge regelmäßiger Grundgitter generiert. Anschließend erfolgt eine lokale Modifikation des Grundgitters in der Umgebung des Gebietsrandes $\partial\Omega$, so dass man eine Vernetzung des Gebietes Ω erhält. Die konstruierten Vorkonditionierer nutzen wieder Abbildungen zwischen den Knoten der Vernetzung des Gebietes Ω und Knoten des Grundgitters sowie einen Multilevel-Vorkonditionierer auf der Folge der Grundgitter.

2.3.3 Teilaufgabe Anisotropie: Fehlerschätzer und schnelle Löser

Innerhalb dieser Teilaufgabe sind die folgenden Forschungsaufgaben bearbeitet worden.

***A priori* Fehlerabschätzungen**

Wie in der Einleitung bereits festgestellt wurde, besteht bei der Simulation komplexer technischer Prozesse die zwingende Notwendigkeit, lösungsangepasste Diskretisierungen einzusetzen. Wenn die Lösung der betrachteten Simulationenaufgabe anisotropes Verhalten aufweist, dann ist es eine natürliche Idee, dies auch in der Finite-Elemente-Approximation widerzuspiegeln. Vor einer Computersimulation mit neuen Diskretisierungen, die oft wesentlichen Einfluss auf die Datenstrukturen besitzen, sollte an wohldefinierten Modellproblemen der mögliche Erfolg bewiesen werden. Im Fall von Differentialgleichungsmodellen besteht die Aufgabe in der *a priori* Abschätzung des Diskretisierungsfehlers in geeigneten Normen.

***A posteriori* Fehlerschätzer**

Seit dem Ende der 70-er Jahre werden Fehlerschätzer und darauf aufbauende adaptive Finite-Elemente-Verfahren breit untersucht. Jedoch werden in den meisten numerisch-analytischen Arbeiten nur isotrope Netze betrachtet. Eine rigorose Analysis für anisotrope Netze findet man kaum in der Literatur. Daher besteht die Aufgabe, Fehlerschätzer für anisotrope Dreiecks- und Tetraedernetze zu konstruieren und analytisch zu untersuchen. Dabei sollen verschiedene Differentialgleichungen, verschiedene Typen von Fehlerschätzern und verschiedene Normen des Fehlers betrachtet werden.

In der vorhergehenden Antragsperiode wurden erste Fehlerschätzer hergeleitet und untersucht, die auch für anisotrope FEM-Netze geeignet sind [Kun97]. Dazu wurden erste Beschreibungsmöglichkeiten der anisotropen Aufgabenstellungen vorgeschlagen sowie grundlegende Hilfsmittel zur Analyse bereitgestellt. Erste numerische Tests waren für zweidimensionale (2D) Gebiete vorhanden und vereinzelt auch in 3D.

Im Berichtszeitraum stand nun die Aufgabe, diese vorhandenen ersten Ansätze zu vervollkommen, zu verbessern und eine umfassende Theorie aufzubauen. Es sollte ein tieferes Verständnis anisotroper Fehlerschätzung erreicht werden. Voraussetzungen und Grenzen der Theorie sollten ausgelotet werden. Die einzelnen *Teilaufgaben* können wie folgt untergliedert werden:

- Die bekannten Fehlerschätzer sollten verbessert und weitere Schätzer hergeleitet und analysiert werden. Es sollten Zusammenhänge zwischen den einzelnen Fehlerschätzern aufgedeckt werden (z.B. zwischen Residuenschätzern und Schätzern basierend auf lokalen Problemen).
- Es deutete sich an, dass die Beziehung zwischen einem anisotropen Netz und der anisotropen Lösung eine zentrale Rolle spielt. Hier waren analytische und experimentelle Zugänge gesucht.
- Alle theoretischen Erkenntnisse sollten implementiert und numerisch getestet werden. Der Schwerpunkt wurde in einer parallelen 3D Realisierung gesehen.

Die verwendeten *Methoden* lassen sich kurz umreißen:

- Bekannte Grundprinzipien und Vorgehensweisen sowohl von isotropen Vorbildern als auch von eigenen anisotropen Analysen sollten genutzt werden, um neue Fehlerschätzer und Hilfsmittel herzuleiten und zu untersuchen.
- Die Vorhersagen der Theorie sollten stets im numerischen Experiment überprüft werden. Die theoretischen Grenzen sollten am Experiment ausgelotet werden (z.B. Fehlerschätzer auf Basis eines lokalen Neumann-Problems). Alle Implementierungen sollten für einen Parallelrechner zugeschnitten werden.

Diese relativ allgemeinen Prinzipien sollen jedoch nicht darüber hinwegtäuschen, dass auch bei scheinbar klaren Verallgemeinerungen immer wieder neue, unerwartete Effekte zutage traten, die zu einer Bereicherung der Theorie anisotroper Fehlerschätzung führten (siehe auch Ergebnisse).

Netzadaption

In einem adaptiven Algorithmus wird aus Informationen, die aus einer vorhergehenden Näherungslösung abgeleitet werden, ein neues Finite-Elemente-Netz konstruiert. Bei anisotropen Vernetzungen benötigt man hierzu nicht nur eine Information über die lokale Elementgröße, sondern auch über das anzustrebende Streckungsverhältnis (*aspect ratio*) und die Ausrichtung der Elemente. In allen uns bekannten Arbeitsgruppen, die sich mit diesem Thema beschäftigen, werden Streckungsverhältnis und Streckungsrichtung durch die Eigenwerte und Eigenvektoren der Hesse-Matrix der Näherungslösung (bzw. einer Komponente davon) bestimmt. Zusätzlich soll hier die alternative Idee untersucht werden, die benötigte Information aus Schätzungen des Gradienten des Approximationsfehlers zu extrahieren.

Aus der Literatur sind im wesentlichen drei Strategien zur Generierung des neuen Netzes bekannt: Neuvernetzung unter Ausnutzung der gewonnenen lokalen Informationen, anisotrope Teilung der Elemente des vorhandenen Netzes und Knotenverschiebung (*r*-Version der FEM). Es ist außerhalb des Rahmens dieses Berichts, diese Strategien genauer zu diskutieren und zu werten. Die gewonnene Einsicht aus der Literatur ist, dass jede dieser Strategien für dreidimensionale Aufgaben eine sehr komplexe Programmieraufgabe ist. Deshalb sollte zunächst nur ein einfaches Testprogramm für zweidimensionale Modellprobleme erstellt werden. Die Umsetzung der durch die bisherigen Untersuchungen untermauerten Ideen im Rahmen der parallelen 3D-Programmentwicklungen soll in der nächsten Antragsphase erfolgen.

Vorkonditionierung

Zur Auflösung der entstehenden Finite-Elemente-Gleichungssysteme werden heute typischerweise Varianten des Verfahrens der konjugierten Gradienten mit Vorkonditionierung (zum Beispiel BPX-artige Vorkonditionierer oder Multigrid-Verfahren) genutzt. Theoretische Resultate bezüglich der Effektivität dieser Verfahren (zum Beispiel der Konditionszahl des vorkonditionierten Systems) wurden bisher nicht für die hier betrachteten anisotropen Diskretisierungen, z. B. für Modellprobleme in Gebieten mit Kanten, betrachtet.

Im Arbeits- und Ergebnisbericht 1996 – 1998 des SFB 393, Teilprojekt A1, mussten wir feststellen, dass das CG-Verfahrens mit BPX-Vorkonditionierer seine Optimalitätseigenschaften verliert, wenn anisotrope Finite-Elemente-Netze betrachtet werden. Während die Iterationszahlen bei isotropen Netzen und wachsender Anzahl von Knotenpunkten beschränkt bleiben, haben wir ein unbeschränktes Wachsen bei in Kantenumgebung anisotrop graduell verfeinerten Netzen festgestellt. Wir hatten Ideen geäußert, wie die Methoden weiter verbessert werden könnten. Ein entsprechend angepasster Vorkonditionierer sollte im Rahmen dieser Teilaufgabe entwickelt werden.

2.3.4 Teilaufgabe Löser für Platten- und Schalenprobleme

Der Beginn der Bearbeitungsphase war durch die Fertigstellung der Dissertationsschrift von M. Theß [The99] gekennzeichnet, in der vorrangig schnelle Löser für Schalenprobleme untersucht wurden, die mit Viereckselementen vernetzt sind. Grundlage war die Kirchhoffsche Plattentheorie in Anwendung auf Schalen, also das Koitersche Schalenmodell. Es wurden Diskretisierungen mit

Bogner-Fox-Schmidt-Elementen	(konform) und
Adini-Elementen	(nichtkonform)

betrachtet. Schon im Bericht zum Teilprojekt A3 für die Jahre 1996–98 sind die Ergebnisse zu schnellen BPX-Lösern für diese Problemklasse dargelegt worden. Dies sollte nunmehr durch den Vergleich mit

- DD-Lösern und Multigrid-Techniken für die Teilgebetsmatrizen und die Fortsetzungsoperatoren,
- globalen Multigrid-Techniken

komplettiert werden.

In der weiteren Folge sollte zu Dreiecksvernetzungen für Platten- und Schalenprobleme übergegangen werden. Ziel war die Konstruktion schneller Löser für das DKT-Element.

2.3.5 Teilaufgabe p - und hp -Methoden

Zur Lösung von Finite-Elemente-Gleichungssystemen, die bei der p - bzw. hp -Version entstehen, sind bisher nur wenige schnelle Lösungsverfahren bekannt. Im Berichtszeitraum bestand das Ziel darin, für Modellprobleme schnelle Löser zu entwickeln. Als Modellproblem wurde das Randwertproblem

$$-\Delta u = f \quad \text{in } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega$$

betrachtet, wobei Ω ein aus Rechtecken zusammengesetztes Gebiet ist. Zur Diskretisierung wurden stückweise polynomiale Funktionen p -ten Grades verwendet. Zur Definition der Ansatzfunktionen über jedem Teilgebiet (Rechteck) wurden dabei die integrierten Legendre-Polynome genutzt. Nummeriert man die Freiheitsgrade

in der Reihenfolge: Freiheitsgrade in den Eckknoten der Rechtecke, Freiheitsgrade auf den Kanten der Rechtecke, Freiheitsgrade im Inneren der Rechtecke, dann hat die FE-Steifigkeitsmatrix K die Blockstruktur

$$\begin{pmatrix} K_V & K_{VE} & K_{VI} \\ K_{EV} & K_E & K_{EI} \\ K_{IV} & K_{IE} & K_I \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Hierbei steht „V“ für die Eckknoten (vertices), „E“ für die Freiheitsgrade auf den Kanten (edges) und „I“ für die inneren Freiheitsgrade. Zur Definition einer Vorkonditionierungsmatrix wurde in [IK95a] der folgende Weg vorgeschlagen. Zunächst wird die Matrix

$$K_{1,d} = \begin{pmatrix} K_V & 0 \\ 0 & K^{(1)} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad K^{(1)} = \begin{pmatrix} K_E & K_{EI} \\ K_{IE} & K_I \end{pmatrix}$$

betrachtet, für die die Spektraläquivalenzungleichungen

$$\frac{c}{1 + \log p} K_{1,d} \leq K \leq 2K_{1,d}$$

gelten. Zur Definition einer Vorkonditionierungsmatrix für die Matrix K muss somit noch ein Vorkonditionierer für $K^{(1)}$ gefunden werden. Den Ausgangspunkt für dessen Definition bildet die Faktorisierung

$$K^{(1)} = \begin{pmatrix} I_E & K_{EI}K_I^{-1} \\ 0 & I_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_E & 0 \\ 0 & K_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_E & 0 \\ K_I^{-1}K_{IE} & I_I \end{pmatrix}$$

der Matrix $K^{(1)}$ mit dem Schurkomplement $S_E = K_E - K_{EI}K_I^{-1}K_{IE}$. Zur Konstruktion eines Vorkonditionierers der Matrix $K^{(1)}$ unter Nutzung der obigen Faktorisierung benötigt man einen Vorkonditionierer für das Schurkomplement, einen Fortsetzungsoperator von den Kanten ins Innere der Rechtecke und einen Vorkonditionierer für die Matrix K_I . In [IK95b] wurden drei Vorkonditionierer $C_{i,S}$, $i = 1, 2, 3$, für das Schurkomplement S_E vorgeschlagen. Im ungünstigsten Fall ist die Konditionszahl $\kappa(C_{i,S}^{-1}S_E)$ in der Größenordnung von $\mathcal{O}(1 + \log^2 p)$. Die Lösung eines Gleichungssystems der Gestalt $C_{i,S}x = y$ erfordert $\mathcal{O}(p^2)$ arithmetische Operationen.

In [JK97] wurden zur Matrix K_I der inneren Probleme spektraläquivalente Vorkonditionierer vorgeschlagen, die $\mathcal{O}(p^2)$ Nicht-Null-Einträge haben. Im Fall von Rechteckselementen hat die FE-Steifigkeitsmatrix ebenfalls $\mathcal{O}(p^2)$ Nicht-Null-Elemente. Die in [JK97] betrachteten Algorithmen zur Lösung der Vorkonditionierungsgleichungssysteme erfordern jedoch $\mathcal{O}(p^3)$ arithmetische Operationen. Daher war es das Ziel, Vorkonditionierer für K_I zu finden, so dass die entsprechenden Vorkonditionierungsgleichungssysteme mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(p^2)$ Operationen gelöst werden können.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [BX94] R. E. Bank und J. Xu. The hierarchical basis multigrid method and incomplete LU decomposition. In D. E. Keyes und J. Xu, Hrsg., *Domain decomposition for PDEs*, volume 180 of *Contemporary Mathematics*, Seiten 163–174, 1994.

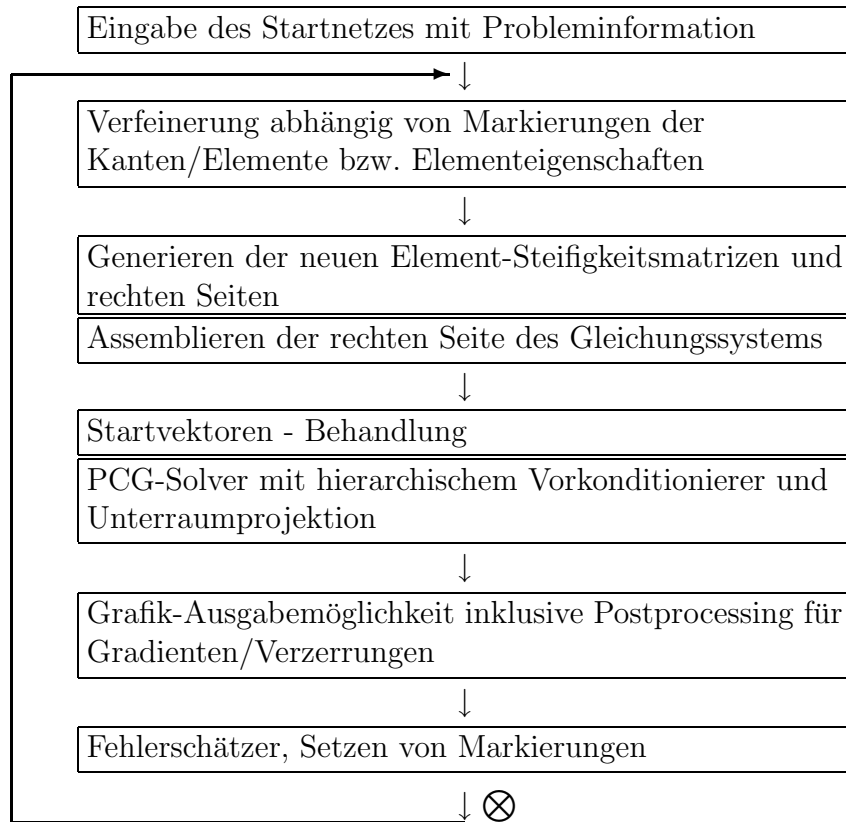
- [CS93] T. F. Chan und B. Smith. Domain decomposition and multigrid algorithms for elliptic problems on unstructured meshes. CAM Report 93-42, Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1993.
- [GN98] G. Globisch und S. V. Nepomnyaschikh. The hierarchical preconditioning on unstructured grids. *Computing*, 61(4):307–330, 1998.
- [Glo97] G. Globisch. The hierarchical preconditioning having unstructured threedimensional grid. Preprint SFB393/97-25, TU Chemnitz, 1997.
- [IK95a] S. A. Ivanov und V. G. Korneev. On the preconditioning in the domain decomposition technique for the p -version finite element method. Part I. Preprint SPC 95-35, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, 1995.
- [IK95b] S. A. Ivanov und V. G. Korneev. On the preconditioning in the domain decomposition technique for the p -version finite element method. Part II. Preprint SPC 95-36, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, 1995.
- [JK97] S. Jensen und V. G. Korneev. On domain decomposition preconditioning in the hierarchical p -version of the finite element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 150(1-4):215–238, 1997.
- [KY94] R. Kornhuber und H. Yserentant. Multilevel methods for elliptic problems on domains not resolved by the coarse grid. In D. E. Keyes und J. Xu, Hrsg., *Domain decomposition for PDEs*, volume 180 of *Contemporary Mathematics*, Seiten 49–60, 1994.
- [Kun97] G. Kunert. Error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. Preprint SFB393/97_16, TU Chemnitz, 1997.
- [Nep95] S. V. Nepomnyaschikh. Fictitious space method on unstructured meshes. *East-West J. Numer. Math.*, 3(1):71–79, 1995.
- [Xu96] J. Xu. The auxiliary space method and optimal multigrid preconditioning techniques for unstructured grids. *Computing*, 56:215–235, 1996.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Adaptive FEM – Experimentalsoftware

SPC-PM-2Ad (2D-Programm – Adaptive FEM)

Wesentlicher Hauptzweck der adaptiven 2D-Implementierung war der Nachweis einer genügend sicheren Netzsteuerung gekoppelt mit gleichmäßigem Abfallen des (geschätzten) Fehlers. Dabei wurde auf eine möglichst große Klasse von Beispielanwendungen geachtet. Grundlegende Arbeitsweise ist die folgende:



An der Programmstelle \otimes kann der Nutzer eventuell eine nochmalige Lösung des Gleichungssystems ohne weitere Netzverfeinerung verlangen (Genauigkeitssteigerung).

Der **Leistungsumfang** dieses Programms ist zur Zeit die Lösung einer (eventuell anisotropen)

- a) Reaktions-Diffusionsgleichung

$$-a_{11} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_1^2} - a_{22} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_2^2} + c \mathbf{u} = f$$

mit stückweise konstanten Funktionen a_{ii}, c, f (konstant pro Grobelement des Eingabefiles; eine variable Definition $a_{ii}(x), c(x), f(x)$ ist durch Anhängen von Unterroutrinen möglich),

- b) Lamé-Gleichung der linearen Elastizität.

Beide Gleichungen ergeben die Bilinearform der schwachen Formulierung:

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} [B(\nabla)\mathbf{v}]^T C [B(\nabla)\mathbf{u}] d\Omega \quad ,$$

wobei im Fall a) \mathbf{u}, \mathbf{v} skalare Funktionen, $B(x) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $C = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, c)$

sind. Im Fall b) stehen \mathbf{u}, \mathbf{v} für Verschiebungsvektoren, deshalb ist

$$B(x) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ x_1 & 0 \\ 0 & x_2 \\ x_2 & x_1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \alpha = 0 & \text{bei } x, y\text{-Koordinaten,} \\ \alpha = \frac{1}{r} & \text{bei } r, z\text{-Koordinaten,} \end{cases}$$

($B(\nabla)\mathbf{u}$ sind die Komponenten des Verzerrungstensors in Vektorschreibweise) und C die Materialmatrix mit den Lamé-Koeffizienten μ und λ , die wieder in Teilgebieten konstant sind. Im Falle von Zylinderkoordinaten ist $d\Omega = r dr dz$, sonst $d\Omega = dx dy$. Um verschiedene Verfeinerungstechniken bei Dreiecken zu vergleichen, wurden 3 Strategien implementiert:

- rg: „rot-grün“ vorrangig „rote“ Verfeinerung, Netzabschluss durch „grüne“ nach Bänsch [Bän91];
- Bg: „grün“ ausschließlich „grüne“ Dreiecke nach Bänsch [Bän91];
- hn: „hanging nodes“ ausschließlich „rote“ Verfeinerung, kein Netzabschluss, sondern Nutzung von „hanging nodes“ (maximal eine Teilung pro Kante).
Implementierung: Projektion im PCG garantiert Ergebnisse im konformen Teilraum.

Bei Vierecken werden ausschließlich „hanging nodes“ verwendet und die Verfeinerung basiert auf Halbierungen statt Viertelungen, um anisotrope Netze zu ermöglichen. Zusätzlich gibt es hier eine Anisotropiebeschränkung: ein Element wird automatisch halbiert, wenn sein Streckungsverhältnis (*aspect ratio*) über einer (Input-) Grenze liegt. Dies erlaubt extrem einfache Startnetze mit eventuell vollkommen unüblichen geometriebedingten, aber nicht der Lösung angepassten anisotropen Anfangsvierecken.

Die **Datenstruktur** zur Realisierung der Adaptivität wurde so gewählt, dass alle Grundschritte des o.a. Algorithmus auf natürliche Weise implementiert werden können, d. h. keine zusätzlichen Informationen erfordern, als die für die hierarchische Vernetzung vorhandenen. Deshalb wurde die Datenstruktur „Edge“ (der Kantenbaum) als Hierarchie von 3-Knoten-Kanten aufgebaut (Anfangs-, End-, Mittelknoten). Hiermit wird zum einen die automatisch richtige Geometrieverfeinerung bei gekrümmten Kanten erhalten, zum anderen enthält der Kantenbaum sofort die hierarchische Knoteninformation für den hierarchischen Vorkonditionierer (oder alle Multigrid-Varianten). Die Datenstruktur „Element“ ist ein 1D-Array von Strukturen der Form

(Kantennummern, Materialinfo, Knotennr., Elementmatrix, Element-rechte-Seite)

Hiermit wird zum einen ein Assemblieren einer Gesamtmatrix eingespart (nur *neue* Elemente sind zu generieren). Bei der Matrixmultiplikation im PCG wird elementweise vorgegangen. Von der kompakten Speicherung aller Informationen hierzu (Knotennummern und Matrix) kann man ein gutes Cache-Verhalten erwarten.

Bei der Gestaltung des **PCG-Lösers** ist besonders die von A. Meyer entwickelte Unterraum-Technik [Mey99c, Mey99a] erwähnenswert: Ohne Rücksicht auf Dirichlet-Randbedingungen bzw. auf hängende Knoten wird das $N \times N$ -Gleichungssystem

$$K\underline{u} = \underline{b}$$

aufgestellt, dessen Lösung aber in einem Teilraum *im* P des \mathbf{R}^N gesucht ist, der z. B. durch die Erfüllung von Randbedingungen¹ und Werte an hängenden Knoten abhängig von „Vaterwerten“ charakterisiert wird. Dies wird durch den Einbau des Projektors P ausschließlich im Vorkonditionierungsschritt des PCG erreicht, der zu

$$\underline{w} := PC^{-1}P^T \underline{r}$$

zu ändern ist und somit dem PCG im Teilraum zur Lösung von

$$P^T K P \underline{u} = P^T \underline{b}$$

entspricht [Mey01].

Die hohe Effizienz dieser Vorgehensweise soll exemplarisch durch folgende beiden Beispiele (siehe auch die Tabellen und Abbildungen) illustriert werden. Diese und weitere Beispiele kann man unter

<http://www.tu-chemnitz.de/~amey/adaptiv-2D>

finden.

Das erste Beispiel zeigt an den springenden Randbedingungen und Materialgrenzen erwartungsgemäß eine stärkere Verfeinerung. Erwartet man einen Fehlerabfall $\text{est.Err.}^2 = CN^{-1}$, dann erhält man in der Spalte „est.Err.² * N“ den Wert für C . Eine Verkleinerung dieses Wertes bedeutet superlineare Konvergenz.

Der benutzte (besonders billige) Vorkonditionierer mit hierarchischen Basen lässt Iterationszahlen wie $\mathcal{O}(\ln N)$ erwarten, die bei solch „einfachen“ Problemen durch die „cascade“-artige Vorgehensweise auf fast konstante Werte gedämpft werden. Dadurch beträgt der Zeitaufwand zum Lösen des linearen Gleichungssystems auch bei etwa 10^5 Knoten nur rund 2.5 Sekunden.

Das zweite Beispiel zeigt ein typisches adaptives Verfeinerungsverhalten an den einspringenden Kanten. An diesen Stellen ist der Diskretisierungsfehler durch die Verzerrungen bei uniformer Verfeinerung besonders groß. Die angegebene Tabelle zeigt eindrucksvoll das starke Sinken des Fehlers schon bei relativ geringer Verfeinerung. Die großen Absolutwerte des Fehlers sind durch den E -Modul bedingt.

Für den Löser stellt Beispiel 2 eine Extremsituation dar. Es gibt keinerlei Dirichlet-Randbedingungen, damit eine singuläre Systemmatrix, deshalb konnte kein Grobgridlöser in der Vorkonditionierung genutzt werden. Dies erklärt die recht hohen Iterationszahlen, ohne aber das Verhalten $\mathcal{O}(\ln N)$ zu verletzen.

Die mit „Assem“ überschriebenen Zeiten bezeichnen den Aufwand für die Generierung der **jeweils neuen** Elementmatrizen und Assemblierung der rechten Seite und Hauptdiagonale der Systemmatrix, weshalb sie wesentlich unter den Löserzeiten liegen.

¹bei inhomogenen Dirichlet-Randbedingungen eigentlich eine lineare Mannigfaltigkeit, deshalb muss in „Startvektoren-Behandlung“ dies für den Startvektor garantiert werden, dann liegen alle Korrekturen tatsächlich im Teilraum

Beispiel 1: Potentialproblem, x, y -Koordinaten mit mehreren wechselnden Randbedingungen, springendem Diffusionskoeffizienten und einem gekrümmten Rand.

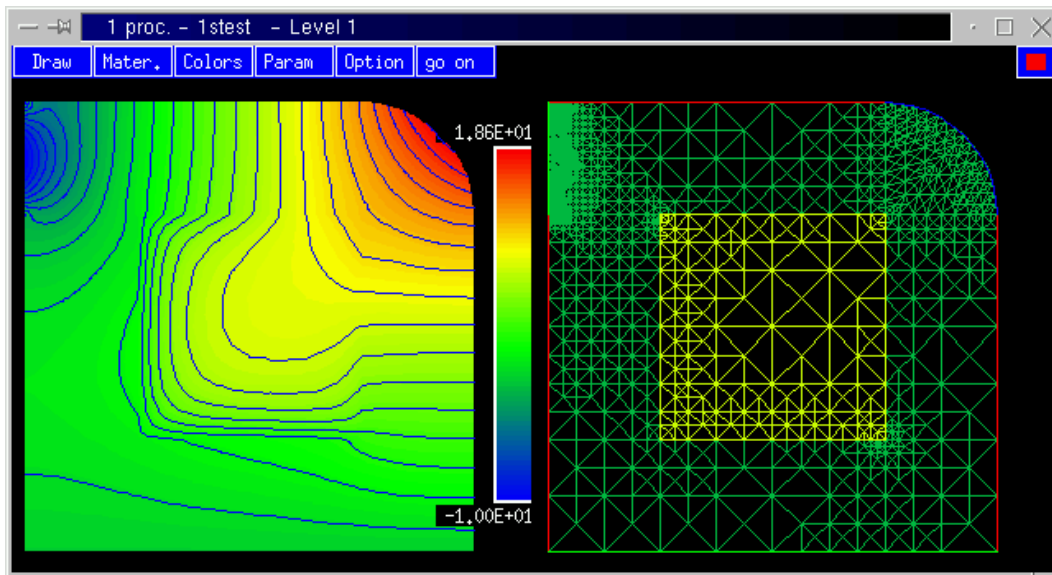
Netzentwicklung:			Assem : time(s)	PCGM		est.Err. (squared)	est.Err. ² *N
# Node	# Elem	# Edge		It	time(s)		
78	31	54	0.001	2	0.000	2.1E+02	2.E+04
279	124	255	0.002	7	0.003	9.8E+02	3.E+05
542	205	518	0.002	7	0.005	6.2E+02	3.E+05
922	403	898	0.005	8	0.011	4.3E+02	4.E+05
1404	631	1380	0.007	8	0.018	1.9E+02	3.E+05
1889	856	1865	0.007	8	0.025	8.4E+01	2.E+05
2754	1261	2730	0.013	8	0.039	4.2E+01	1.E+05
4630	2125	4606	0.026	9	0.082	2.2E+01	1.E+05
8753	4036	8729	0.057	9	0.164	1.1E+01	1.E+05
12446	5797	12422	0.058	9	0.245	7.2E+00	9.E+04
17935	8458	17911	0.087	10	0.411	4.8E+00	9.E+04
35722	16813	35698	0.253	9	0.818	2.4E+00	9.E+04
51896	24727	51872	0.262	10	1.340	1.6E+00	8.E+04
103941	49732	103917	0.965	9	2.581	8.2E-01	9.E+04

Tabelle 1: Verlauf der Rechnung bei „hanging nodes“, lineare Elemente.

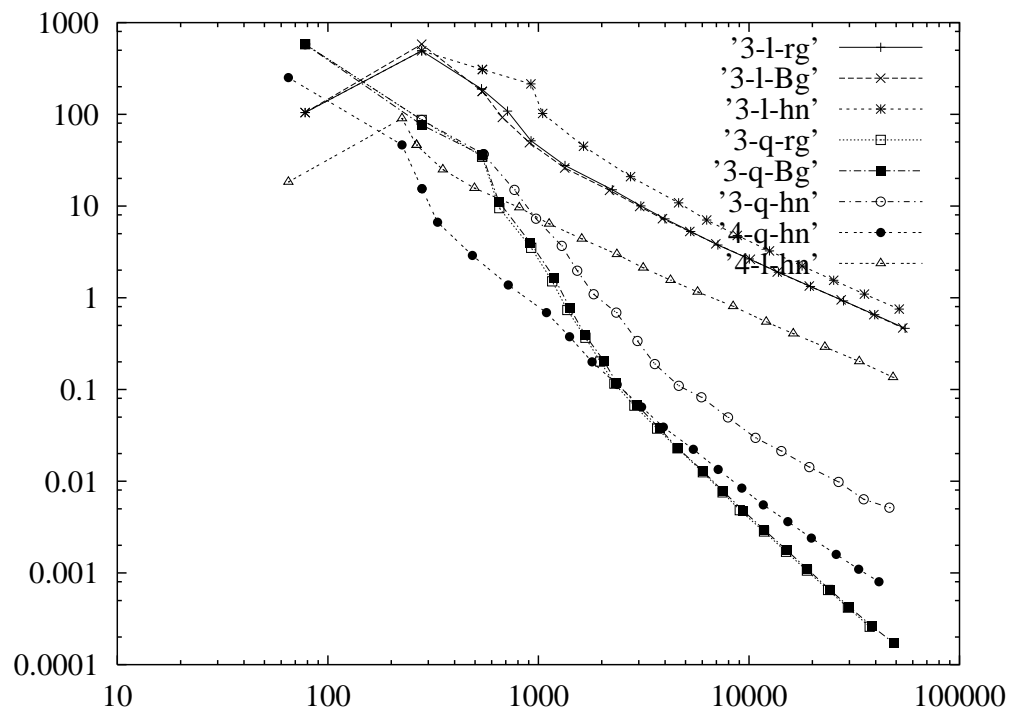
Beispiel 2: Elastizitätsproblem „Rad“, rotationssymmetrisches Bauteil mit rotationssymmetrischer Belastung (Fliehkraft)

Netzentwicklung:			Assem : time(s)	PCGM		est.Err. (squared)	est.Err. ² *N
# Node	# Elem	# Edge		It	time(s)		
50	10	37	0.008	21	0.000	7.7E+06	8.E+08
158	40	145	0.016	19	0.008	4.0E+06	1.E+09
174	40	161	0.000	28	0.016	2.3E+06	8.E+08
236	54	223	0.008	18	0.008	1.7E+06	8.E+08
320	72	307	0.008	19	0.016	9.9E+05	6.E+08
426	94	413	0.016	20	0.016	5.9E+05	5.E+08
544	120	531	0.016	22	0.031	3.9E+05	4.E+08
				⋮			
4944	1332	4931	0.250	32	0.680	9.6E+03	9.E+07
6632	1776	6619	0.281	33	1.016	5.5E+03	7.E+07
10002	2646	9989	0.539	37	1.922	3.0E+03	6.E+07
14250	3812	14237	0.742	37	2.906	2.4E+03	7.E+07
19102	5112	19089	0.875	41	5.258	1.8E+03	7.E+07
26391	7063	26378	1.586	45	7.344	1.5E+03	8.E+07
33560	9034	33547	1.289	47	9.102	1.1E+03	7.E+07
41379	11211	41366	1.438	50	12.023	7.5E+02	6.E+07

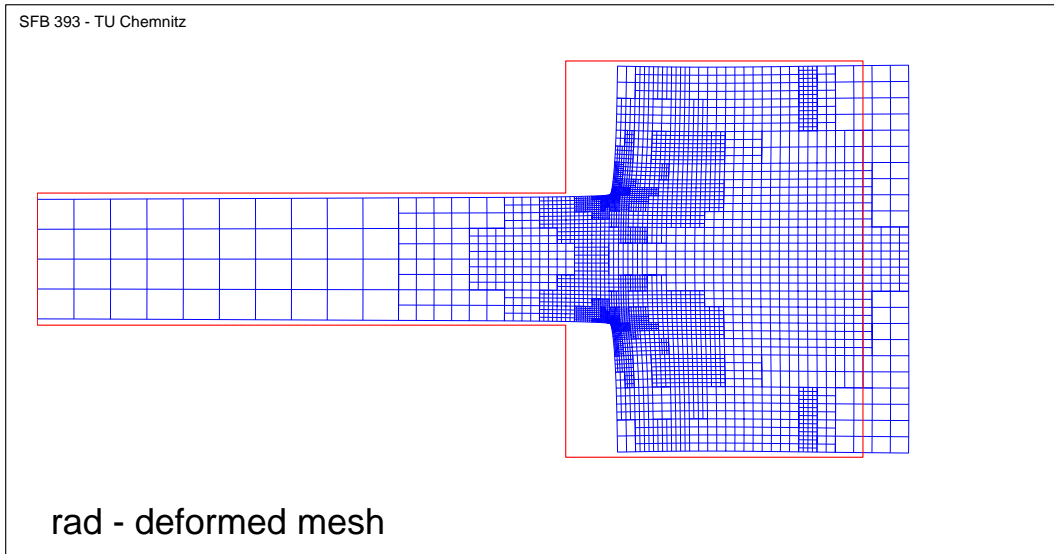
Tabelle 2: Verlauf der Rechnung bei 8-Knoten-Vierecken.



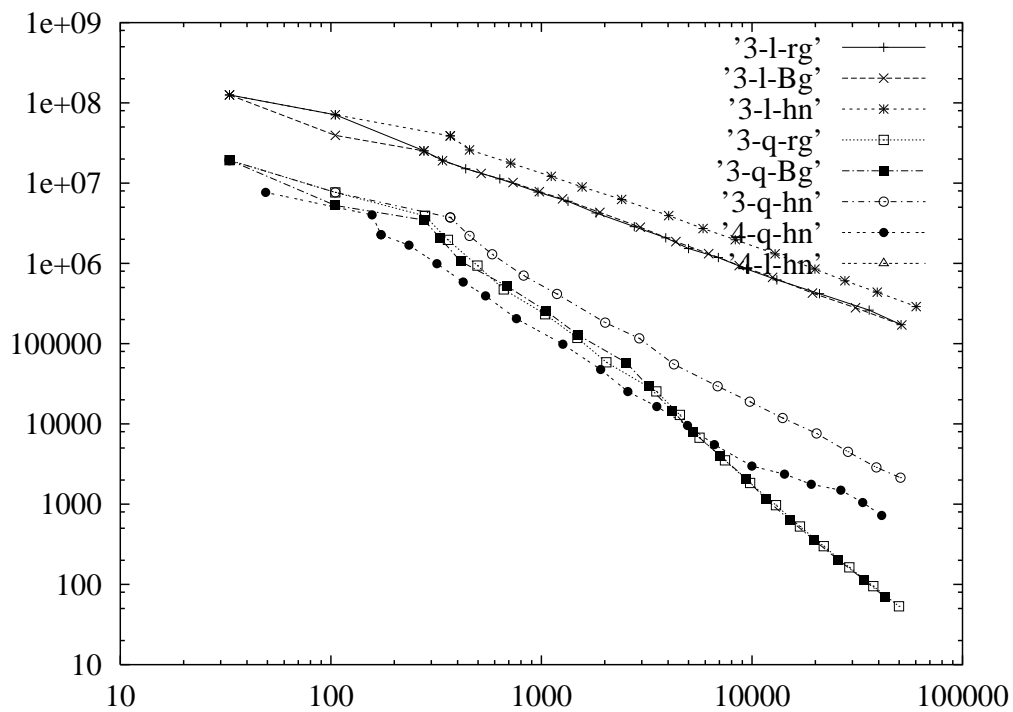
Ergebnisdarstellung, Beispiel 1



Fehlerverhalten bei verschiedener Verfeinerungstechnik, Beispiel 1



Ergebnisdarstellung, Beispiel 2



Fehlerverhalten bei verschiedener Verfeinerungstechnik, Beispiel 2

SPC-PM-3AdH und SPC-PM-3AdT (3D-Programme – Adaptive FEM)

Bei der Implementierung von adaptiven 3D-Rechnungen spielte zusätzlich zu den oben geschilderten Herangehensweisen die parallele Implementierung mit ihrer Balancierungsproblematik die wichtigste Rolle. Wesentliche Arbeit hierzu wurde von U. Reichel in Zusammenarbeit mit Kollegen der Universität Leeds² geleistet, von denen wichtige Kenntnisse über Wirkung und Nutzung der ParMETIS-

²Aufenthalt von U. Reichel in Leeds: 27.09.–24.10.98

Bibliothek erhalten wurden. Nach erfolgreichem Aufbau des neuen Parallelrechners (Ende 2000) konnte von F. Milde diese Arbeit so weit zum Abschluss gebracht werden, dass der beabsichtigte Leistungsumfang fehlerfrei funktionierte. Die 3D-Programme sind in [AMR99, BM01] dokumentiert.

Naturgemäß ist das Verhalten eines solchen Programms von vom Nutzer wählbaren Steuergrößen abhängig, so etwa:

- Ab wieviel % (α) des maximalen Fehleranteils wird ein Element geteilt?
- Wieviel % (MM) der Elemente werden mindestens geteilt?
- Ab wieviel % (MI) Disbalance wird rebalanciert?
- Wieviel % (MS) Speicherbelastung wird zugelassen bis zur anfänglichen Lastabgabe?

Durch Variation solcher Steuergrößen bei mehreren typischen Rechenbeispielen sind sehr viele Experimente durchgeführt worden, deren Dokumentation unter

<http://www.tu-chemnitz.de/~amey/adaptiv-3D>

eingesehen werden kann. Die Ergebnisse zeigen, dass die Wahl zwischen MM und α wohl dosiert werden muss. So werden bei relativ hohem α (z.B. 70%) und niedrigem MM (z.B. 0.5%) sehr wenige Elemente markiert. Dies bewirkt einen relativ schwachen Abbau des Fehlers. Dagegen wird dieser Fehler bei niedrigem α (10%) und hohem MM (20%) recht schnell erreicht. Als günstig erweisen sich geeignete Mittelwerte, z.B. $\alpha = 40\%$ und $MM = 5\%$.

Eine weitere Testserie untersuchte die Balancierungsfragen (via MS / MI). Die Variation von MS erweist sich als eher unkritisch. Höhere Werte ($\approx 20\%$) sind vorteilhaft, weil sich bessere Balance einstellt (höhere Zeiten auf größeren Levels, die wenig ins Gewicht fallen).

2.4.2 Teilaufgabe Vorkonditionierung bei isotropen Finite-Elemente-Diskretisierungen

Wir betrachten Randwertprobleme der Art: Gesucht ist $u \in V_0 = \{u \in H^1(\Omega) : u = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}$, so dass

$$a(u, v) = \langle F, v \rangle \quad \forall v \in V_0$$

mit einer symmetrischen, V_0 -elliptischen und V_0 -beschränkten Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ gilt. Bei der FE-Diskretisierung dieser Aufgabe verwenden wir stetige, stückweise lineare Ansatzfunktionen über Dreiecksnetzen. Das entstehende FE-Gleichungssystem

$$Ku = f$$

wird beispielsweise mittels des Verfahrens der konjugierten Gradienten mit Vorkonditionierung gelöst. Im Weiteren beschreiben wir die Konstruktion von Vorkonditionierern. Das wesentliche Hilfsmittel zur Konstruktion der Vorkonditionierer ist das Fictitious Space Lemma (siehe auch [Nep95]), das zum besseren Verständnis der folgenden Ausführungen hier wiederholt werden soll.

Fictitious Space Lemma. Seien H und \tilde{H} Hilberträume mit den Skalarprodukten $(u, v)_H$ und $(\tilde{u}, \tilde{v})_{\tilde{H}}$. Seien A und \tilde{A} symmetrische, positive, lineare Operatoren in den Räumen H und \tilde{H} :

$$A : H \rightarrow H, \quad \tilde{A} : \tilde{H} \rightarrow \tilde{H}.$$

Sei R ein linearer Operator mit

$$R : \tilde{H} \rightarrow H, \quad (AR\tilde{v}, R\tilde{v})_H \leq c_R(\tilde{A}\tilde{v}, \tilde{v})_{\tilde{H}} \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{H}.$$

Weiterhin existiere ein Operator T , so dass

$$T : H \rightarrow \tilde{H}, \quad RTu = u, \quad c_T(\tilde{A}Tu, Tu)_{\tilde{H}} \leq (Au, u)_H \quad \forall u \in H,$$

gilt, wobei c_R und c_T positive Konstanten sind. Dann gelten die Ungleichungen

$$c_T(A^{-1}u, u)_H \leq (R\tilde{A}^{-1}R^*u, u)_H \leq c_R(A^{-1}u, u)_H.$$

R^* ist der zu R adjungierte Operator bezüglich der Skalarprodukte $(\cdot, \cdot)_H$ und $(\cdot, \cdot)_{\tilde{H}}$.

Wir diskutieren zuerst die Anwendung des Fictitious Space Lemmas bei der Konstruktion von Vorkonditionierern im Fall von FE-Diskretisierungen mit unstrukturierten, lokal verfeinerten Netzen. Für das Gebiet Ω sei eine reguläre, aber nicht notwendigerweise quasi-uniforme Vernetzung Ω^h gegeben, d. h. das Netz kann lokale Verfeinerungen haben. Zu dieser Vernetzung definieren wir den Raum $H_h(\Omega^h)$, der durch stückweise lineare Funktionen aufgespannt wird. Diese Funktionen sind linear über jedem Dreieck der Vernetzung Ω^h und verschwinden auf dem Rand $\partial\Omega^h$. Wir konstruieren ein Hilfsgitter \tilde{Q}^h auf folgende Weise. Das Gebiet Ω wird in ein Quadrat Π eingebettet, für welches ein grobes regelmäßiges Rechtecksgitter Π_0^h generiert wird. Dieses wird wiederholt verfeinert, so dass man Rechtecksgitter Π_0^h, Π_1^h, \dots erhält. Das Gitter Π_q^h besteht aus Gitterzellen $D_{ij}^{(q)}$. Sei Q_0^h das kleinste Gebiet, das aus Zellen $D_{ij}^{(0)}$ besteht und Ω^h enthält. Wir bezeichnen mit I_0 die Menge von Indizes (i, j) , so dass

$$Q_0^h = \bigcup_{(i,j) \in I_0} D_{ij}^{(0)}, \quad D_{ij}^{(0)} = \{(x, y) : x_i \leq x < x_{i+1}, y_i \leq y < y_{i+1}\},$$

gilt. Die Gitter Q_1^h, Q_2^h, \dots werden wie folgt definiert. Sei I_q die Menge der Indizes (i, j) der Zellen $D_{ij}^{(q)}$, die mehr als einen Knoten der Vernetzung Ω^h enthalten. Wir teilen diese Zellen $D_{ij}^{(q)}$ und alle Nachbarzellen (Zellen, die wenigstens einen Eckpunkt mit der Zelle $D_{ij}^{(q)}$ gemeinsam haben) in vier kongruente Teilzellen. Die neuen Zellen werden mit $D_{ij}^{(q+1)}$ bezeichnet. Auf diese Weise entsteht das neue Gitter Q_{q+1}^h , $q = 0, 1, \dots$. Dieser Verfeinerungsprozess wird beendet, wenn jede Gitterzelle nicht mehr als einen Knoten der Vernetzung Ω^h enthält. Das feinste Gitter bezeichnen wir mit $Q_J^h = \tilde{Q}^h$.

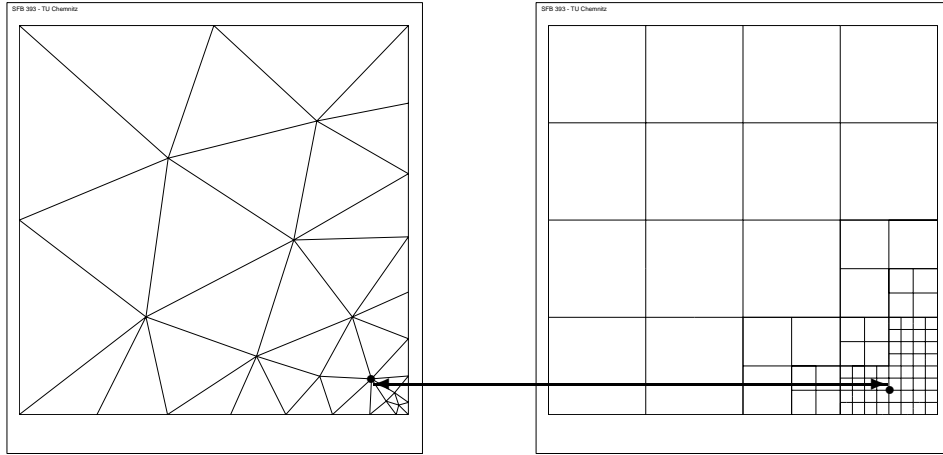
Als Raum \tilde{H} im Fictitious Space Lemma definieren wir den Raum

$$H_h(Q_J^h) = \left\{ \sum_{\text{supp}\Phi_k^{(0)} \subset Q_J^h} \alpha_k^{(0)} \Phi_k^{(0)} + \sum_{q=0}^{J-1} \sum_{(i,j) \in I_q} \sum_{\text{supp}\Phi_k^{(q+1)} \cap D_{ij}^{(q)} \neq \emptyset} \alpha_k^{(q+1)} \Phi_k^{(q+1)}, \right. \\ \left. \alpha_k^{(q)} \in \mathbb{R}, q = 0, 1, \dots, J-1 \right\},$$

wobei $\Phi_k^{(q)}$ die Ansatzfunktionen auf dem Gitter Q_q^h bezeichnen. Die Operatoren

$$R : H_h(Q_J^h) \rightarrow H_h(\Omega^h) \quad \text{und} \quad T : H_h(\Omega^h) \rightarrow H_h(Q_J^h)$$

werden analog zu denen in der Arbeit von G. Globisch und S. Nepomnyaschikh [GN98] definiert, siehe auch [Glo01]. Die dazu erforderliche eindeutige Zuordnung zwischen Knoten der Vernetzung Ω^h und $\tilde{Q}^h = Q_J^h$ ist in der folgenden Abbildung dargestellt.



Weiterhin definieren wir als Operator \tilde{A} den Operator $C_{\Pi_J^h}$ wie folgt:

$$C_{\Pi_J^h}^{-1} U^h = \sum_{\text{supp}\Phi_k^{(0)} \subset Q_J^h} (U^h, \Phi_k^{(0)})_{L_2(Q_J^h)} \Phi_k^{(0)} \\ + \sum_{q=0}^{J-1} \sum_{(i,j) \in I_q} \sum_{\text{supp}\Phi_k^{(q+1)} \cap D_{ij}^{(q)} \neq \emptyset} (U^h, \Phi_k^{(q+1)})_{L_2(Q_J^h)} \Phi_k^{(q+1)} \quad (2.2)$$

für alle $U^h \in H_h(Q_J^h)$. Unter Anwendung des Fictitious Space Lemmas kann der folgende Satz bewiesen werden [Glo98].

Satz Es existieren positive, von der Diskretisierungsschrittweite h unabhängige, Konstanten c_1 und c_2 , so dass

$$c_1 (K^{-1}u, u) \leq (RC_{\Pi_J^h}^{-1}R^*u, u) \leq (K^{-1}u, u) \quad \forall u \in \mathbb{R}^N$$

gilt.

Im Folgenden geben wir noch ein numerisches Beispiel zur Demonstration des Konvergenzverhaltens des Verfahrens der konjugierten Gradienten mit der soeben

beschriebenen Vorkonditionierung an. Es wird die Poisson-Gleichung im Einheitsquadrat gelöst, wobei bei der FE-Diskretisierung als gröbste Vernetzung die in der obigen Abbildung dargestellte Vernetzung mit 31 Knoten verwendet wird. Diese Vernetzung wird sechsmal uniform verfeinert. Als Vorkonditionierer im Verfahren der konjugierten Gradienten wählen wir $RC_{\Pi_j^h}^{-1}R^*$ mit $C_{\Pi_j^h}^{-1}$ aus (2.2). Die Iteration wurde beim Erreichen einer relativen Genauigkeit von 10^{-4} abgebrochen. In der folgenden Tabelle sind die benötigten Iterationszahlen angegeben.

Anz. d. Unbekannten	31	101	361	1361	5281	20801	82561
Anz. d. Iterationen	8	12	13	15	16	19	20

Zahlreiche weitere numerische Experimente sind in [Glo98] dokumentiert.

Wir beschreiben nun einen zweiten Weg zur Konstruktion von Vorkonditionierern unter Ausnutzung des Fictitious Space Lemmas. Für ein gegebenes zweidimensionales Gebiet Ω mit einem glatten Rand $\partial\Omega \in C^2$ konstruieren wir wie folgt eine Vernetzung, wobei wir die Teilschritte zur Netzgenerierung nur in groben Zügen beschreiben. Eine detaillierte Beschreibung ist in der Arbeit von M. Jung, A. Matsokin, S. Nepomnyaschikh und Yu. Tkachov [JMNT01] zu finden.

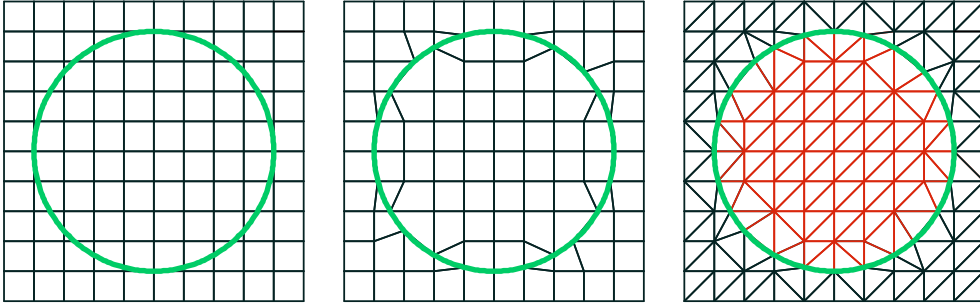
1. Das Gebiet Ω wird in ein Quadrat D eingebettet.
2. Wir definieren Größen σ und h_0 gemäß

$$\sigma = \min \left\{ \frac{R}{2}, \frac{1}{2K} \right\} \quad \text{und} \quad h_0 = \frac{\sigma}{2\sqrt{2}}.$$

Dabei ist K die maximale Krümmung des Randes. $R > 0$ wird so gewählt, dass ein Kreis mit dem Radius R , der den Rand in einem Punkt berührt, keine weiteren Berührungspunkte mit dem Rand hat.

3. Wir generieren ein gleichmäßiges Rechtecksgitter D_{\square}^h mit der Schrittweite $h < h_0$ im Quadrat D .
4. Wir führen eine lokale Modifikation dieses Gitters durch. Wenn der Abstand eines Gitterpunktes von einem Schnittpunkt des Gebietsrandes mit einer Gitterlinie kleiner als $\frac{h}{2}$ ist, wird der Gitterpunkt in diesen Schnittpunkt verschoben. Das lokal modifizierte Gitter wird mit \tilde{D}_{\square}^h bezeichnet.
5. Jedes Viereck des Gitters \tilde{D}_{\square}^h wird in zwei Dreiecke zerlegt. Damit erhalten wir die Vernetzung \tilde{D}_{\triangle}^h .
6. Wir definieren als Vernetzung Ω^h des Gebietes Ω die Vereinigung aller Dreiecke von \tilde{D}_{\triangle}^h , die wenigstens einen Knoten in Ω haben.

In der folgenden Abbildung werden die Teilschritte zur Generierung der Vernetzung Ω^h nochmals illustriert.



Eine Verallgemeinerung des obigen Netzgenerierungsalgorithmus für die Vernetzung von Gebieten mit stückweise glattem Rand ist in [JMNT01] angegeben.

Im Weiteren wird mit $H_h(\Omega^h)$ der Raum bezeichnet, der durch die üblichen stückweise linearen Ansatzfunktionen aufgespannt wird.

Im Folgenden beschreiben wir die Definition der Operatoren R , T und \tilde{A}^{-1} im Fictitious Space Lemma. Sei $h = 2^{-J}s$, s die Länge der Seiten des Quadrats D . Wir definieren Gitterzellen D_{ij} durch

$$D_{ij} = \{(x, y) : x_i \leq x < x_{i+1}, y_i \leq y < y_{i+1}\}.$$

Mit Q^h bezeichnen wir das kleinste Gebiet, das aus Gitterzellen D_{ij} besteht und Ω enthält. S^h ist die Menge der Randknoten von Q^h . Die Gitterzellen von D_{\square}^h werden in zwei Dreiecke zerlegt, so dass wir die Vernetzung D_{\triangle}^h des Quadrates D erhalten. Die Einschränkung von D_{\triangle}^h auf Q^h wird mit Q_{\triangle}^h bezeichnet.

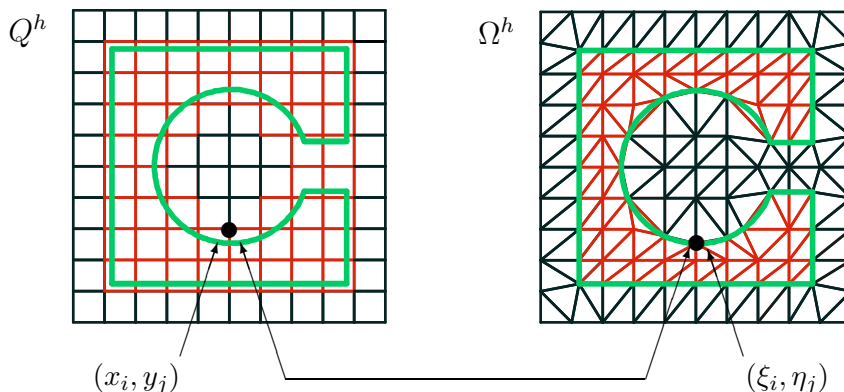
Als Raum \tilde{H} im Fictitious Space Lemma nutzen wir den Raum $H_h(Q_{\triangle}^h)$. Dieser Raum wird durch die über den Dreiecken von Q_{\triangle}^h stetigen, stückweise linearen Funktionen aufgespannt. Diese Funktionen sind auf dem Rand von Q^h identisch Null. Der Operator

$$R : H_h(Q_{\triangle}^h) \rightarrow H_h(\Omega^h)$$

bildet eine gegebene Funktion $U_h \in H_h(Q_{\triangle}^h)$ auf eine Funktion $u_h \in H_h(\Omega^h)$ ab, indem für alle Knoten $(\xi_i, \eta_j) \in \Omega^h$

$$u_h(\xi_i, \eta_j) = (RU_h)(\xi_i, \eta_j) = \begin{cases} U_h(x_i, y_j) & \text{für alle innere Knoten in } \Omega^h, \\ 0 & \text{für Knoten auf dem Rand } \partial\Omega^h, \end{cases}$$

gesetzt wird. Die Beziehung zwischen (x_i, y_j) und (ξ_i, η_j) wird in folgender Abbildung verdeutlicht.



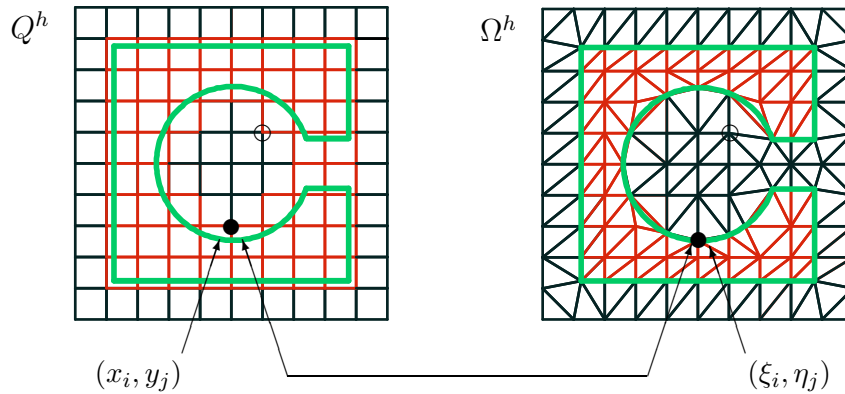
Wir beschreiben nun den Operator

$$T : H_h(\Omega^h) \rightarrow H_h(Q_\Delta^h).$$

Für eine gegebene Funktion $u_h \in H_h(\Omega^h)$ definieren wir eine Funktion $U_h \in H_h(Q_\Delta^h)$ wie folgt: U_h ist Null in Randpunkten von Q^h . Wenn eine eindeutige Beziehung zwischen einem Knoten $(x_i, y_j) \in Q^h$ und einem Knoten $(\xi_i, \eta_j) \in \Omega^h$ besteht, dann wird

$$U_h(x_i, y_j) = (Tu_h)(x_i, y_j) = u_h(\xi_i, \eta_j).$$

gesetzt.



Wenn kein Knoten $(\xi_i, \eta_j) \in \Omega^h$ existiert, der mit einem Knoten $(x_i, y_j) \in D_{kl} \subset Q^h$ korrespondiert (z.B. der Knoten "o"), dann setzen wir

$$U_h(x_i, y_j) = U_h(x_m, y_n),$$

wobei $(x_m, y_n) \in D_{kl}$ und mit (x_m, y_n) korrespondiert ein Knoten in Ω^h . Zur Definition des Operators \tilde{A} werden die folgenden Schritte durchgeführt:

Wir definieren für das Quadrat D eine Folge von Gittern

$$D^{h_0}, D^{h_1}, \dots, D^{h_J} \equiv D^h$$

mit den Gitterschrittweiten $h_\ell = 2^{-\ell}s$, $\ell = 0, 1, \dots, J$. Jedes Viereck in diesen Rechteckgittern wird in zwei Teildreiecke zerlegt, so dass wir eine Folge von Dreieckgittern erhalten. Auf diesen Gittern werden FE-Räume

$$H_h(D^{h_0}) \subset \dots \subset H_h(D^{h_J}) \equiv H_h(D^h)$$

definiert, die von den üblichen stückweise linearen Ansatzfunktionen $\Phi_i^{(\ell)}$ aufgespannt werden. Die Funktionen dieser FE-Räume sind gleich Null auf dem Rand von D . Sei $\tilde{\Phi}_i^{(\ell)}$ die Einschränkung von $\Phi_i^{(\ell)}$ auf Q_Δ^h . Der Operator \tilde{A} wird nun durch

$$\tilde{A}^{-1}U_h = \sum_{\ell=0}^J \sum_{\substack{\text{supp}\Phi_i^{(\ell)} \cap Q^h \neq \emptyset \\ \text{supp}\Phi_i^{(\ell)} \cap S^h = \emptyset}} (U_h, \Phi_i^{(\ell)})_{L_2(Q^h)} \tilde{\Phi}_i^{(\ell)}$$

für alle $U_h \in H_h(Q_\Delta^h)$ definiert.

In [JMNT01] wird der folgende Satz bewiesen.

Satz: Es existieren positive, vom Diskretisierungsparameter h unabhängige Konstanten \underline{c} , \bar{c} , so dass für den Vorkonditionierer $B^{-1} = R\tilde{A}^{-1}R^*$

$$\underline{c}(K^{-1}u, u) \leq (B^{-1}u, u) \leq \bar{c}(K^{-1}u, u) \quad \forall u \in R^N.$$

gilt.

Folglich haben wir einen spektraläquivalenten Vorkonditionierer gefunden.

Zum Abschluss geben wir noch ein numerisches Beispiel an. Wir betrachten die Poisson-Gleichung mit homogenen Randbedingungen in den beiden Gebieten



Die Vernetzungen wurden auf die oben beschriebene Weise generiert. Die Iterationszahlen des Verfahrens der konjugierten Gradienten mit dem soeben beschriebenen Vorkonditionierer sind in der folgenden Tabelle angegeben. Die Iteration wurde beim Erreichen einer relativen Genauigkeit von 10^{-5} beendet.

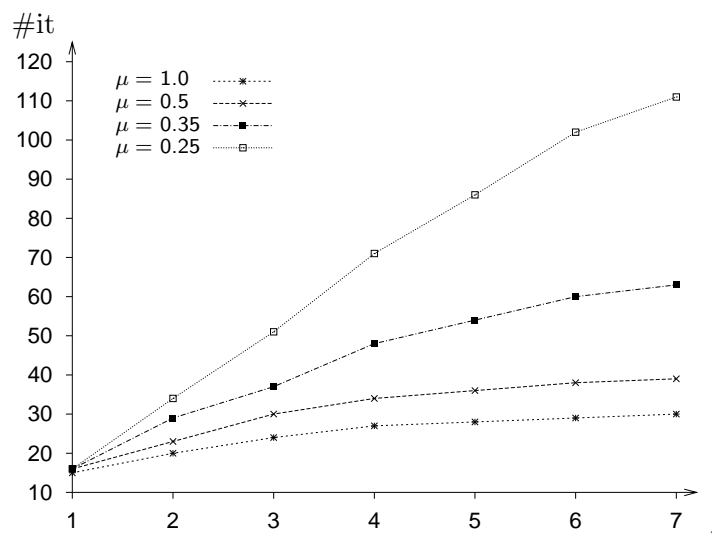
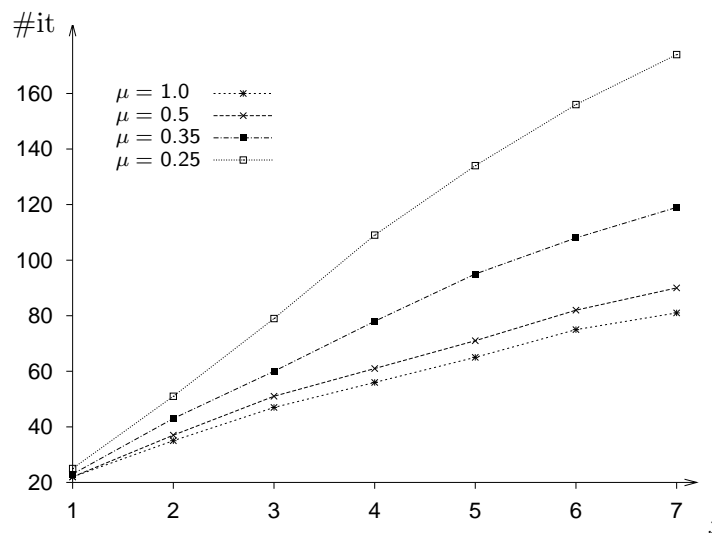
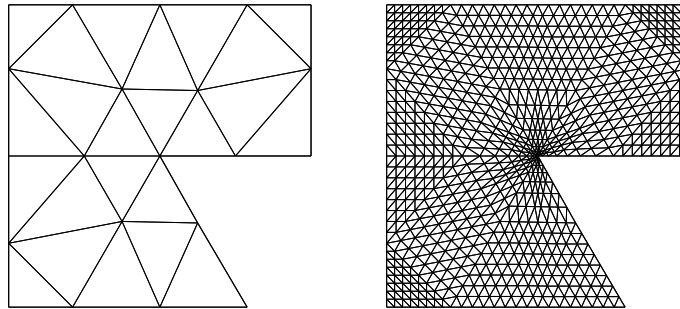
J	5	6	7	8	9	10
Gebiet I	10	14	17	19	22	23
Gebiet II	7	11	13	15	17	19

Die Schrittweite in der Vernetzung des Quadrates D war $h = 2^{-J}$.

In [JNT00] wurden von M. Jung, S. Nicaise und J. Tabka Multilevel-Vorkonditionierer bei FE-Diskretisierungen mit graduierten Netzen untersucht. Der von Raugel [Rau78] vorgeschlagene Algorithmus zur Generierung graduierter Netze liefert keine Netzhierarchie. Jung/Nicaise/Tabka [JNT00] haben einen Vernetzungsalgorithmus entwickelt, der eine hierarchisch aufgebaute Folge von graduierten Netzen erzeugt. Damit ist die Voraussetzung geschaffen, dass zur Lösung der entsprechenden FE-Gleichungssysteme hierarchische Algorithmen eingesetzt werden können. Als Lösungsalgorithmus wurde das Verfahren der konjugierten Gradienten mit dem Vorkonditionierer nach Yserentant und mit einem Multilevel-Diagonal-Scaling-Vorkonditionierer [Zha92] eingesetzt. Es wurde in [JNT00] gezeigt, dass sich das PCG-Verfahren mit dem Vorkonditionierer nach Yserentant genauso verhält wie im Fall quasi-uniformer Netze, d. h., die Iterationszahl wächst wie $\mathcal{O}(J + 1)$. Dabei ist $J + 1$ die Anzahl der verwendeten Netze in der Netzhierarchie. Im Fall des MDS-Vorkonditionierers wächst die Iterationszahl wie $\sqrt{J + 1}$.

Wir demonstrieren dieses Konvergenzverhalten anhand eines Beispiels. Wir betrachten die Poisson-Gleichung in dem in der folgenden Abbildung dargestellten

Gebiet. Diese Abbildung zeigt außerdem die größte Vernetzung und die dritte Verfeinerung. In den folgenden beiden Diagrammen ist die Iterationszahl in Abhängigkeit von der Anzahl der verwendeten Gitter für verschiedene Gradierungsparameter μ (siehe [Rau78, JNT00]) dargestellt. Zuerst zeigen wir die Iterationszahlen bei Anwendung des Vorkonditionierers von Yserentant und in der nächsten Abbildung bei Anwendung des MDS-Vorkonditionierers.



2.4.3 Teilaufgabe Anisotropie: Fehlerschätzer und schnelle Löser

Die erste Phase der Bearbeitung dieser Teilaufgabe war vor allem gekennzeichnet durch den erfolgreichen Abschluss des Habilitationsverfahrens von Th. Apel (Februar 1999) [Ape99a] und des Promotionsverfahrens von G. Kunert (Januar 1999) [Kun99].

A priori Fehlerabschätzungen

Poissonproblem. Kantensingularitäten in der Lösung des Poissonproblems,

$$-\Delta u = f \quad \text{in } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega,$$

in Polyedergebieten können durch anisotrope Netzverfeinerung behandelt werden. In der Arbeit von Th. Apel und M. Dobrowolski (Würzburg) [AD92] wurde der Beweis für Tetraedernetze mit stückweise linearen Ansatzfunktionen unter starken Voraussetzungen an die Regularität der rechten Seite f geführt.

Von Th. Apel wurden in [Ape99b] neben Tetraedernetzen auch Netze aus Dreiecksprismen (Pentaeder) behandelt und die Voraussetzungen auf den klassischen Fall $f \in L^2(\Omega)$ abgeschwächt. Dieser Beweis konnte auf der Basis von ebenfalls in [Ape99b] hergeleiteten anisotropen lokalen Abschätzungen des Fehlers einer modifizierten Scott-Zhang-Interpolierenden geführt werden. Durch die erfolgreiche Behandlung des Falls $f \in L^2(\Omega)$ konnte auch die L^2 -Fehlerabschätzung mit dem Nitsche-Trick gefolgert werden.

In der Habilitationsschrift von Th. Apel [Ape99a] wurden des Weiteren anisotrop graduell verfeinerte Netze beschrieben, für die optimale Fehlerabschätzungen für quadratische Ansatzfunktionen bewiesen werden konnten.

Stokesproblem. Die Lösungskomponenten $u = (u_1, u_2, u_3)$ und p des Stokessystems

$$-\Delta u + \nabla p = f \quad \text{in } \Omega, \quad \nabla \cdot u = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega,$$

besitzen Singularitäten in der Umgebung von Kanten, die ähnlich zu denen der Lösung des Poissonsproblems sind. Zur Vermeidung einer reduzierten Konvergenzordnung liegt es daher nahe, das Stokesproblem mit einer Finite-Elemente-Methode über einem analog zum Poissonproblem anisotrop graduell verfeinerten Netz zu lösen.

Für die Stabilität der Methode ist es notwendig, dass die Approximationsräume für u und p eine Inf-Sup-Bedingung mit einer Konstante, die unabhängig vom Streckungsverhältnis (*aspect ratio*) der Elemente ist, erfüllen. Für die nichtkonforme Methode mit Crouzeix-Raviart-Elementen (nichtkonformen \mathcal{P}_1 -Elementen) für die Geschwindigkeit und stückweise konstanten Funktionen für den Druck ist dies einfach zu zeigen [ANS00]. Diese Eigenschaft gilt jedoch für viele andere, über isotropen Netzen erfolgreich verwendete Raumpaare nicht. Dazu erarbeitet der Masterstudent M. Randrianarivony eine umfassende experimentelle Studie [Ran01];

diese Fragestellung soll im neu zu beantragenden Teilprojekt A11 weiter verfolgt werden. Erst danach kann entschieden werden, welche Raumpaare in den parallelen adaptiven Finite-Elemente-Code implementiert werden sollen.

Für die Abschätzung des Diskretisierungsfehlers benötigt man eine Abschätzung des Interpolationsfehlers. Lokale Abschätzungen wurden durch Th. Apel, S. Nicaise³ (Valenciennes) und J. Schöberl⁴ (Linz) hergeleitet [ANS99]. Der globale Interpolationsfehler kann mit den gleichen Techniken wie beim Poissonproblem abgeschätzt werden. Dabei stellt sich heraus, dass einige technische Schwierigkeiten durch nichtkonforme Elemente vermieden werden. Insbesondere ist die Crouzeix-Raviart-Interpolierende für Funktionen mit geringer Regularität, z. B. H^1 , definiert (im Gegensatz zur Lagrange-Interpolierenden) und erfüllt in schwachem Sinne die Dirichlet-Randbedingung auf dem gesamten Rand (im Gegensatz zur Scott-Zhang-Interpolierenden).

Das beschriebene Raumpaar führt auf eine nichtkonforme Methode. Für die Abschätzung des Diskretisierungsfehlers benötigt man daher auch eine Abschätzung des Konsistenzfehlers unter den schwachen Regularitätsannahmen infolge von Kantensingularitäten. Diese stellte die eigentliche Herausforderung dar. Eine solche Abschätzung wurde schließlich zunächst für den technisch einfacheren Fall der Diskretisierung des Poissonproblems mit Crouzeix-Raviart-Elementen gezeigt [ANS99] und dann auf den Fall des Stokes-Problems übertragen [ANS00]. Dabei wurde ein prismatisches Gebiet vorausgesetzt. Das Endresultat lautet

$$\|u - u_h\|_{1,h} + \|p - p_h\|_0 \leq Ch\|f\|_0.$$

In einem allgemeinen polyedrischen Gebiet sind sowohl Kanten- als auch Eckensingularitäten zu behandeln. Das Netz sollte anisotrop zu den Kanten hin und isotrop zu den Ecken hin verfeinert werden. Vorschläge zur Konstruktion solcher Netze sind von Th. Apel und S. Nicaise gemacht worden [AN98], der Fehler ist jedoch nur für eine konforme Approximation des Poissonproblems abgeschätzt worden. Wir vermuten, dass die gleichen Netze auch für das Stokesproblem geeignet sind. Die Inf-Sup-Bedingung ist erfüllt. Der Interpolationsfehler kann wie in [AN98] abgeschätzt werden. Der kritische Punkt ist der Konsistenzfehler. Die Abschätzung in [ANS99, ANS00] nutzt wesentlich die Tensorproduktstruktur des Netzes, so dass die Verallgemeinerung auf allgemeine Polyederprobleme noch offen ist.

A *posteriori* Fehlerschätzer

Im Bearbeitungszeitraum wurden von G. Kunert mehrere *a posteriori* Fehlerschätzer vorgeschlagen, die auch auf anisotropen Netzen robust sind. Die Hauptresultate sind:

- Es wurden adäquate Beschreibungen der anisotropen Gegebenheiten eingeführt und verbessert und ein umfangreiches Instrumentarium zur Analyse der Fehlerschätzer bereitgestellt bzw. untersucht.

³Aufenthalte von Th. Apel an der Universität Valenciennes: 10.–24.06.98 und 20.09.–01.10.98, Aufenthalt von S. Nicaise in Chemnitz: 14.–17.12.99

⁴Aufenthalt von J. Schöberl in Chemnitz: 12.–25.07.98, Aufenthalt von Th. Apel in Linz: 13.–18.03.00

- Alle anisotropen Fehlerschätzer wurden rigoros untersucht. Dabei haben sich einige wesentliche Hauptmerkmale herauskristallisiert, die der anisotropen Fehlerschätzung innewohnen scheinen und der Anisotropie von Netz und Lösung geschuldet sind.

Grundlegende Aspekte anisotroper Fehlerschätzung sowie ihrer spezifischen Schwierigkeiten sind zunehmend verstanden.

- Eine wesentliche Erkenntnis besagt, dass das anisotrope Netz in etwa wie die anisotrope Lösung ausgerichtet sein muss, damit obere und untere Fehlerschranken die gleiche Qualität haben (*Effizienz* und *Zuverlässigkeit* der Fehlerschätzer). Diese Ausrichtung wird mit einer so genannten *matching function* gemessen. Das betrifft alle vorgeschlagenen Fehlerschätzer.

Die genannte Eigenschaft ist von praktischer Seite sofort einleuchtend, geht hier jedoch explizit in die Fehlerschätzung ein.

- Alle Fehlerschätzer wurden implementiert und ausgiebig numerisch getestet. Es entstand das Fehlerschätzer-Modul im Programm-Paket *SPC-PM-Po3D*. Besonderen Wert wurde auf die Implementierung für Parallelrechner gelegt.

In den folgenden Unterpunkten werden die Teilergebnisse im Detail vorgestellt.

Problembeschreibung und Hilfsmittel. Die Beziehung zwischen einem anisotropen Netz und der anisotropen Lösung wurde völlig neu beschrieben, s. unten. Es steht jetzt eine ganze Familie von *bubble functions* zur Verfügung. Außerdem wurden neue oder verbesserte Abschätzungen hergeleitet, die jedoch neue, sehr technische Beweise erforderten. Verbesserte inverse Ungleichungen bzw. Äquivalenzen erlauben die Behandlung eines singular gestörten Reaktions-Diffusions-Modellproblems.

Poisson Problem – Energienorm – Residuenfehlerschätzer. Dieser Schätzer war schon aus [Kun97] bekannt und bildete teilweise die Grundlage der Beweise für andere Schätzer. Eine verbesserte Version wurde in [Kun00a] veröffentlicht. Als weiteres neues Resultat wurde gemeinsam mit R. Verfürth gezeigt, dass das Element-Residuum weggelassen werden kann, d.h. alleine die Gradientensprünge über die Flächen bestimmen den Fehlerschätzer [KV00].

Als Nebenresultat der neuesten Forschung über singular gestörte Reaktions-Diffusions-Probleme [Kun01e] ergab sich, dass auch der altbekannte anisotrope Residuenschätzer für das Poisson-Problem modifiziert werden kann. Mit einer anderen Skalierung der Gradientensprünge kann der Fehlerschätzer verändert (vergrößert) werden, wobei die Struktur der Abschätzungen erhalten bleibt. Dies scheint eine Verbesserung zu sein. Darüber und über die Auswirkungen auf die gesamte Theorie anisotroper Fehlerschätzung muss jedoch die weitere Forschung befinden.

Dieses letzte Beispiel verdeutlicht gleichzeitig die Schwierigkeiten und Überraschungen, die das gesamte Thema auch nach längerer intensiver Forschung noch bereithält.

Poisson Problem – Energienorm – Lokales Problem. Die Basis dieses Fehlerschätzers war schon aus der letzten Berichtsperiode bekannt. Die Behandlung

von Neumann- und Robin-Randbedingungen erforderte jetzt verfeinerte Ungleichungen, Äquivalenzen und natürlich auch (technische) Beweise. Der resultierende Fehlerschätzer wurde in [Kun01a] veröffentlicht.

Außerdem wurde versucht, aus der lokalen Lösung weitere Informationen zu extrahieren (Richtung und Streckungsverhältnis). Dies scheiterte jedoch, da das Verhalten der lokalen Lösung schon zu wesentlichen Teilen von der Geometrie des zugrunde liegenden Tetraeders bestimmt zu sein scheint.

In [Kun01a] wurden zwei weitere anisotrope Schätzer auf Basis lokaler Probleme analysiert, die beide isotropen Vorbildern entlehnt sind. Die theoretischen Abschätzungen besagten, dass einer dieser Schätzer im anisotropen Fall versagen kann, was durch die numerischen Experimente eindrucksvoll bestätigt wurde. Das ist ein Beispiel für ein typisches, spezifisches Wesensmerkmal anisotroper Fehlerschätzung.

Poisson Problem – H^1 -Norm – Zienkiewicz-Zhu-Schätzer. Erste Ideen und Ansätze wurden schon in [Kun97] vorgestellt, dort aber nur für tensorproduktartige Tetraedernetze. Ab Mitte 2000 kam es zu einer verstärkten Zusammenarbeit mit S. Nicaise (Valenciennes, Frankreich), wobei die existierenden Hilfsmittel und Beweise kritisch beleuchtet sowie neue Ideen diskutiert wurden. Es zeigte sich, dass die Voraussetzungen an die Netze weniger gravierend sind. Die intensive Diskussion Anfang 2001 wird im Frühjahr in einem Preprint münden.

Poisson Problem – L_2 -Norm – Residuenfehlerschätzer. Der schon bekannte Vorschlag aus [Kun97] konnte verbessert werden, indem modifizierte *bubble functions* hergeleitet und genutzt wurden. Für diese Funktionen konnten geeignete inverse Ungleichungen bzw. Abschätzungen bewiesen werden, die im Gegensatz zu [Kun97] ohne eine zusätzliche geometrische Netzvoraussetzung auskommen. In der Arbeit [Kun01c] wurde weiterhin die Rolle der H^2 -Regularität diskutiert, die für die theoretische Analysis benötigt wird. Numerische Experimente legen nahe, dass man auf die H^2 -Regularität verzichten kann, solange das anisotrope Netz der Lösung angepasst ist. Diese Netzanpassung entzog sich leider einer weitergehenden Analyse.

In Analogie zum Energienorm-Residuenschätzer wurde in [KV00] gezeigt, dass die Gradientensprünge alleine ausreichend für robuste Fehlerschätzung sind.

Poisson Problem – L_2 -Norm – Lokales Problem. Analog zur Energienorm (s. oben) konnte auch ein lokales Problem formuliert werden, das eine Schätzung des L_2 -Fehlers erlaubt. Diese Formulierung erforderte aber sehr kompliziert aufgebaute *bubble functions*. Da die numerische Realisierung nur mit unverträglich hohem Rechen- und Programmier-Aufwand möglich schien, wurde dieser Fehlerschätzer nicht weiter verfolgt.

Reaktions-Diffusions-Problem – Energienorm – Residuenfehlerschätzer. Beim betrachteten singular gestörten Reaktions-Diffusions-Modellproblem ist eine Hauptschwierigkeit, Schranken für den Fehler nach *oben* und *unten* zu finden, die von gleicher Qualität sind, wenn der singuläre Störungsparameter ε klein wird (Robustheit für $\varepsilon \rightarrow 0$). Erste Ansätze waren schon aus der letzten Berichtsperiode bekannt. Die Beweise erfordern (im Vergleich zum Poisson Problem) ein erweitertes

Instrumentarium (z.B. *bubble functions* und inverse Ungleichungen). Der Preprint [Kun00c] wird demnächst als Artikel erscheinen [Kun01d].

In Analogie zum Poisson Problem wurde in [KV00] gezeigt, dass die Gradientensprünge alleine ausreichend für robuste Fehlerschätzung sind.

Dieser Fehlerschätzer verdeutlicht auch die Überraschungen, die das Thema Fehlerschätzer auch nach langer intensiver Forschung bereithält. So schien die Skalierung der Residuen bei diesem Fehlerschätzer seit längerem bekannt zu sein. Erst die Beschäftigung mit einem Schätzer auf Basis eines lokalen Problems (s.u.) führte zu anderen, möglicherweise besseren Skalierungen. Diese Ideen wiederum sind auch beim Poisson Problem anwendbar. Die Auswirkungen auf alle oben beschriebenen Schätzer sind jedoch noch nicht erforscht.

Reaktions-Diffusions-Problem – Energienorm – Lokales Problem. Dieser Fehlerschätzer ist die Erweiterung des Lokalen-Problem-Schätzers für das Poisson Problem auf ein Reaktions-Diffusions-Problem. Was auf den ersten Blick als einfache Kombination bekannter Ideen und Hilfsmittel schien, offenbarte sich im Detail als erstaunlich schwierig. Wie schon erwähnt, mussten im Laufe der Analyse der vorherige Fehlerschätzer modifiziert werden und die Abschätzungen geeigneter *bubble functions* verbessert werden. Der Preprint [Kun01e] ist als Artikel eingereicht.

Beziehung anisotropes Netz – anisotrope Lösung. Im Laufe aller Untersuchungen hat sich zunehmend herauskristallisiert, dass *Effizienz* und *Zuverlässigkeit* von Fehlerschätzern auf *beliebigen* anisotropen Netzen nicht gleichzeitig erreicht werden kann. Das kann nur erwartet werden, wenn ein anisotropes Netz passend zur anisotropen Lösung gewählt wird. Dieses Verhalten scheint nicht an einer unausgereiften Analysis zu liegen, sondern im Gegenteil ein typisches Wesensmerkmal anisotroper Fehlerschätzung zu sein.

Bei den besprochenen Fehlerschätzern wurde deshalb eine so genannte *matching function* eingeführt, die den Grad der Anpassung eines anisotropen Netzes \mathcal{T} an eine anisotrope Funktion v misst. Für isotrope Netze oder angepasste anisotrope Netze hat diese *matching function* den Wert $\mathcal{O}(1)$, unabhängig von der Anzahl der Freiheitsgrade. Für unangepasste anisotrope Netze jedoch kann der Wert $\gg 1$ sein. Diese *matching function* geht in die obere Fehlerschranke ein, siehe auch [Kun99, Kun00a].

Implementation und Programmierung. Alle genannten Fehlerschätzer wurden in das dreidimensionale parallele Programm-Paket *Po3D* implementiert und bilden das Fehlerschätzer-Modul. Damit wurde großer Wert auf die experimentelle Bestätigung der theoretischen Aussagen gelegt. Ebenfalls wurden die theoretischen Grenzfälle untersucht, um das Versagen ungeeigneter Schätzer zu demonstrieren (siehe z.B. Lokaler-Problem-Schätzer [Kun01a]).

Netzadaption

Für einen ersten theoretischen Zugang erwies es sich als günstig, die anisotrope Netzadaption (formal) aufzuspalten in die beiden Teile *Informationsgewinnung* sowie *Netzverfeinerung*. Im Schritt *Informationsgewinnung* sind vor allem die Streckungsrichtungen und -verhältnisse und die (quasi-optimale) Elementgröße

gesucht. Während sich die letzte Information aus den anisotropen *a posteriori*-Fehlerschätzern ablesen lässt, ist dies bei den Streckungsinformationen nicht der Fall. Um trotzdem die gewünschten Informationen zu erhalten, werden häufig die Hesse-Matrix der Lösung und ihre Eigenvektoren/Eigenwerte betrachtet, siehe zum Beispiel [PVMZ87].

In [Kun00b] wurde nun untersucht, welche Eigenschaften diese mit Hilfe der Hesse-Matrix gewonnenen Netze besitzen. Speziell wurde analysiert, ob die Netze mit der anisotropen Lösung ausgerichtet sind, was eine wesentliche Bedingung für die anisotropen *a posteriori* Fehlerschätzer ist (siehe vorherige Abschnitte). Es konnte gezeigt werden, dass dies unter gewissen heuristischen Annahmen der Fall ist, d.h. die oben angesprochene *matching function* liefert die gewünschten Werte $\mathcal{O}(1)$. Die heuristischen Voraussetzungen sind der heuristischen Natur der Informationsgewinnung geschuldet, wurden aber trotzdem so stringent wie möglich formuliert und numerisch analysiert. Der Preprint wurde zur Veröffentlichung eingereicht.

In der Arbeit [AGJM01] von Th. Apel, S. Grosman, P. Jimack (Leeds) und A. Meyer⁵ wird eine weitere Strategie zur Steuerung der anisotropen Netzverfeinerung beschrieben. Dazu werden *a posteriori* Fehlerschätzer betrachtet, die eine Approximation des Fehlers in Form einer Funktion berechnen, z. B. durch Lösung lokaler Probleme. Die Erfahrungen zeigen, dass der Gradient dieser Fehlerfunktion das Potential zur Netzsteuerung besitzt.

In der nächsten Antragsperiode soll auf der Grundlage dieser Arbeiten mit der programmtechnischen Umsetzung der Adaption begonnen werden. Die entscheidende Forderung (und Herausforderung) ist dabei die Einbettung in eine Multigrid-/Multilevel-Programmumgebung.

Vorkonditionierung

Wir betrachten die Lösung des Finite-Elemente-Gleichungssystems

$$A\underline{u} = \underline{f}.$$

Nach der Theorie von D. Braess und W. Hackbusch [BH83] konvergiert der V-Zyklus eines Multigrid-Verfahrens mit m Glättungsschritten pro Level mit einer Rate $\kappa \leq C/(C + m)$, wenn man eine Abschätzung der Form

$$\|\underline{u}_h - \underline{u}_H\|_D \leq C\|\underline{u}_h\|_A$$

beweisen kann. Dabei sind \underline{u}_h und \underline{u}_H Lösungen des FE-Gleichungssystems auf zwei aufeinander folgenden Netzen \mathcal{T}_l und \mathcal{T}_{l-1} unserer Netzhierarchie $\mathcal{T}_0, \dots, \mathcal{T}_L$; $\|\cdot\|_D$ und $\|\cdot\|_A$ sind die durch die Glättungsmatrix D_l und die Steifigkeitsmatrix A_l induzierten Normen.

⁵Aufenthalte von Th. Apel in Leeds: 14.–19.12.98, 25.06.–28.06.99, 02.07.–06.07.99, 16.–23.02.00, 06.–18.08.00, Aufenthalte von A. Meyer in Leeds: 31.5.–4.6.99, 12.–18.08.00, Aufenthalte von P. Jimack in Chemnitz: 14.–19.03.1999, 8.–11.08.1999, 7.–12.11.1999, 16.–20.04.00, 10.–15.09.00, 11.–16.03.01

Betrachten wir eine Folge von uniformen isotropen Netzen, dann folgt obige Abschätzung aus der Abschätzung der Differenz der entsprechenden Finite-Elemente-Funktionen

$$\|u_h - u_H\|_0 \lesssim h \|u_h\|_1$$

und den Normäquivalenzen

$$\|\underline{u}_h\|_D \sim h^{-1} \|u_h\|_0 \quad \text{und} \quad \|u_h\|_1 \sim \|\underline{u}_h\|_A.$$

Dies gilt nicht mehr für eine Folge anisotroper Netze, sogar wenn man im einfachsten Fall Rechtecknetze aus gleich großen Elementen mit den Größenparametern h_{\min} und h_{\max} betrachtet. Es gilt lediglich

$$\|u_h - u_H\|_0 \lesssim h_{\max} \|u_h\|_1 \quad \text{und} \quad \|\underline{u}_h\|_D \sim h_{\min}^{-1} \|u_h\|_0,$$

was zur unzureichenden Abschätzung

$$\|\underline{u}_h - \underline{u}_H\|_D \lesssim \frac{h_{\max}}{h_{\min}} \|\underline{u}_h\|_A$$

führt. Als Abhilfe schlagen verschiedene Autoren, z. B. W. Hackbusch [[Hac89](#)], die Verwendung von Linienglätttern vor, wobei alle Knoten, die den Abstand h_{\min} voneinander haben, zu Linien zusammengefasst werden. In diesem Fall gilt

$$\|\underline{u}_h\|_D \sim h_{\max}^{-1} \|u_h\|_0 + \|\partial_y u_h\|_0,$$

was für den Beweis der gesuchten Abschätzung hinreichend ist.

Will man diese Idee auf den Fall der anisotropen graduellen Verfeinerung in der Umgebung von Kanten anwenden, so stellt man zunächst fest, dass die Elemente nur in eine Richtung gestreckt sind und in zwei Richtungen eine kleine Ausdehnung haben. Statt eines Linienglätters müsste folglich ein Ebenenglätter angewendet werden. Dies ist erfolgversprechend und wird von J. Seidel in der Diplomarbeit untersucht [[Sei01](#)]. Allerdings sind Ebenenglätter deutlich aufwendiger als Linienglätter.

Einen alternativen Zugang bildet die Verwendung von Semicoarsening-Strategien, siehe z. B. M. Griebel und P. Oswald [[GO95](#)], in denen das anisotrope Netz solange nur in einer Richtung vergrößert wird, bis keine Anisotropie mehr vorliegt. Es kann dann eine verbesserte Abschätzung

$$\|u_h - u_H\|_0 \lesssim h_{\min} \|u_h\|_1$$

bewiesen werden.

Linienglätter und Semicoarsening können auch kombiniert werden. Wir betrachten dazu das zweidimensionale Beispiel einer Folge anisotroper Netze aus Rechtecken mit den Größenparametern h_x und h_y . Für ein Multigrid-Verfahren mit Semicoarsening in x -Richtung und einem Linienglätter in y -Richtung kann man

$$\|\underline{u}_h\|_D \sim h_x^{-1} \|u_h\|_0 + \|\partial_y u_h\|_0$$

und

$$h_x^{-1} \|u_h - u_H\|_0 + \|\partial_y(u_h - u_H)\|_0 \lesssim \|u_h\|_1$$

beweisen, was auf die für den Multigrid-Konvergenzbeweis benötigte Abschätzung führt. Es ist insbesondere zu bemerken, dass diese Abschätzung unabhängig von der Streckungsrichtung der Elemente gilt.

Th. Apel und J. Schöberl⁶ (Linz) schlagen nun für das dreidimensionale Problem mit Kantensingularität vor [AS00], Linienglätter in Kantenrichtung und Semicooarsening senkrecht zur Kante zu verwenden. Der Multigrid-Konvergenzbeweis erfolgt mit der genannten Technik, allerdings mit Modifikationen infolge der nicht vorhandenen Regularität ($u \notin H^2(\Omega)$) der Lösung u der Ausgangsaufgabe. Hier konnten Ideen von H. Yserentant verwendet werden, der in [Yse86b] einen Multigrid-Beweis für den zweidimensionalen Fall mit Eckensingularität führt. In [AS00] wurden die Abschätzungen

$$\|\underline{u}_h\|_D \sim h^{-1} \|r^{-\beta} u_h\|_0 + \|\partial_z u_h\|_0$$

und

$$h^{-1} \|r^{-\beta}(u_h - u_H)\|_0 + \|\partial_z(u_h - u_H)\|_0 \lesssim \|u_h\|_1$$

bewiesen, wobei h hier die maximale Elementausdehnung im Netz ist und eine wohldefinierte graduelle Netzverfeinerung zugrunde gelegt wurde.

Das so begründete Verfahren erfordert die Unterstützung des Semicooarsening durch entsprechende Datenstrukturen, ist dann aber leicht implementierbar. Die Ergebnisse in Testbeispielen sind überzeugend, siehe dazu [AS00].

2.4.4 Teilaufgabe Löser für Platten- und Schalenprobleme

Wie in 2.3.4 ausgeführt, sind die Hauptergebnisse für diese Teilaufgabe in den Arbeiten von Michael Theß [The98, The99] nachzulesen. Es wurden jeweils optimale Vorkonditionierer mit BPX-, Multigrid- und Multigrid-DD-Techniken für die Koiter-Schale bei BFS- sowie Adini-Elementen bewiesen.

Analog zu den wichtigen kubischen Ansatzfunktionen bei oben genannten Rechteckselementen wurden zu Beginn des Berichtszeitraums FE-Räume mit kubischen Polynomen und Dreiecksvernetzungen betrachtet. Mit Hilfe des *Fictitious Space Lemmas* konnte ein effizienter, gut parallelisierbarer Vorkonditionierer für den Raum mit Hermite-Dreiecken (je 3 Freiheitsgrade an Eckknoten: Wert und Gradient) angegeben werden, vorerst für den Fall von Differentialoperatoren 2. Ordnung. Hier gibt es weder eine Einbettung $\mathbb{V}_{2h}^{\text{Hermite}} \not\subset \mathbb{V}_h^{\text{Hermite}}$ (non nested), noch ist $\mathbb{V}_h^{(1)}$ (lineare Elemente) ein Teilraum von $\mathbb{V}_h^{\text{Hermite}}$. Mit dem *Fictitious Space Lemma* gelingt wieder ein fast optimaler Vorkonditionierer unter Nutzung von

$$\dots \subset \mathbb{V}_{2h}^{(1)} \subset \mathbb{V}_h^{(1)} \subset \mathbb{V}_h^{(3)} \quad \text{und} \quad \mathbb{V}_h^{\text{Hermite}} \subset \mathbb{V}_h^{(3)},$$

⁶Aufenthalt von J. Schöberl in Chemnitz: 12.–25.07.98, Aufenthalt von Th. Apel in Linz: 13.–18.03.00

indem ein größerer Raum $\mathbb{V}_h^{(3)}$ von stückweise kubischen Funktionen als Hilfsraum benutzt wird [Mey99a, Mey99b].

In der Anwendung auf Schalen- und Plattenprobleme ergab sich nicht sofort eine Analogie beim DKT-Element. Deshalb wird seit Beginn des Jahres 2000 intensiver die modernere Behandlung solcher Probleme über die Reissner-Mindlin-Formulierung und mit der MITC-Elemente-Familie betrachtet. Hierzu begann S. Derezine innerhalb seines Promotionsstudiums mit der Einarbeitung in diese Problematik, die in der Fortsetzungsphase im Teilprojekt A11 weiterbearbeitet werden soll.

2.4.5 Teilaufgabe p - und hp -Methoden

Zur Konstruktion von Vorkonditionierungsmatrizen für Steifigkeitsmatrizen, die bei der Diskretisierung mittels p -Version der Finite-Elemente-Methode entstehen, wurde der im Abschnitt 2.3.5 beschriebene Weg genutzt.

Schur-Komplement-Vorkonditionierer

Im Rahmen der Diplomarbeit [Beu99] wurden von S. Beuchler Schur-Komplement-Vorkonditionierer basierend auf Basistransformationen in besser geeignete Polynombasen entwickelt und untersucht. Dabei konnte das optimale bzw. suboptimale Verhalten der Vorkonditionierer bezüglich wachsendem Polynomgrad p bestätigt werden.

Vorkonditionierer für das innere Problem

Die Matrix K_I in (2.1) (siehe Abschnitt 2.3.5) ist eine Blockdiagonalmatrix. Zu jedem finiten Element (Rechteck) gehört ein Block $K_{I,el}$ von $K_I = \text{blockdiag}(K_{I,el})$. Bei entsprechender Nummerierung der Unbekannten sind die Matrizen $K_{I,el}$ ebenfalls Blockdiagonalmatrizen mit Blöcken $K_{I,el,i}$, $i = 1, 2, 3, 4$ (für Details siehe [Beu00]). Zur Vorkonditionierung der Matrizen $K_{I,el,i}$ wurden von S. Beuchler Modifikationen der in [JK97] angegebenen Vorkonditionierer vorgeschlagen. Für den entsprechenden Vorkonditionierer $C_{I,el}$ wurden die Spektraläquivalenzungleichungen

$$\underline{c}(C_{I,el}v, v) \leq (K_{I,el,i}v, v) \leq \bar{c}(1 + \log p)(C_{I,el}v, v) \quad (2.3)$$

mit positiven, von p unabhängigen Konstanten \underline{c} , \bar{c} für $i = 1, 2, 3, 4$ bewiesen. Die Matrix $C_{I,el}$ hat $\mathcal{O}(p^2)$ Nicht-Null-Einträge. Es bestand das Ziel darin, Auflösungsverfahren für das Vorkonditionierungsgleichungssystem

$$C_{I,el}\underline{u}_p = \underline{f}_p$$

zu finden, die einen Arithmetikaufwand von $\mathcal{O}(p^2)$ erfordern. Es wurde gezeigt, dass die vorgeschlagene Vorkonditionierungsmatrix $C_{I,el}$ bis auf einen Faktor mit der Steifigkeitsmatrix \tilde{K} übereinstimmt, die aus der FE-Diskretisierung der folgenden Aufgabe resultiert, wenn stückweise lineare Ansatzfunktionen über gleichschenkligen, rechtwinkligen Dreiecken genutzt werden.

Gesucht ist $u \in V_0 = \{u \in H^1(\Omega_{\text{el}}) : u = 0 \text{ auf } \partial\Omega_{\text{el}}\}$, $\Omega_{\text{el}} = (0, 1) \times (0, 1)$, so dass

$$a(u, v) = \langle F, v \rangle \quad \forall v \in V_0 \quad (2.4)$$

mit

$$a(u, v) = \int_{\Omega_{\text{el}}} (y^2 u_x v_x + x^2 u_y v_y) \, dx dy, \quad \langle F, v \rangle = \int_{\Omega_{\text{el}}} f v \, dx dy.$$

Zur Lösung der bei der FE-Diskretisierung der Aufgabe (2.4) entstehenden Gleichungssysteme wurden Mehrgitter-Verfahren eingesetzt. Im Weiteren seien

$$\begin{aligned} V_k &= \text{span}\{\Phi_k^{(i)} : i \in \omega_k\}, \\ V_{k-1} &= \text{span}\{\Phi_{k-1}^{(i)} : i \in \omega_{k-1}\}, \\ T_k &= \text{span}\{\Phi_k^{(i)} : i \in \omega_k \setminus \omega_{k-1}\}. \end{aligned}$$

Dabei wird vorausgesetzt, dass für das Gebiet Ω_{el} eine Folge ineinander enthaltener Dreiecksnetze \mathcal{T}_k , $k = 1, 2, \dots, \ell$, generiert wurde. Die Funktionen $\Phi_k^{(i)}$ sind die üblichen stückweise linearen Ansatzfunktionen. Die Indexmengen ω_k und ω_{k-1} enthalten die Knotennummern der Knoten im Netz \mathcal{T}_k bzw. \mathcal{T}_{k-1} .

Konvergenzabschätzungen konnten für Mehrgitter-Verfahren vom Projektionstyp hergeleitet werden. Solche Mehrgitter-Verfahren laufen wie folgt ab:

Gegeben sei die Startnäherung $u_k^{(j,0)} \in V_k$.

1. Vorglättung

$$\begin{aligned} \text{Bestimme} \quad u_k^{(j,1)} &\in u_k^{(j,0)} + T_k : \|u_k^{(j,1)} - u_{k,*}^{(j,1)}\| \leq \varrho_1 \|u_k^{(j,0)} - u_{k,*}^{(j,1)}\|, \\ \text{wobei} \quad u_{k,*}^{(j,1)} &\in u_k^{(j,0)} + T_k : a(u_{k,*}^{(j,1)}, v) = \langle F, v \rangle \quad \forall v \in T_k. \end{aligned}$$

2. Grobgitterkorrektur

$$\begin{aligned} \text{Bestimme} \quad u_k^{(j,2)} &\in u_k^{(j,1)} + V_{k-1} : \|u_k^{(j,2)} - u_{k,*}^{(j,2)}\| \leq \varrho_2 \|u_k^{(j,1)} - u_{k,*}^{(j,2)}\|, \\ \text{wobei} \quad u_{k,*}^{(j,2)} &\in u_k^{(j,1)} + V_{k-1} : a(u_{k,*}^{(j,2)}, v) = \langle F, v \rangle \quad \forall v \in V_{k-1}. \end{aligned}$$

3. Nachglättung

$$\begin{aligned} \text{Bestimme} \quad u_k^{(j,3)} &\in u_k^{(j,2)} + T_k : \|u_k^{(j,3)} - u_{k,*}^{(j,3)}\| \leq \varrho_3 \|u_k^{(j,2)} - u_{k,*}^{(j,3)}\|, \\ \text{wobei} \quad u_{k,*}^{(j,3)} &\in u_k^{(j,2)} + T_k : a(u_{k,*}^{(j,3)}, v) = \langle F, v \rangle \quad \forall v \in T_k. \end{aligned}$$

Setze $u_k^{(j+1,0)} = u_k^{(j,3)}$.

Für einen derartigen Mehrgitter-Algorithmus hat Schieweck [Schie86] das folgende Konvergenzresultat bewiesen. Es gilt

$$\|u_k^{(j+1,0)} - u_k\| \leq \eta \|u_k^{(j,0)} - u_k\|, \quad (2.5)$$

mit

$$\eta = \varrho_2 + (1 - \varrho_2)[\varrho_1 + (1 - \varrho_1)\gamma][\varrho_3 + (1 - \varrho_3)\gamma]. \quad (2.6)$$

Dabei ist u_k die Lösung des Problems: Gesucht ist $u_k \in V_k$, so dass

$$a(u_k, v_k) = \langle F, v_k \rangle \quad \forall v_k \in V_k$$

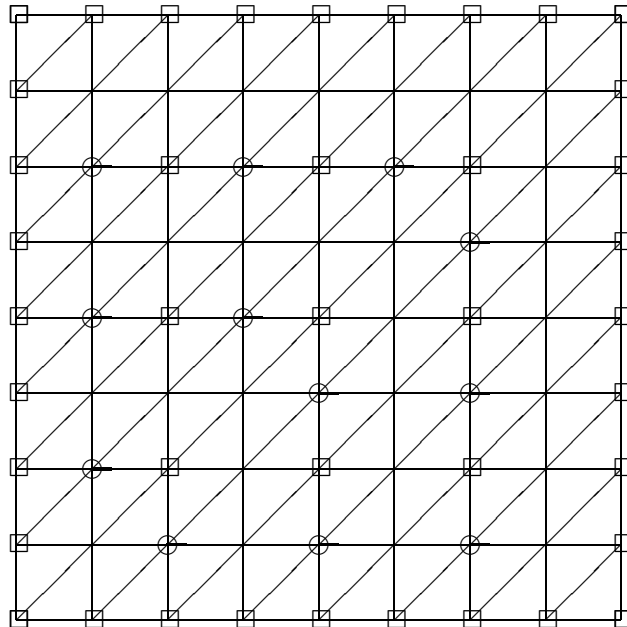
gilt. Mit $\|\cdot\|^2$ ist die energetische Norm $\|\cdot\|^2 = a(\cdot, \cdot)$ bezeichnet und γ ist Konstante aus der verstärkten Cauchy-Ungleichung

$$|a(u_k, v_{k-1})| \leq \gamma \|u_k\| \|v_{k-1}\| \quad \forall u_k \in T_k, v_{k-1} \in V_{k-1}. \quad (2.7)$$

Zur Lösung des Grobgitterproblems im Schritt 2 des obigen Algorithmus werden rekursiv μ Iterationsschritte des Mehrgitter-Algorithmus vom Projektionstyp eingesetzt. Zur Glättung wurde ein spezieller Linienglätter verwendet. Die Idee für diesen Glätter wurde der Arbeit [AP98] entnommen. Dieser Linienglätter ist ein Jacobi-ähnlicher Glätter der Art

$$S = I - \tilde{C}_{T_k}^{-1} \tilde{K}_{T_k}, \quad (2.8)$$

wobei \tilde{K}_{T_k} die auf den Raum T_k eingeschränkte Steifigkeitsmatrix \tilde{K} ist. Die Matrix \tilde{C}_{T_k} erhält man aus \tilde{K}_{T_k} durch Wegstreichen all der Nebendiagonaleinträge a_{ij} , für die $4|a_{ij}| < a_{ii} + a_{jj}$ ist. Die Operation $\tilde{C}_{T_k}^{-1} \underline{w}$ kann mittels Cholesky-Zerlegung in arithmetisch optimalem Aufwand gelöst werden. Die folgende Graphik zeigt die Kopplung der Knoten für die Netzgröße $\frac{1}{8}$.



Knoten, die mit \square markiert sind, sind Randknoten oder gehören zu ω_{k-1} , sie existieren also nicht für \tilde{K}_{T_k} . Die mit \circ markierten Knoten werden für \tilde{C}_{T_k} entkoppelt. Die verbleibenden Knoten sind jeweils entlang einer Linie gekoppelt.

Es gibt weitere Glätter, die aber auf dem Raum V_k arbeiten. Diese zeigen im allgemeinen bessere numerische Ergebnisse als der oben beschriebene, jedoch konnte die Glättungseigenschaft bisher nicht bewiesen werden.

Bei Anwendung eines Iterationsschrittes dieses Glätters im Schritt 1 und 3 des Mehrgitter-Verfahrens vom Projektionstyp erhält man

$$\varrho_1 = \varrho_3 = \frac{1}{10}\sqrt{35}.$$

Für die Konstante in der verstärkten Cauchy-Ungleichung (2.7) mit der Bilinearform aus (2.4) gilt

$$\gamma^2 \leq \frac{95}{176}.$$

Die Herleitung dieser Abschätzungen ist in der Arbeit [Beu01] von S. Beuchler enthalten. Damit erhält man aus der Abschätzung (2.5), dass die Konvergenzrate des Mehrgitter-Verfahrens vom Projektionstyp unabhängig vom Diskretisierungsparameter ist, falls $\mu \geq 3$ gewählt wird und mindestens 3 Glättungsschritte durchgeführt werden. Für $\mu = 3$ ist der Arithmetikaufwand pro Iterationsschritt des Mehrgitter-Verfahrens proportional zur Anzahl N_k der Unbekannten.

Weiterhin wurden AMLI-Vorkonditionierer [AV89, AV90] für die bei der Diskretisierung der Aufgabe (2.4) entstehende Steifigkeitsmatrix \tilde{K} analysiert. Es wurde gezeigt, dass spektraläquivalente AMLI-Vorkonditionierer unter Nutzung des speziellen Linienglätters (2.8) konstruiert werden können [Beu01].

Damit ist es gelungen, Löser zu finden, die das bei der Diskretisierung der Aufgabe (2.4) entstehende Gleichungssystem

$$\tilde{K}\underline{u} = \underline{f}$$

mit optimalem arithmetischem Aufwand lösen. Diese Löser lässt sich nun auch auf K_I anwenden. Als Vorkonditionierer zeigt er dann die folgenden Iterationszahlen des PCG-Verfahrens bei einer relativen Genauigkeit von 10^{-9} in der vorkonditionierten Energienorm.

p	Multigrid		AMLI	
	It	time [sec]	It	time [sec]
7	15	0.008	18	0.004
15	17	0.035	23	0.039
31	20	0.148	26	0.211
63	21	0.637	29	1.031
127	22	2.988	31	4.855
255	23	13.855	33	23.637
511	24	64.539	34	114.437
1023	24	265.621	34	493.477

DD-Vorkonditionierer

Während der vergangenen Jahre entwickelte S. Beuchler durch Umarbeitung von *SPC-PM-Po2d* ein paralleles Programm *SPC-PM-Po2p* zur Lösung von Reaktions-Diffusionsgleichungen mittels der p -Version der FEM unter Benutzung von Rechtecknetzen. Dieses Programm wird die Grundlage für den Einbau der erwähnten Vorkonditionierer für die inneren Probleme und das Schur-Komplement in einen globalen DD-Vorkonditionierer bilden, was im Rahmen des Teilprojekts A3 in der künftigen Antragsphase bearbeitet werden soll.

Literaturverzeichnis

Eigene Veröffentlichungen im Berichtszeitraum

Referierte Literatur

- [Ape99a] Th. Apel. *Anisotropic finite elements: Local estimates and applications*. Advances in Numerical Mathematics. Teubner, Stuttgart, 1999. Habilitationsschrift.
- [Ape99b] Th. Apel. Interpolation of non-smooth functions on anisotropic finite element meshes. *Math. Modeling Numer. Anal.*, 33:1149–1185, 1999.
- [AL98] Th. Apel und G. Lube. Anisotropic mesh refinement for a singularly perturbed reaction diffusion model problem. *Appl. Numer. Math.*, 26:415–433, 1998.
- [AN98] Th. Apel und S. Nicaise. The finite element method with anisotropic mesh grading for elliptic problems in domains with corners and edges. *Math. Methods Appl. Sci.*, 21:519–549, 1998.
- [ANS99] Th. Apel, S. Nicaise und J. Schöberl. Crouzeix-Raviart type finite elements on anisotropic meshes. Preprint SFB393/99-10, TU Chemnitz, 1999. Erscheint in *Numer. Math.*
- [ANS00] Th. Apel, S. Nicaise und J. Schöberl. A non-conforming finite element method with anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges. Preprint SFB393/00-11, TU Chemnitz, 2000. Erscheint in *IMA J. Numer. Anal.*
- [GN98] G. Globisch und S. V. Nepomnyaschikh. The hierarchical preconditioning on unstructured grids. *Computing*, 61(4):307–330, 1998.
- [BJ99] B. Heise und M. Jung. Efficiency, scalability, and robustness of parallel multi-level methods for nonlinear partial differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(2):553–567, 1999.
- [JR98] M. Jung und U. Rüde. Implicit extrapolation methods for variable coefficient problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(4):1109–1124, 1998.
- [Ju98] M. Jung. Parallel multi-level solvers for elliptic boundary value problems in three-dimensional domains. In W. Hackbusch und G. Wittum, Hrsg., *Multi-grid Methods V*. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Bd. 3, Springer-Verlag, Seiten 125–139, 1998.

- [Ju99] M. Jung. Einige Klassen paralleler iterativer Auflösungsverfahren. Habilitationsschrift, Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Mathematik, März 1999
- [JN99] M. Jung und S. V. Nepomnyaschikh. Variable additive preconditioning procedures. *Computing*, 62:109–128, 1999.
- [JM99] M. Jung und J.-F. Maitre. Some remarks on the constant in the strengthened CBS inequality: Estimate for hierarchical finite element discretizations of elasticity problems. *Numer. Methods for PDE*, 15(4):469–487, 1999.
- [JNT00] M. Jung, S. Nicaise und J. Tabka. Some multilevel methods on graded meshes. Zur Veröffentlichung angenommen bei *J. Comput. Appl. Math.*, 2000.
- [Kun99] G. Kunert. *A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes*. PhD thesis, TU Chemnitz, 1999. Logos, Berlin, 1999.
- [Kun00a] G. Kunert. An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(3):283–303, 2000.
- [Kun01a] G. Kunert. A local problem error estimator for anisotropic tetrahedral finite element meshes. *accepted by SIAM J. Numer. Anal.*, 2001.
- [Kun01c] G. Kunert. A posteriori l_2 error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes. *accepted by IMA J. Numer. Anal.*, 2001.
- [KV00] G. Kunert und R. Verfürth. Edge residuals dominate a posteriori error estimates for linear finite element methods on anisotropic triangular and tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(2):283–303, 2000.
- [Mey01] A. Meyer. Projected PCGM for handling hanging nodes in adaptive finite element procedures. *Numer. Linear Algebra Appl.* erscheint 2001.
- [The98] M. Theß. Parallel multilevel preconditioners for thin smooth shell finite element analysis. *Numer. Linear Algebra Appl.* 5, 401–440, (1998).
- [The99] M. Theß. Parallel multilevel preconditioners for thin shell problems. *Dissertation, TU Chemnitz*, (1998, verteidigt 1999).

Sonstige Arbeiten

- [ABJ⁺00] Th. Apel, M. Berzins, P. K. Jimack, G. Kunert, A. Plaks, I. Tsukerman und M. Walkley. Mesh shape and anisotropic elements: Theory and practice. In J. R. Whiteman, Hrsg., *The Mathematics of Finite Elements and Applications X*, Seiten 367–376, Amsterdam, 2000. Elsevier.
- [AGJM01] Th. Apel, S. Grosman, P. K. Jimack und A. Meyer. A new methodology for anisotropic mesh refinement based upon error gradients. Preprint 01-11, TU Chemnitz, 2001.
- [AMR99] Th. Apel, F. Milde und U. Reichel. *SPC-PM Po 3D v4.0* — Programmer’s Manual (Part II). Preprint SFB393/99-37, TU Chemnitz, 1999.

- [ANS01] Th. Apel, S. Nicaise und J. Schöberl. Finite element methods with anisotropic meshes near edges. In M. Krížek and P. Neittaanmäki, editors, *Finite Element Methods: Three-dimensional Problems*. Erscheint 2001.
- [AR99] Th. Apel und U. Reichel. *SPC-PM Po 3D v3.3 — User's Manual*. Preprint SFB393/99-06, TU Chemnitz, 1999.
- [AS00] Th. Apel und J. Schöberl. Multigrid methods for anisotropic edge refinement. Preprint 00-19, Johannes Kepler Universität Linz, SFB F013, 2000. Eingereicht bei *SIAM J. Numer. Anal.*
- [Beu99] S. Beuchler. Lösungsmethoden bei der p -Version der FEM. Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Mathematik, 1999.
- [Beu00] S. Beuchler. A preconditioner for solving the inner problem of the p -version of the f.e.m. Preprint SFB393/00-25, TU Chemnitz, 2000.
- [Beu01] S. Beuchler. A preconditioner for solving the inner problem of the p -version of the f.e.m. Part II – Algebraic multi-grid proof. Preprint SFB393/01-07, TU Chemnitz, 2001.
- [BM01] S. Beuchler und A. Meyer. *SPC-PM 3AdH v1.0 — Programmer's Manual*. Preprint SFB393/01-08, TU Chemnitz, 2001.
- [Glo98] G. Globisch. The hierarchical preconditioning on locally refined unstructured grids. Preprint SFB393/98_30, TU Chemnitz, 1998.
- [Glo01] G. Globisch. The hierarchical preconditioning on unstructured 3D-grids with locally refined regions. Eingereicht bei *Computing*, 2001.
- [JS01] M. Jung und O. Steinbach. A finite element-boundary element algorithm for inhomogeneous boundary value problems. Eingereicht bei *Computing*, 2001.
- [Kun00b] G. Kunert. Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. Preprint SFB393/00_01, TU Chemnitz, 2000. Also <http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2000/0066/index.html>.
- [Kun00c] G. Kunert. Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction–diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes. Preprint SFB393/00-39, TU Chemnitz, 2000. Also <http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2000/0086/index.html>.
- [Kun01b] G. Kunert. A note on the energy norm for a singularly perturbed model problem. Preprint SFB393/01-02, TU Chemnitz, January 2001. Also <http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2001/0006/index.html>.
- [Kun01d] G. Kunert. Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction–diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes. *submitted to Adv. Comp. Math.*, 2001.
- [Kun01e] G. Kunert. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed problem on anisotropic finite element meshes. Preprint SFB393/01-01, TU Chemnitz, January 2001. Also <http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2001/0001/index.html>.

- [Mey99a] A. Meyer. Hierarchical Preconditioners for High Order Elements and Application in Computational Mechanics. Preprint SFB393/99-02, TU Chemnitz, 1999.
- [Mey99b] A. Meyer. Hierarchical Preconditioners for High Order Elements and Application in Computational Mechanics. In: *Developments in Computational Mechanics with High Performance Computing*, B. Topping (ed.) Civil Comp Press, Edinburgh 1999, S. 107–112.
- [Mey99c] A. Meyer. Projected PCGM for Handling Hanging Nodes in Adaptive Finite Element Procedures. Preprint SFB393/99-25, TU Chemnitz, 1999.

In Vorbereitung befindliche Arbeiten

- [JMNT01] M. Jung, A. M. Matsokin, S. V. Nepomnyaschikh und Yu. A. Tkachov. Multilevel preconditioning operators on locally modified grids. (in Vorbereitung), 2001.
- [Ran01] M. Randrianarivony. Stabile Diskretisierungen des Stokes-Problems auf anisotropen Netzen. Masterarbeit, TU Chemnitz, 2001. In Vorbereitung.
- [Sei01] J. Seidel. Eine Auflösungsmethode für das Finite-Elemente-Gleichungssystem bei anisotroper Diskretisierung in der Umgebung einer Kante. Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2001. In Vorbereitung.

Weitere zitierte Literatur

- [AD92] Th. Apel und M. Dobrowolski. Anisotropic interpolation with applications to the finite element method. *Computing*, 47:277–293, 1992.
- [AV89] O. Axelsson und P. S. Vassilevski. Algebraic multilevel preconditioning methods I. *Numer. Math.*, 56:157–177, 1989.
- [AV90] O. Axelsson und P. S. Vassilevski. Algebraic multilevel preconditioning methods II. *SIAM J. Numer. Anal.*, 27(6):1569–1590, 1990.
- [AP98] O. Axelsson und A. Padiy. On the additive version of the algebraic multilevel iteration method for anisotropic elliptic problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 1998.
- [Bän91] E. Bänsch. Local mesh refinement in 2 and 3 dimensions. *IMPACT of Computing in Science and Engineering 3*, 181–191, 1991.
- [BH83] D. Braess und W. Hackbusch. A new convergence proof for the multigrid method including the V-cycle. *SIAM J. Numer. Anal.*, 20:967–975, 1983.
- [GO95] M. Griebel und P. Oswald. Tensor product type subspace splittings and multi-level iterative methods for anisotropic problems. *Adv. Comput. Math.*, 4:171–206, 1995.
- [Hac89] W. Hackbusch. The frequency decomposition multi-grid method. Part I: Application to anisotropic equations. *Numer. Math.*, 56:229–245, 1989.
- [JK97] S. Jensen und V. G. Korneev. On domain decomposition preconditioning in the hierarchical p -version of the finite element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 150(1-4):215–238, 1997.

- [Kun97] G. Kunert. Error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. Preprint SFB393/97_16, TU Chemnitz, 1997.
- [Nep95] S. V. Nepomnyaschikh. Fictitious space method on unstructured meshes. *East–West J. Numer. Math.*, 3(1):71–79, 1995.
- [PVMZ87] J. Peraire, M. Vahdati, K. Morgan und O. C. Zienkiewicz. Adaptive remeshing for compressible flow computation. *J. Comp. Phys.*, 72:449–466, 1987.
- [Rau78] G. Raugel. *Résolution numérique de problèmes elliptiques dans des domaines avec coins*. PhD thesis, Université de Rennes (France), 1978.
- [Schie86] N. Schieweck. A multigrid convergence proof by a strengthened Cauchy inequality for symmetric elliptic boundary value problems. In G. Telschow, Hrsg., *Second Multigrid Seminar, Garzau, November 5–8, 1985*, S. 49–62, Karl–Weierstraß–Institut für Mathematik, Berlin, 1986. Report R–Math–08/86.
- [Yse86a] H. Yserentant. On the multi–level splitting of finite element spaces. *Numer. Math.*, 49(4):379–412, 1986.
- [Yse86b] H. Yserentant. The convergence of multi-level methods for solving finite-element equations in the presence of singularities. *Math. Comp.*, 47:399–409, 1986.
- [Zha92] X. Zhang. Multilevel Schwarz methods. *Numer. Math.*, 63:521–539, 1992.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

In der Berichtsperiode wurden von einer großen Anzahl von Bearbeitern umfangreiche Ergebnisse in verschiedenen Teilaufgaben erzielt, wobei der Schwerpunkt bei der Betrachtung symmetrischer, positiv definiten Probleme lag. Die Arbeit an den Teilaufgaben *Anisotropie: Fehlerschätzer und schnelle Löser* und *Löser für Platten- und Schalenprobleme* führte jedoch auch auf die Betrachtung gemischter Formulierungen für das Stokes- und das Reissner-Mindlin-Problem. Sowohl bei den definiten, als auch bei den indefiniten Problemen gibt es eine Reihe unzureichend geklärter Fragen. Zur besseren Strukturierung sollen im Fortsetzungsantrag zwei eigenständige Teilprojekte beantragt werden.

Im Teilprojekt A3 des Fortsetzungsantrags sollen weiter symmetrische, positiv definiten Probleme betrachtet werden, wobei folgende Fragen angegangen werden sollen.

- Es sollen die beschriebenen Ansätze zur adaptiven Steuerung anisotroper Netze, insbesondere die automatische Erkennung von Anisotropierichtungen im Laufe der Rechnung und eine entsprechende Ausrichtung der finiten Elemente, so modifiziert werden, dass Netzhierarchien zum Zwecke der effektiven Auflösung der entstehenden Gleichungssysteme erhalten bleiben sollen. Das Ziel besteht in der Erweiterung unserer parallelen 3D-Finite-Elemente-Software auf adaptive, anisotrope Netzsteuerung und der theoretischen Begründung der implementierten Algorithmen.

- Eine weitere Herausforderung bei anisotropen Netzen stellt die Entwicklung effektiver Gleichungslöser dar. Bekannte Algorithmen benutzen Glätter über Linien, die *a priori* gewählt werden. Des Weiteren sind für adaptive Verfahren „cascade“-artige Algorithmen besonders geeignet. Diese Zugänge sollen in einem zweiten Schwerpunkt des beantragten Projekts kombiniert und weiterentwickelt werden.
- Im Berichtszeitraum wurden Resultate zur effektiven Vorkonditionierung der bei der p -Version der FEM entstehenden Gleichungssysteme erzielt. Für einen DD-Vorkonditionierer wurde für zweidimensionale Aufgaben ein optimaler Multigrid-Löser für die Probleme im Inneren der Teilgebiete konstruiert und analysiert. Offen ist noch die Wahl eines geeigneten Fortsetzungsoperators. Für dreidimensionale Probleme ist die Lösung insgesamt noch nicht ausreichend geklärt. Beide Fragestellungen sollen in einem dritten Schwerpunkt des Projektes bearbeitet werden. Außerdem sollen die bisher entwickelten Löser auf andere Aufgabenklassen übertragen werden.

Im neuen Teilprojekt A11 geht es um die gemischten Formulierungen. Das Ziel besteht auch hier in der Entwicklung von effizienter Simulationssoftware, die auf theoretisch fundierten effizienten, d. h. adaptiven und lösungsangepaßten, parallelen Lösungsstrategien beruht.

- Bei der Simulation der Strömung viskoser Fluide entstehen Lösungen mit anisotropem Verhalten durch Kantensingularitäten oder Randschichten. Lösungsangepaßte Diskretisierungen sind folglich auch *anisotrop*. Für geeignete Elementepaare sind *a priori* Fehlerabschätzungen und *a posteriori* Fehlerschätzer für das Stokes-Problem mit anisotropen Netzen herzuleiten. Des Weiteren soll ein paralleles 3D-Finite-Elemente-Programm entstehen. Dabei soll auf den Entwicklungen in Teilprojekt A3 aufgebaut werden, durch die die adaptive Netzsteuerung inklusive Lastbalancierung sowie Komponenten des Löser bereitgestellt werden.

Durch diese Arbeiten wird eine wichtige Vorarbeit für eine spätere Weiterführung des Teilprojekts D3 geleistet, in dem bisher eine parallele Umsetzung eines erweiterten Navier-Stokes-Modells auf uniform und isotrop verfeinerten Netzen erfolgte.

- Für das Reissner-Mindlin-Plattenmodell soll die Diskretisierung mit MITC-Elementen und deren stabilisierten Versionen untersucht werden. Schwerpunkte sind parallele Auflösungsverfahren und *a posteriori* Fehlerschätzer.

Eine weiteres Problem besteht im Auftreten von Randschichten bei kleiner Plattendicke. Aus der Analogie mit der singular gestörten Reaktions-Diffusionsgleichung wird eine lösungsangepaßte Diskretisierung *anisotrop* sein. Es ist zunächst zu untersuchen, welche Elementtypen sich dafür eignen.