

Teilprojekt

A3

Parallele adaptive Finite-Elemente-Algorithmen und Löser
für symmetrische, positiv definite Probleme

2.1 Teilprojekt A3

Parallele adaptive Finite-Elemente-Algorithmen und Löser für symmetrische, positiv definite Probleme

2.1.1 Antragsteller

PD Dr. Thomas Apel an Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz

Doz. Dr. Michael Jung, Institut für Wissenschaftliches Rechnen, TU Dresden

Dr. Gerd Kunert an Professur Wissenschaftliches Rechnen, TU Chemnitz

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Sven Beuchler / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz (bis Sept. 2003)

MSc. Sergej Grosman / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz

DM Gunter Winkler / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz (Jan. bis Dez. 2003)

DM Peter Steinhorst / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz (ab Okt.2003)

Prof. Arnd Meyer / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz

Dr. Matthias Pester / Professur Mathematik in Industrie und Technik, TU Chemnitz

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

2.2.1 Adaptive anisotrope Netzsteuerung

Für Aufgaben mit anisotropem Lösungsverhalten wie Kantensingularitäten und Randschichten sind lösungsangepasste Diskretisierungen anisotrop. Die adaptive Steuerung anisotroper Netze, insbesondere die automatische Erkennung von Anisotropierichtungen im Laufe der Rechnung und eine entsprechende Ausrichtung der finiten Elemente ist international noch nicht zufriedenstellend geklärt und war ein Bearbeitungsschwerpunkt im Projekt. Dabei werden solche Strategien verfolgt, die hierarchische anisotrope Netze liefern, so dass Multilevel-Verfahren zur effizienten Lösung der Finite-Elemente-Gleichungssysteme eingesetzt werden können. Wesentliche Fortschritte gibt es aber nicht nur bei der Netzsteuerung, sondern auch bei einem anderen wichtigen Bestandteil adaptiver Verfahren, den *a posteriori* Fehlerschätzern, die für anisotrope Diskretisierungen zunehmend besser verstanden werden.

2.2.2 Auflösungsverfahren bei anistropen Diskretisierungen

Die Entwicklung effizienter Löser für die bei anisotropen Diskretisierungen entstehenden Finite-Elemente-Gleichungssysteme ist ein weiteres Ziel im Projekt.

In einer Reihe von Arbeiten werden Lösungsalgorithmen für anisotrope Differentialgleichungen, zum Beispiel der Gestalt $-a(x, y)u_{xx} - b(x, y)u_{yy} = f$, wobei einer der beiden Koeffizienten a oder b klein ist, diskutiert (siehe z.B. [BZ01, Hac85, KW98, Pfl98]). In diesen Arbeiten wird besonderes Augenmerk auf die Auflösung gelegt, aber es werden nicht der singular gestörte Charakter derartiger Aufgaben und adäquate Diskretisierungen berücksichtigt. Im Teilprojekt sollen schnelle Löser auf der Basis von Multilevel-

Algorithmen entwickelt werden, die bei adaptiven anisotropen Diskretisierungen zum Einsatz kommen.

2.2.3 Auflösungsstrategien für Verfahren höherer Ordnung

In der Antragsperiode 1999–2001 wurde für einen Gebietszerlegungs-Vorkonditionierer für zweidimensionale Randwertaufgaben ein suboptimaler Multigrid-Löser für die Probleme im Inneren der Teilgebiete konstruiert und analysiert. Dieser Vorkonditionierer sollte zusammen mit dem Vorkonditionierer von Korneev [IK95a], [IK95b] für das Schur-Komplement in das Programm *SPC-PM-Po2p* implementiert werden. Dieser Vorkonditionierer sollte auch für Netze bestehend aus Rechteckelementen mit einem starken Streckungsverhältnis ausgetestet und gegebenenfalls modifiziert werden.

Ein weiterer Schwerpunkt bestand darin, das bestehende Programm *SPC-PM-3AdH* auf die Diskretisierung von Randwertproblemen mittels FEM unter Verwendung eines Polynomgrades $p > 2$ zu erweitern und zu parallelisieren.

Für dreidimensionale Probleme war die Entwicklung eines Vorkonditionierers für die Probleme im Inneren der Teilgebiete noch nicht ausreichend geklärt. Diese Fragestellung sollte in einem dritten Schwerpunkt bearbeitet werden.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Adaptive anisotrope Netzsteuerung

Eine adaptive anisotrope Netzsteuerung erfordert im Laufe der Rechnung ein automatisches Erkennen der Anisotropierichtungen sowie das Anpassen der Elemente entlang dieser Richtungen. Dabei ist es formal und praktisch günstig, die adaptiven Schritte aufzuteilen in die Aspekte *Informationsgewinnung* und *Netzgenerierung/-verfeinerung*.

Bei der **Informationsgewinnung** sucht man diejenigen Informationen, die ein anisotropes Element beschreiben, nämlich *Streckungsrichtungen*, *Streckungsverhältnisse* und *Elementgröße*. Günstigerweise sollten diese Informationen von einem geeigneten anisotropen Fehlerschätzer bereitgestellt werden. Leider gelingt dies im Allgemeinen nur für die letzte Information, die *Elementgröße* (Volumen). Fehlerschätzer nehmen natürlich trotzdem eine zentrale Rolle ein, da sie nicht nur zur Bestimmung einer geeigneten Elementgröße dienen, sondern die Grundlage jeglicher Zuverlässigkeits- und Effizienzbetrachtungen von Diskretisierungsmethoden sind. Obwohl es im Antrag nicht ausdrücklich formuliert wurde, wurden von G. Kunert und S. Grosman entsprechende Vorarbeiten zu anisotropen Fehlerschätzern [Kun99, Kun00a, KV00, Kun00b, Kun01a, Kun01b, Kun01c, Kun01d, Kun02] weitergeführt, wobei unerwartete Resultate erzielt werden konnten.

Die ersten beiden Informationen *Streckungsrichtungen* und *Streckungsverhältnisse* können (bisher) nicht aus Fehlerschätzern extrahiert werden. Der in der Literatur am häufigsten genutzte Ansatz verwendet die Matrix der zweiten Ableitungen, d. h. die Hesse-Matrix der FEM-Lösung [PVMZ87, Sim94, Dol98, D'A99, BD97, CHM95, HDB⁺00, RGK93]. Von G. Kunert wurde gezeigt, dass die auf dieser Basis konstruierten anisotropen Netze auch für die untersuchten Fehlerschätzer geeignet sind [Kun00b].

Nachdem die gewünschten anisotropen Netzinformationen bestimmt wurden, erfolgt die anisotrope **Netzgenerierung/-verfeinerung**. Den meisten anisotropen Methoden liegt

eine lokale anisotrope Transformation zugrunde. Beispielhaft seien hier die Übersichten in [Sim94] oder [BH96] und Arbeiten der Gruppe um Borouchaki/George genannt [BGM97, BGH⁺97, GB98].

Eine andere Gruppe von Methoden umfasst Algorithmen zur *Netzverbesserung* und/oder *Netzverfeinerung*. Netzverbesserung im engeren Sinne wird durch Netzglättung (d. h. Knotenverschiebung) erreicht. Netzverfeinerung geschieht durch Operationen wie das Einfügen/Löschen/Tauschen von *mesh entities* (Netz-Strukturen) wie Knoten, Kanten, Flächen und Elementen, siehe z. B. [Dol98, CHM95, BD97, BH96, FPZ01, SR99].

Die genannten Arbeiten verdeutlichen, dass anisotrope Netzgenerierung/-verfeinerung schon intensiv untersucht wurde, besonders in 2D. In 3D ist die gesamte Problematik erst ansatzweise diskutiert und insbesondere im anisotropen Kontext weniger verstanden. Die von uns angestrebten Beiträge umfassen vor allem folgende Punkte:

- Es sollen die Grundlagen der Fehlerschätzung auf anisotropen Diskretisierungen ausgebaut werden. Dabei ist an weitere Fehlerschätzer (postprocessing basierte Fehlerschätzer nach Zienkiewicz und Zhu, Fehlerschätzer auf der Basis lokaler Neumannprobleme, hierarchische Fehlerschätzer) gedacht.
- Die in der Antragsperiode 1999–2001 begonnenen Untersuchungen über die Hessian-Strategie zur Generierung anisotroper Netze und die Beziehung zur anisotropen Fehlerschätzung [Kun00c] sollen ausgebaut und vertieft werden.
- Es sollen Algorithmen zur Erkennung von Anisotropierichtungen und zur Generierung anisotrop ausgerichteter Netze entwickelt werden. Um Multilevel-Verfahren einsetzen zu können, sollen hierarchische anisotrope Netze konstruiert werden.
- Alle entwickelten Algorithmen sollten implementiert und getestet werden.
- Der dreidimensionale Fall, der in der Literatur weniger tief bearbeitet ist, soll angegangen werden.

Neuland wird hier vor allem beim dritten genannten Punkt betreten. Vom methodischen Ansatz her sollte das Grobnetz einer anisotropen Netz-Hierarchie entweder mit einem anisotropen Advancing-Front-Algorithmus oder über anisotrope Delaunay-Triangularisierung erfolgen. Die Verfeinerung soll so geschehen, dass die Hierarchie weitgehend erhalten bleibt. Werden bei der Verfeinerung des Netzes neue Knoten eingefügt, so ist eine (kleine) Abweichung vom Mittelpunkt der Vaterknoten erlaubt (z. B. durch Netzglättung). Wenn schon existierende Knoten verschoben werden müssen, um ein hinreichend ausgerichtetes anisotropes Netz zu erhalten, so können auch die vorangehenden Netze modifiziert werden.

2.3.2 Auflösungsverfahren bei anisotropen Diskretisierungen

Als erstes Modellbeispiel für die Konstruktion schneller Löser bei anisotropen Diskretisierungen wird das Randwertproblem $-\varepsilon\Delta u + u = f$ in $\Omega = (0, 1)^2$ und $u = 0$ auf $\partial\Omega$ ($\varepsilon \ll 1$) betrachtet. Bei diesem Beispiel treten Randschichten auf, so dass eine Diskretisierung in Randnähe mittels anisotropen Elementen erfolgen muss. Auf der Basis von Gebietszerlegungsverfahren und Multilevel-Algorithmen wird für dieses Problem ein schneller Löser vorgeschlagen. Die hierbei gewonnenen Erfahrungen werden bei der Konstruktion von Multilevel-Lösern in den adaptiven Algorithmen genutzt.

2.3.3 Auflösungsstrategien für Verfahren höherer Ordnung

Zur Lösung von Finite-Elemente-Gleichungssystemen, die bei der p - bzw. hp -Version entstehen, wurden in der Periode 1999–2001 schnelle Lösungsverfahren entwickelt. Im Berichtszeitraum bestand das Ziel darin, diese schnellen Löser in das Programm *SPC-PM-Po2p* zu implementieren. 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 Vierecken zusammengesetztes Gebiet ist. Zur Diskretisierung wurden stückweise polynomiale Funktionen p -ten Grades verwendet. Zur Definition der Ansatzfunktionen über jedem Teilgebiet wurden dabei die integrierten Legendre-Polynome genutzt. Nummeriert man die Freiheitsgrade in der Reihenfolge: Freiheitsgrade in den Eckknoten der Vierecke, Freiheitsgrade auf den Kanten der Vierecke, Freiheitsgrade im Inneren der Vierecke, 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

$$K_{1,V} = \begin{pmatrix} K_V & 0 \\ 0 & K^{(1)} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad K^{(1)} = \begin{pmatrix} K_E & K_{EI} \\ K_{IE} & K_I \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

betrachtet, für die die Spektraläquivalenzungleichungen

$$\frac{c}{1 + \log p} K_{1,V} \leq K \leq 2K_{1,V} \quad (2.3)$$

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

$$K^{(1)} = \begin{pmatrix} I_E & K_{EI}K_I^{-1} \\ 0 & I_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_E & 0 \\ 0 & K_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_E & 0 \\ K_I^{-1}K_{IE} & I_I \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

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 Vierecke und einen Vorkonditionierer für die Matrix K_I .

Die Matrix K_I ist eine Blockdiagonalmatrix. Jeder Block korrespondiert zu einem Element. Daher ist die Diskretisierung von

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f & \text{in } \mathcal{R}_d = (-1, 1)^d \\ u &= 0 & \text{auf } \partial\mathcal{R}_d \end{aligned} \quad (2.5)$$

mit der p -Version der FEM unter Nutzung des einen Elements \mathcal{R}_d das typische Modellproblem für den Löser der Subprobleme in 2D ($d = 2$) und 3D ($d = 3$). Das Randwertproblem (2.5) wird mit der p -Version der FEM diskretisiert. Als Ansatzraum $\mathbb{M}_{p,d}$ wird

$$\mathbb{M}_{p,d} = \{u \in H_0^1(\mathcal{R}_d), u \in \text{span}\{x_1^{i_1} \cdots x_d^{i_d}\}_{i_1, \dots, i_d=0}^p\}$$

gewählt. Dann lautet die Galerkin-Projektion des Problems (2.5) auf $\mathbb{M}_{p,d}$:

Suche $u_p \in \mathbb{M}_{p,d}$, so dass

$$a(u_p, v_p) = \int_{\mathcal{R}_d} \nabla u_p \cdot \nabla v_p = \int_{\mathcal{R}_d} f v_p \quad \forall u_p \in \mathbb{M}_{p,d} \quad (2.6)$$

gilt. Als Basis im Raum $\mathbb{M}_{p,d}$ werden Tensorprodukte der integrierten Legendrepolynome $\hat{L}_i(x)$ eingeführt, siehe [JK97]. Mit $\hat{L}_{i_1, \dots, i_d}(x_1, \dots, x_d) = \hat{L}_{i_1}(x_1) \cdots \hat{L}_{i_d}(x_d)$ gilt nun

$$\mathbb{M}_{p,d} = \text{span} \left\{ \hat{L}_{i_1, \dots, i_d} \right\}_{i_1, \dots, i_d=2}^p.$$

Dann ist (2.6) äquivalent zum Lösen eines linearen Gleichungssystems $K_d \underline{u} = \underline{f}$ mit der Steifigkeitsmatrix

$$K_d = \left[a(\hat{L}_{i_1, \dots, i_d}, \hat{L}_{j_1, \dots, j_d}) \right]_{i_1, \dots, i_d, j_1, \dots, j_d=2}^p.$$

Die Matrix K_d ist dabei eine Blockdiagonalmatrix aus 2^d Blöcken, d.h.

$$K_d = P \text{ blockdiag} [K_{i,d}]_{i=1}^{2^d} P^T, \quad (2.7)$$

wobei P eine bekannte Permutationsmatrix ist. Die Blöcke $K_{i,d}$ sind untereinander spektraläquivalent, d.h. es gilt $K_{i,d} \sim K_{j,d}$ für $i, j = 1, \dots, 2^d$. Damit genügt es, einen effektiven Vorkonditionierer für $K_{1,d}$ zu finden, wobei

$$K_{1,d} = \sum_{j=1}^d \left(\bigotimes_{k=1}^{j-1} F_1 \right) \otimes D_1 \left(\bigotimes_{k=j+1}^d F_1 \right) \quad (2.8)$$

mit

$$F_1 = \begin{pmatrix} 1 & -c_2 & 0 & 0 & \cdots \\ & 1 & -c_4 & \ddots & \\ & & 1 & -c_6 & \ddots \\ \text{SYM} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -c_{p-2} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad D_1 = \begin{pmatrix} d_2 & 0 & \cdots \\ 0 & d_4 & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

und den Koeffizienten

$$c_i = \sqrt{\frac{(2i-3)(2i+5)}{(2i-1)(2i+3)}} \quad \text{und} \quad d_i = \frac{(2i-3)(2i+1)}{2},$$

siehe [JK97].

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [Ant01] SFB 393 - Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern. Finanzierungsantrag 2002–2003–2004, TU Chemnitz, 2001.
- [BD97] G. C. Buscaglia und E. A. Dari. Anisotropic mesh optimization and its application in adaptivity. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 40(22):4119–4136, 1997.
- [BGH⁺97] H. Borouchaki, P. L. George, F. Hecht, P. Laug und E. Saltec. Delaunay mesh generation governed by metric specifications. Part I: Algorithms. *Finite Elem. Anal. Des.*, 25(1–2):61–83, 1997.
- [BGM97] H. Borouchaki, P. L. George und B. Mohammadi. Delaunay mesh generation governed by metric specifications. Part II: Applications. *Finite Elem. Anal. Des.*, 25(1–2):85–109, 1997.
- [BH96] F. J. Bossen und P. S. Heckbert. A pliant method for anisotropic mesh generation. In *Proceedings of the 5th Annual International Meshing Roundtable*, Pittsburgh, PA, 1996. Sandia National Laboratories.
- [BZ01] J. H. Bramble und X. Zhang. Uniform convergence of the multigrid V-cycle for an anisotropic problem. *Math. Comp.*, 70:453–470, 2001.
- [CHM95] M. J. Castro-Díaz, F. Hecht und B. Mohammadi. New progress in anisotropic grid adaption for inviscid and viscous flow simulations. In *Proceedings of the 4th Annual International Meshing Roundtable*, pages 73–85, Albuquerque, NM, 1995. Sandia National Laboratories. Also Report 2671 at INRIA.
- [D’A99] E. D’Azevedo. On optimal bilinear quadrilateral meshes. *Eng. Comput.*, 15(3):219–227, 1999.
- [Dol98] V. Dolejší. Anisotropic mesh adaption for finite volume and finite element methods on triangular meshes. *Computing and Visualisation in Science*, 1:165–178, 1998.
- [FPZ01] L. Formaggia, S. Perotto, and P. Zunino. An anisotropic a-posteriori error estimate for a convection-diffusion problem. *Comput. Vis. Sci.*, 4(2):99–104, 2001.
- [GB98] P.-L. George and H. Borouchaki. *Delaunay triangulation and meshing – Application to finite elements*. Hermes Science Publishing, Paris, 1998.
- [Hac85] W. Hackbusch. *Multi-grid methods and applications*. Springer, Heidelberg, 1985.
- [HDB⁺00] W. G. Habashi, J. Dompierre, Y. Bourgault, D. Ait-Ali-Yahia, M. Fortin und M.-G. Vallet. Anisotropic mesh adaptation: Towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD solutions: Part I: General principles. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 32:725–744, 2000.
- [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. Technical Report SPC 95-35, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, December 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. Technical Report SPC 95-36, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, December 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.
- [KW98] B. N. Khoromskij und G. Wittum. Robust interface reduction for highly anisotropic elliptic equations. In W. Hackbusch und G. Wittum, Hrsg, *Multigrid Methods V, Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, Bd. 3, S. 140–151. Springer, 1998. Proceedings of the Fifth European Multi-Grid Conference held in Stuttgart, Germany, October 1–4, 1996.
- [Kun99] G. Kunert. *A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes*. Dissertation, 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.*, 86:471–490, 2000.
- [Kun00b] G. Kunert. Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. Preprint SFB393/00_01, TU Chemnitz, 2000.
- [Kun00c] G. Kunert. Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. Preprint SFB393/00–01, TU Chemnitz, January 2000. Auch: <http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2000/0066/index.html>.
- [Kun01a] G. Kunert. A local problem error estimator for anisotropic tetrahedral finite element meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39:668–689, 2001.
- [Kun01b] G. Kunert. A posteriori L_2 error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes. *IMA J. Numer. Anal.*, 21:503–523, 2001.
- [Kun01c] G. Kunert. Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes. *Adv. Comp. Math.*, 15:237–259, 2001.
- [Kun01d] G. Kunert. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed problem on anisotropic finite element meshes. *Math. Model. Numer. Anal.*, 35:1079–1109, 2001.
- [Kun02] G. Kunert. A note on the energy norm for a singularly perturbed model problem. *Computing*, 69:265–272, 2002.
- [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.*, 86:283–303, 2000.
- [Pfl98] Chr. Pflaum. Fast and robust multilevel algorithms. Habilitationsschrift, Bayerische Julius-Maximilians-Universität Würzburg, 1998.
- [PVMZ87] J. Peraire, M. Vahdati, K. Morgan und O. C. Zienkiewicz. Adaptive remeshing for compressible flow computation. *J. Comp. Phys.*, 72:449–466, 1987.
- [RGK93] W. Rick, H. Greza und W. Koschel. FCT-solution on adapted unstructured meshes for compressible high speed flow computations. In E. H. Hirschel, Hrsg., *Flow simulation with high-performance computers I, Notes on Num. Fluid Mechanics*, Bd. 38, S. 334–438. Vieweg, 1993.

- [Sim94] R. B. Simpson. Anisotropic mesh transformation and optimal error control. *Applied Numerical Mathematics*, 14:183–198, 1994.
- [SR99] T. Skalický und H.-G. Roos. Anisotropic mesh refinement for problems with internal and boundary layers. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 46:1933–1953, 1999.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Adaptive anisotrope Netzsteuerung

Anisotrope Fehlerschätzung

Die oben genannten anvisierten Ziele konnten erreicht werden. Wie gewohnt, konnten für eine Reihe von Fehlerschätzern lokale Abschätzungen nach unten gezeigt werden. Die globalen Fehlerabschätzungen nach oben sind alle von der Form

$$\text{Globaler Fehler} \lesssim \text{Alignment Measure} \cdot \text{Fehlerschätzer}$$

Diese Struktur der Fehlerschranke war nach unseren Vorarbeiten zu erwarten, siehe z. B. [Kun99]. Das *Alignment Measure* misst dabei die Ausrichtung des anisotropen Netzes mit der anisotropen Lösung. Für isotrope Netze sowie gut ausgerichtete anisotrope Netze ist das Alignment Measure in der Größenordnung 1 (in numerischen Experimenten $\approx 1.5 \dots 4$). An dieser Stelle soll darauf nicht weiter eingegangen werden; wir verweisen auf [Kun99] für eine ausführliche Diskussion.

Um die Methodik zur Konstruktion und zum Beweis der Eigenschaften anisotroper Fehlerschätzer auf ihre Grenzen zu untersuchen, wurden auch weitere Aufgaben betrachtet. Im Folgenden werden wesentliche Ergebnisse und die entsprechenden Arbeiten benannt.

Fehlerschätzer auf der Basis lokaler Neumannprobleme (**equilibrated residual method**)

Für das singular gestörte Reaktions-Diffusions-Problem

$$-\varepsilon^2 \Delta u + \kappa^2 u = f \quad \text{in } \Omega$$

mit gemischten Randbedingungen wurde in [AB98] für $\varepsilon = 1$ ein Fehlerschätzer vorgestellt, der auf isotropen Netzen zuverlässig und effizient ist, wobei die Konstanten in den Abschätzungen unabhängig vom Störungsparameter κ sind. S. Grosman hat diesen Fehlerschätzer im Kontext anisotroper Netze untersucht [Gro02]. Wesentliche Teilresultate sind:

- Definition eines Fortsetzungsoperators, der die Ergebnisse der Originalarbeit so verschärft, dass anisotrope Elemente verwendet werden können,
- Beweis der Zuverlässigkeit des Fehlerschätzers,
- Analyse der Effizienz des Fehlerschätzers, wobei ein Faktor („lokale Matching-Funktion“) auftritt, der bei stark anisotropen Netzen anwachsen kann,
- ein numerischer Test, der zeigt, dass der Fehlerschätzer den tatsächlichen Fehler wirklich um so stärker überschätzt, je größer das Streckungsverhältnis der Elemente wird,
- eine Analyse der Steifigkeitsmatrizen für die lokalen Probleme, die zeigt, dass die Probleme auf stark anisotropen Netzen schlecht gestellt sind.

S. Grosman ist es dann gelungen, eine Modifikation dieses Fehlerschätzers vorzuschlagen und zu analysieren, der die Mängel des originalen Fehlerschätzers überwindet. Auch hier sollen die wesentlichen Teilresultate aufgezählt werden:

- Analyse der Zuverlässigkeit, wobei ein Faktor („globale Matching-Funktion“) auftritt, der bereits aus den Arbeiten von G. Kunert bekannt ist und kontrolliert werden kann,
- Beweis der Effizienz,
- ein numerischer Test, der zeigt, dass der modifizierte Fehlerschätzer bessere Ergebnisse als der originale Fehlerschätzer liefert,
- eine Analyse der Steifigkeitsmatrizen für die lokalen Probleme, die zeigt, dass diese auf stark anisotropen Netzen bessere Eigenschaften im Vergleich zum originalen Fehlerschätzer haben.

In [AGJM01] wurde dieser Fehlerschätzer mit weiteren Fehlerschätzern verglichen.

Hierarchische Fehlerschätzer Ein beliebter, weil einfacher Fehlerschätzer ist der so genannte hierarchische Fehlerschätzer. Dieser wurde von S. Grosman in [Gro04] analysiert. Zur Beschreibung der wesentlichen Resultate seien folgende Bezeichnungen eingeführt. Sei $V_1 \subset H_0^1(\Omega)$ der Raum der stückweise linearen Finite-Element-Funktionen und $V_2 = V_1 \oplus \tilde{V}_2 \subset H_0^1(\Omega)$ ein angereicherter Raum. Im isotropen Fall wird V_1 gewöhnlich mit den quadratischen Kanten-Blasenfunktionen angereichert, diese sind jedoch hier ungeeignet. Weiterhin seien mit $u_1 \in V_1$ und $u_2 \in V_2$ die Finite-Element-Lösungen bezeichnet.

Wesentliche Teilresultate sind:

- die Definition von gequetschten Blasenfunktionen (squeezed bubbles) zur Anreicherung von V_1 , so dass eine Fehlerreduktionseigenschaft (*error reduction property*, auch *saturation assumption*) erfüllt ist und $u_2 - u_1$ ein Fehlermaß für $u - u_1$ darstellt,
- der Beweis einer verschärften Cauchy-Ungleichung für die Räume V_1 und \tilde{V}_2 , so dass es möglich ist, eine globale Schätzfunktion für den Finite-Element-Fehler in \tilde{V}_2 zu berechnen,
- der Beweis, dass diese global definierte Schätzfunktion durch eine Summe lokal über den Kanten berechenbarer Anteile approximiert werden kann,
- der Beweis der oben genannten Abschätzungen (lokale Abschätzung von unten, globale Abschätzung mit *Alignment Measure* von oben) für einen abgeleiteten lokalen Fehlerschätzer.

In Testrechnungen zeigte sich, dass das *Alignment Measure* notwendigerweise in die Konstante der Fehlerreduktionseigenschaft eingeht: Ist das Netz unangemessen stark anisotrop, dann strebt das *Alignment Measure* gegen Unendlich und die Konstante in der Fehlerreduktionseigenschaft gegen Eins.

Zienkiewicz-Zhu Fehlerschätzung Die so genannten Zienkiewicz-Zhu Fehlerschätzer beruhen auf einem Postprocessing und sind aufgrund ihrer Einfachheit und relativen Robustheit recht beliebt. Die theoretische Analyse für anisotrope Netze war bisher nur ungenügend geklärt. In einer gemeinsamen Arbeit mit S. Nicaise [KN04] wurden etliche theoretische Fortschritte erzielt, so dass ein Zienkiewicz-Zhu Fehlerschätzer für anisotrope Netze formuliert und analysiert werden konnte.

Konvektions-Diffusions-Probleme mit dominanter Konvektion Um die Methodik zur Konstruktion und zum Beweis der Eigenschaften anisotroper Fehlerschätzer auf ihre Grenzen zu untersuchen, wurden auch Konvektions-Diffusions-Probleme mit dominanter Konvektion betrachtet. Es gelang, die bekannten isotropen Fehlerschätzer auf anisotrope Netze zu übertragen [Kun03b]. Dabei stellte sich heraus, dass die Schwierigkeiten ähnlich wie im isotropen Fall liegen. Sie sind daher auch weniger durch die anisotropen Netze bedingt, sondern vor allem durch die zugrunde liegende Differentialgleichung. In gewissen Aspekten besitzt eine anisotrope Diskretisierung sogar Vorteile: z.B. kann man praktisch auf eine Stabilisierung der numerischen Methode verzichten, wenn das anisotrope Netz passend gewählt wird.

Wie von anderen Problemen bekannt und auch hier erwartet, konnten lokale Fehlerschranken nach unten und globale Fehlerschranken nach oben bewiesen werden. Für die Qualität der Fehlerabschätzung ist zum einen eine anisotrope Peclet-Zahl wichtig. Ist diese in der Größenordnung von 1 oder kleiner, so entsprechen sich die obere und untere Fehlerschranke. Andernfalls klafft zwischen beiden Schranken eine Lücke. Dieses Verhalten ist vollkommen analog zum isotropen Vorbild, d.h. nicht der Netz-Anisotropie geschuldet.

Zum anderen hängen die Fehlerschätzer von der Anisotropie des Netzes ab, und zwar genauso wie von anderen Differentialgleichungen gewohnt [Kun03b, Kun99]. Ausgedrückt wird dies über das schon erwähnte *Alignment Measure*. Für eine ausführliche Diskussion verweisen wir deshalb auf die zitierte Literatur.

Stokes Gleichungen In Kooperation mit E. Creuse und S. Nicaise (Valenciennes, Frankreich) konnten eine Reihe von Resultaten für das Stokes-Problem bewiesen werden [CKN03]. Da die Stokes-Gleichungen ausführlich im Teilprojekt A11 besprochen sind, werden hier nur die wesentlichsten Errungenschaften vorgestellt.

- Die Voraussetzungen an die Diskretisierung wurden detailliert untersucht und so wenig restriktiv wie möglich formuliert. Damit sind viele Element-Paare abgedeckt.
- Der 2D-Fall und der komplexere 3D-Fall wurden untersucht.
- Konforme und nichtkonforme Diskretisierungen sind analysiert worden. Der letztere Fall ist wesentlich technischer; betrachtet wurden so genannte Crouzeix-Raviart Elemente.
- Viele Element-Typen wurden behandelt (Dreiecke, Vierecke, Tetraeder, Pentaeder, Hexaeder).
- Fehlerabschätzungen nach oben und unten konnten erreicht werden. Dabei war die Analyse zum Teil wesentlich technischer als von skalaren Gleichungen gewohnt (bedingt u.a. durch die verwendete gemischte Formulierung). Insgesamt sind die Resultate etwas weniger vorteilhaft als z. B. für die Poisson-Gleichung.

Fehlerabschätzungen für Finite-Volumen-Verfahren Für das singular gestörte Reaktions-Diffusions-Problem wurde von G. Kunert, Z. Mghazli und S. Nicaise auch eine Finite-Volumen-Diskretisierung auf anisotropen Gittern analysiert [KMN03]. Ein Residuenfehlerschätzer wurde vorgeschlagen und analysiert, wobei Zuverlässigkeit und Effizienz bewiesen werden konnten.

Generierung adaptiver anisotrope Netze

Einen wichtigen Platz nahmen die Untersuchungen zur effektiven Steuerung der Netzverfeinerungstechniken ein mit dem Ziel, notwendige Anisotropien in der lösungsangepassten Ausrichtung zu erhalten. Die Ergebnisse sollen hier in drei Unterpunkten dargestellt werden:

- theoretische Ergebnisse,
- Implementation und Tests mit Vierecksnetzen,
- Tests mit Dreiecksnetzen.

Theoretische Ergebnisse Wie bereits in Abschnitt 2.3.1 dargelegt wurde, erfordert die adaptive anisotrope Netzsteuerung Informationen über Streckungsrichtungen und Streckungsverhältnisse der Elemente, die oft aus einer Näherung der Hesse-Matrix der Lösung gewonnen werden. G. Kunert ist es in [Kun02] gelungen zu zeigen, dass die so generierten Netze auch eine effiziente und zuverlässige Fehlerabschätzung erlauben. Damit wurde die Berechtigung sowohl der Hessian-Strategie als auch der anisotropen Fehlerschätzer (und der verwendeten Methoden) bestätigt. Für Details verweisen wir auf die Originalarbeit [Kun02].

Obwohl adaptive Strategien international schon seit etwa 25 Jahren entwickelt und benutzt werden, ist ein Konvergenzbeweis für adaptive Strategien erst in den letzten Jahren gelungen [Dör96, MNS00]. Dabei wurden isotrope Vernetzungen zugrunde gelegt. S. Grosman konnte nun den Konvergenzbeweis auf spezielle anisotrope adaptive Strategien übertragen. Von ihm konnte auch gezeigt werden, dass die zugrunde gelegte adaptive Strategie für einzelne Klassen von Funktionen quasi-optimale Netze produziert. Beide Ergebnisse werden in seiner Doktorarbeit enthalten sein, die etwa Ende des Jahres 2004 fertiggestellt sein wird.

Netzsteuerung – Implementation und Tests mit Vierecksnetzen *SPC-PM 2Ad* ist ein im SFB 393 seit langem (weiter-)entwickeltes Finite-Elemente-Programm zur Lösung von zweidimensionalen Reaktions-Diffusions-Aufgaben und linearen Elastizitätsproblemen, siehe auch Abschnitt 2.4.4. Um einfache Hierarchien der Kanten zu erhalten, war seit jeher die Teilung eines Vierecks stets die Halbierung – eine Viertelung entsteht durch Nacheinanderausführen von Halbierungen in 2 Raumrichtungen. Dies kann elegant zur Erzeugung von anisotropen Netzen genutzt werden, indem der Fehlerschätzer / Fehlerindikator nicht nur ein Element zur Verfeinerung (Teilung) markiert, sondern durch zusätzliche Untersuchung festgelegt, ob Kante 1 und 3 oder Kante 2 und 4 zu teilen sind (oder alle vier).

Bevor der von uns verwendete Algorithmus angegeben wird, soll jedoch zunächst die Berechnung einer Näherung des Hessians im lokalen Elementkoordinatensystem erläutert werden, da diese Information zur Teilungsentscheidung benötigt wird, um die markierten Elemente richtungsabhängig zu halbieren. Hierzu wird als Näherung für den Hessian $H(x) = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} \right)$ in einem kleinen Gebiet $\Omega_0 \subset \Omega$ üblicherweise die Matrix

$$H = \int_{\Omega_0} H(x)v(x) d\Omega \quad \Bigg/ \quad \int_{\Omega_0} v(x) d\Omega$$

für eine beliebige Funktion $v(x) \in H^1(\Omega_0)$ vorgeschlagen. Diese ist konstant in Ω_0 . Nach Anwendung des Gaußschen Satzes kann die Approximation der 2. Ableitungen entfallen:

$$H = \left(\int_{\partial\Omega_0} v (\mathbf{n}(\nabla u)^T + \nabla u \mathbf{n}^T) ds - \int_{\Omega_0} \nabla v \nabla u^T + \nabla u \nabla v^T d\Omega \right) / \int_{\Omega_0} v d\Omega .$$

Diese Form wird von verschiedenen Autoren mit unterschiedlicher Wahl von Ω_0 und v benutzt. Für die Approximation von $H(x)$ im Element K entsteht mit $v(x) \equiv 1$ und $\Omega_0 = K$ die einfache Formel

$$H = \int_{\partial K} (\mathbf{n} \nabla u^T + \nabla u \mathbf{n}^T) ds / \text{meas}K ,$$

was mit Trapezregel zur Integration über die 4 Kanten \vec{E}_i einfach berechenbar ist:

$$H_0 = \sum_{i=1}^4 \frac{1}{2|\vec{E}_i|} \vec{E}_i^\perp (g_{\text{anf},i} + g_{\text{end},i})^T, \quad H = \frac{1}{2}(H_0 + H_0^T)$$

mit $g_{\text{anf},i}$ und $g_{\text{end},i}$ den Näherungen für ∇u am Kantenanfangs- und Kantenendknoten, die nach einer üblichen Gradientenmittelung als knotenorientierte Daten vorliegen. Diese Approximation von H entsteht aber zunächst im globalen Koordinatensystem und wird nun noch in ein noch zu definierendes elementorientiertes Koordinatensystem transformiert.

Die Festlegung dieses elementorientierten Koordinatensystems muss stabil erfolgen und andererseits auf die interne Nummerierung der Kanten Rücksicht nehmen. Deshalb sei (gegenüberliegende Kanten werden der Einfachheit halber als gleichorientiert angenommen):

$$q_1 = \frac{\vec{E}_1 + \vec{E}_3}{|\vec{E}_1 + \vec{E}_3|} \quad \text{und} \quad q_2 = q_1^\perp \quad \text{bei } |\vec{E}_1 + \vec{E}_3| > |\vec{E}_2 + \vec{E}_4|$$

andernfalls

$$q_2 = \frac{\vec{E}_2 + \vec{E}_4}{|\vec{E}_2 + \vec{E}_4|} \quad \text{und} \quad q_1 = q_2^\perp .$$

Mit $Q = (q_1 : q_2)$ wird hiernach H durch $Q^T H Q$ ersetzt.

Zur adaptiven anisotropen Netzverfeinerung hat sich folgender Algorithmus bewährt:

1. Auf der Basis der anisotropen Fehlerschätzer werden einige Elemente zur Verfeinerung markiert.
2. Zur Teilungsentscheidung wird eine Näherung des Hessians im lokalen Elementkoordinatensystem berechnet.
3. Teilungsentscheidung:

- Ist $|h_{12}^2|$ groß gegen $|h_{11} \cdot h_{22}|$, dann teile alle Kanten (Element schlecht ausgerichtet)
- sonst: Halbiere so, dass das Streckungsverhältnis $a = |\vec{E}_1 + \vec{E}_3|/|\vec{E}_2 + \vec{E}_4|$ möglichst mit $\sqrt{|h_{11}|/|h_{22}|}$ übereinstimmt.

Mit $\alpha = a^2 \cdot |h_{11}|/|h_{22}|$ wurde

$$\begin{aligned} \alpha > 3 &\implies \text{teile nur } E_1, E_3 \\ \alpha < \frac{1}{3} &\implies \text{teile nur } E_2, E_4 \\ \text{sonst :} &\implies \text{teile alle 4 Kanten} \end{aligned}$$

realisiert.

Diese Vorgehensweise erzeugte nahezu ideale Netzverfeinerungen an Randschichten. Die automatisch erzeugten Anisotropien lagen immer in der problemangepassten richtigen Größe. Dies wird durch die Experimente mit künstlich beschränkter Anisotropie bestätigt, die man in ihrer Gesamtheit auf

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

dokumentiert findet.

Es wurde hierzu vorrangig an Viereckselementen die Hessian-Strategie zur Entscheidung über Halbierung der Elemente (mit möglicher Verdoppelung des „aspect ratio“ pro Schritt) untersucht und passend zur adaptiven Datenstruktur implementiert. Analoge Ergebnisse für Dreiecksnetze sind bei weitem schwieriger zu erhalten, weil dazu Knotenverschiebungstechniken oder „Edge-swapping“ zur Zerstörung wichtiger hierarchischer Datenstrukturen führen. Die Experimente mit Viereckselementen zeigen eindrucksvoll, dass bei Randschichten (z. B. singular gestörter Probleme) die anisotropen Netze geradezu notwendig sind, um einen analogen Fehlerverlauf bei Verfeinerung zu erhalten wie bei klassischen Problemen ohne Randschichten. Ebenso haben diese Tests die Effizienz und Robustheit der neuen anisotropen Fehlerschätzer von G. Kunert unter Beweis gestellt.

Netzsteuerung – Tests mit Dreiecksnetzen Bei Dreiecksnetzen ist die beliebige Erhöhung des Streckungsverhältnisses nicht ohne weiteres möglich. Bei ‘roter’ Teilung ist sie ausgeschlossen, bei fortgesetzter ‘grüner’ Teilung entstehen zwar anisotrope Elemente, jedoch ist deren Ausrichtung mangelhaft, da die Richtung der Kanten im Ausgangsnetz und nicht die Anisotropie der Lösung die Streckungsrichtungen bestimmt. Viele Autoren verwenden deshalb Knotenverschiebungen und/oder das so genannte ‘edge swapping’. Ersteres schließt die stabile Berechnung des Jacobians durch einfache Vererbung aus (siehe Abschnitt 2.4.4), das zweite steht im Widerspruch zu den einfachen

hierarchischen Datenstrukturen, insbesondere eines Kantenbaumes zur Nutzung in den Multilevel-Lösern.

Die von uns entwickelte Idee bestand nun darin, das Grobnetz einer anisotropen Netz-Hierarchie nach Anlauf der Rechnung auf der Basis der bis dahin gewonnenen Informationen über die Lösung neu zu generieren, gegebenenfalls sogar wiederholt. Die Verfeinerung soll so geschehen, dass die Hierarchie weitgehend erhalten bleibt. Werden bei der Verfeinerung des Netzes neue Knoten eingefügt, so ist eine (kleine) Abweichung vom Mittelpunkt der Vaterknoten erlaubt.

Die Verfolgung dieser Idee führte zu zunächst zu zwei Erkenntnissen.

- Die Neugenerierung von Netzen auf der Basis von Informationen über die zu approximierende Lösung ist eine anspruchsvolle Aufgabe, zu der es in mehreren Gruppen weltweit intensive, oft jahrelange Forschung gibt. Mit den vorhandenen personellen Möglichkeiten ist es nicht möglich einen vergleichbaren Netzgenerator neu zu entwickeln. Wir konnten jedoch zwei dieser Netzgeneratoren testen, den von V. Dolejší (Karls-Universität Prag) und BAMG von P. L. George (INRIA, Frankreich).
- Das Zulassen, neue Knoten nicht im Kantenmittelpunkt einzufügen, sondern leicht davon abzuweichen, liefert zwar mehr Freiheiten zur Optimierung des Finite-Elemente-Netzes, aber die numerischen Tests unserer theoretischen Untersuchungen, wo die neuen Knoten positioniert sein sollten, lieferten nicht die gewünschte Verbesserung der Approximation. Deshalb haben wir diese Versuche wieder eingestellt.

Als positives Resultat sollen jetzt einige Testergebnisse präsentiert werden, bei denen das ursprünglich uniforme Startnetz durch Iteration der Schritte

1. Berechnung der Finite-Elemente-Lösung der Aufgabe

$$\begin{aligned}
 -10^{-6} \Delta u + u &= f = \begin{cases} 1 & \text{für } x < 0.3(y+1), \\ 0 & \text{für } x > 0.3(y+1), \end{cases} \\
 u &= 1 \quad \text{an der Kante } x = 0, \\
 u &= 0 \quad \text{an der Kante } x = 1, \\
 \partial_n u &= 0 \quad \text{an den Kanten } y = 0 \text{ und } y = 1,
 \end{aligned}$$

2. Konstruktion eines neuen Netzes mit BAMG unter Verwendung der berechneten Lösung auf dem vorherigen Netz,

in ein anisotropes Startnetz für die eigentliche Finite-Element-Rechnung überführt wurde. Tabelle 2.1 zeigt die Entwicklung der Knoten- und Elementzahlen. Die Bilder 2.1 und 2.2 zeigen die Lösung und das Netz am Beginn und nach der 5. Iteration. Man erkennt, dass man mit wenigen Iterationen eines nahezu nichts kostenden Algorithmus (man bachte die geringen Knotenanzahlen) ein sehr günstiges anisotropes Startnetz erstellen kann, das geeignet ist, mit hierarchischer weiterer Verfeinerung bessere Lösungen zu produzieren, als es mit dem uniformen Ausgangsnetz möglich gewesen wäre.

Zusammenfassung Insgesamt zeigten die theoretischen und praktischen Untersuchungen der Hessian-Strategie, dass diese für die adaptive Generierung anisotroper hierarchischer Netze geeignet ist. Dabei wurden sowohl Vierecks- als auch Dreiecksnetze am Beispiel von Reaktions-Diffusions-Aufgaben mit extremen Rand- oder inneren Schichten getestet. Ein Vergleich ist schwer möglich, da die verwendeten Programme sehr unterschiedliche Entwicklungsstufen haben.

Schritt	Knoten	Dreiecke
0	1681	3200
1	680	1326
2	1604	3172
3	2452	4876
4	2432	4836
5	1895	3750
6	1743	3456
7	1683	3335
8	1621	3208
9	1556	3074

Tabelle 2.1: Knoten- und Elementzahlen bei der Startnetz-Generierung mit Hilfe von BAMG

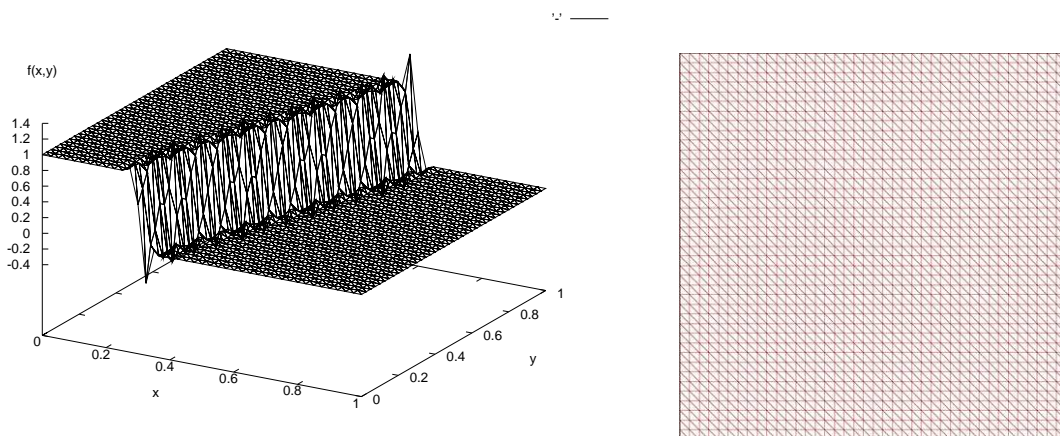


Abbildung 2.1: Oszillationsbehaftete Lösung und zugehöriges uniformes Ausgangsnetz

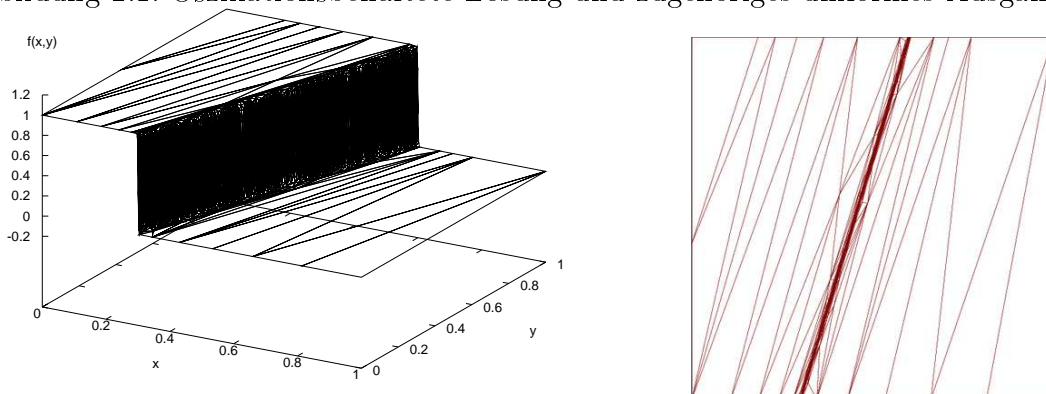


Abbildung 2.2: Lösung und anisotropes Netz nach 5 Iterationen

Weitere Ergebnisse

Überblicksartikel Ein zusammenfassender Artikel über anisotrope Diskretisierungen des Poisson- und des Stokesproblems in Gebieten mit Kanten wurde in [ANS01] veröffentlicht.

Für die 2004 erscheinende *Encyclopedia of Computational Mechanics* wurde Th. Apel gebeten, einen Artikel über Interpolation in Finite-Element-Räumen zu schreiben. Die Arbeit [Ape04] gibt einen Überblick über verschiedene Interpolationsoperatoren und lokale Abschätzungen des entsprechenden Interpolationsfehlers. Die Darlegung beschränkt sich auf die h -Version der Finite-Element-Methode, diskutiert aber verschiedenste Elementtypen (Dreiecks-, Vierecks-, Tetraeder und Hexaederelemente; affine und nicht-affine Elemente, isotrope und anisotrope Elemente, Lagrange- und andere Elemente).

Transformation von Hexaeder- in Tetraedernetze Th. Apel und N. Düvelmeyer haben sich mit Algorithmen zur Umwandlung von Hexaeder- in Tetraedernetze beschäftigt, wobei keine neuen Knoten eingeführt werden. Die bisher bekannten Algorithmen nutzen nur die topologische Struktur des Netzes, jedoch keine geometrischen Informationen. In der entstandenen Arbeit [AD03] wird ein Algorithmus beschrieben, der es erlaubt Qualitätskriterien für die Teilung von Vierecksflächen zu fordern.

Implementierung der Singulärfunktionenmethode Eckensingularitäten können numerisch mit der Singulärfunktionenmethode behandelt werden. Die Idee ist dabei, singuläre Lösungsanteile explizit in den diskreten Raum aufzunehmen. Im Zweidimensionalen ist das seit den 70er Jahren bekannt. Da wir auch Singulärfunktionen zu Polyederecken im Dreidimensionalen berechnen können und weil wir die Hoffnung auf eine zur FEM mit ausschließlicher Netzverfeinerung konkurrenzfähige Methode haben, wurde die Singulärfunktionenmethode von Chr. Gay in das von Th. Apel entwickelte 3D-Finite-Element-Paket *FEMPS3D* implementiert [Gay02]. S. Trebesius setzt die Arbeiten derzeit fort und untersucht theoretisch und numerisch entsprechende a posteriori Fehlerschätzer.

2.4.2 Auflösungsverfahren bei anisotropen Diskretisierungen

Von Jung, Schlömer und Sohn (Institut für Wissenschaftliches Rechnen, TU Dresden) wird ein schneller Löser für das Randwertproblem $-\varepsilon\Delta u + u = f$ in $\Omega = (0, 1)^2$ und $u = 0$ auf $\partial\Omega$ ($\varepsilon \ll 1$) entwickelt. Da bei diesem Problem in Randnähe Randschichten auftreten, müssen längs des Randes bei der Finite-Elemente-Diskretisierung anisotrope Elemente eingesetzt werden (siehe Abbildung 2.3).

Auf der Basis einer nichtüberlappenden Gebietszerlegung, im Beispiel einer Zerlegung in neun Teilgebiete, wird ein Gebietszerlegungsvorkonditionierer konstruiert. Zur Lösung der Teilprobleme im Inneren der Teilgebiete werden Mehrgitterverfahren angewendet. In den anisotrop vernetzten Teilgebieten kommen dabei Linienglätter zum Einsatz. Bei der Konstruktion des Schurkomplement-Vorkonditionierers werden Ideen aus [KW98] genutzt. Die bei der Konstruktion dieses Löser gewonnenen Erfahrungen bilden eine Grundlage für die Entwicklung schneller Löser in den adaptiven Algorithmen. Da die Entwicklung der speziellen Löser für die anisotropen Diskretisierungen derzeit noch nicht abgeschlossen ist, werden wir theoretische und numerische Resultate am Ende der Laufzeit des Teilprojektes präsentieren.

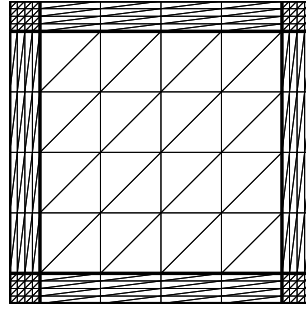


Abbildung 2.3: Anisotrope Diskretisierung

Für anisotrope Vernetzungen in der Umgebung von Kanten wurden schnelle Auflösungsverfahren untersucht. Von Apel und Schöberl wurde in [AS02] dazu ein Mehrgitterverfahren vorgeschlagen, bei dem Semicoarsening senkrecht zur Kante mit einem Linienglätter in Kantenrichtung kombiniert wurde. Die optimale Konvergenz des Verfahrens konnte bewiesen werden.

In der Diplomarbeit [Sei02] wurde eine Multilevel-Vorkonditionierung für das Verfahren der konjugierten Gradienten untersucht. Im Vorkonditionierungsschritt müssen statt des großen Gleichungssystems viele kleinere Gleichungssysteme gelöst werden. Diese sind zum Teil gleich, weshalb auch direkte Verfahren zur Lösung in Betracht gezogen werden können. Für den Vorkonditionierer wurde in der vorliegenden Diplomarbeit analog zu [Zha92] gezeigt, dass die Konditionszahl des vorkonditionierten Problems unabhängig von der Diskretisierungsschrittweite beschränkt ist. Wenn die kleinen Gleichungssysteme mit optimaler Komplexität gelöst werden können (was nicht klar ist), kann also auch das Ausgangsgleichungssystem mit optimaler Komplexität gelöst werden.

2.4.3 Auflösungsstrategien für Verfahren höherer Ordnung

Vorkonditionierung für p -Versions Elementmatrix in beliebigen Dimensionen

Die von S. Beuchler im Antragszeitraum 1999–2001 entwickelten Vorkonditionierer für die Elementsteifigkeitsmatrix $K_{1,2}$, also für $d = 2$, basieren auf Interpretationen der Matrix $K_{1,2}$ als Diskretisierungsmatrix eines degenerierten elliptischen Problems zweiter Ordnung. Eine analoge Interpretation ist sowohl für $K_{1,d}$ als auch für die in (2.8) involvierten Matrizen F_1 und D_1 möglich:

Dazu betrachte man die Randwertaufgabe 2. Ordnung:

Suche $u \in H_0^1((0, 1))$, so dass

$$a_1(u, v) = \int_0^1 u'(x)v'(x) + \omega^2(x)u(x)v(x) = \int_0^1 g(x)v(x) \quad \forall v \in H_0^1((0, 1)) \quad (2.9)$$

gilt.

Problem (2.9) wird mit stückweise linearen finiten Elementen auf dem Netz $\left\{ \left(\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n} \right) \right\}_{i=1}^n$ diskretisiert, wobei $n = 2^l$ und l das Level der Verfeinerung ist. Als Basisfunktionen

werden die Hütchenfunktionen

$$\phi_i^{(1,l)}(x) = \begin{cases} nx - (i-1) & \text{auf } \tau_i^l \\ (i+1) - nx & \text{auf } \tau_{i+1}^l \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \forall i = 1, \dots, n-1$$

des l -ten Levels gewählt. Weiterhin sei $\mathbb{U}_l = \text{span} \left\{ \phi_i^{(1,l)} \right\}_{i=1}^{n-1}$. Dann ist die Galerkin-Projektion von (2.9) auf \mathbb{U}_l äquivalent zum Lösen des linearen Gleichungssystems

$$\begin{aligned} (M_\omega + T_{\omega=1})\underline{u} &= \underline{g}, \quad \text{wobei} \\ M_\omega^\phi &= \left[\langle \phi_j^{(1,l)}, \phi_i^{(1,l)} \rangle_\omega \right]_{i,j=1}^{n-1}, \quad T_\omega^\phi = \left[\langle (\phi_j^{(1,l)})', (\phi_i^{(1,l)})' \rangle_\omega \right]_{i,j=1}^{n-1} \\ \text{mit } \langle u, v \rangle_\omega &= \int_0^1 \omega^2(x) u(x) v(x) \, dx \end{aligned}$$

als das gewichtete $L_{2,\omega}((0,1))$ -Skalarprodukt. In [Beu03c] wird nun gezeigt, dass

$$D_1 \sim 6n^3 M_{\omega=x}^\phi \quad \text{und} \quad 2nF_1 \sim T_{\omega=1}^\phi, \quad (2.10)$$

d.h. die in (2.8) eingeführten Matrizen F_1 und D_1 , vgl. Abschnitt 2.3.3, haben eine Interpretation als h -Versions Finite-Element-Massen- und Steifigkeitsmatrix. Für die Matrix $K_{1,d}$ ist eine analoge Interpretation möglich. Wir verweisen exemplarisch für die Fälle $d=2$ und $d=3$ auf [BSS04].

In einem weiteren Schritt wird nun eine Multilevelbasis $\{\psi_j^k\}_{k \leq l} \subset \mathbb{U}_l$ gesucht, in der die Matrizen $T_{\omega=1}^\psi = \left[\langle (\psi_j^{k'})', (\psi_j^{k'})' \rangle_{\omega=1} \right]_{k,k' \leq l}$ und $M_\omega^\psi = \left[\langle \psi_j^{k'}, \psi_j^k \rangle_\omega \right]_{k,k' \leq l}$ spektraläquivalent zu den beiden Diagonalmatrizen $D_{T_{\omega=1}^\psi} = \text{diag} [2^{2k}]_{k \leq l}$ und $D_{M_\omega^\psi} = \text{diag} [\omega^2(2^{-k}j)]_{k \leq l}$ sind, d.h. es gilt

$$T_{\omega=1}^\psi \sim D_{T_{\omega=1}^\psi} \quad \text{und} \quad M_\omega^\psi \sim D_{M_\omega^\psi}. \quad (2.11)$$

In Zusammenarbeit mit Reinhold Schneider (TU Chemnitz, Teilprojekte A7, A12, A13) und Christoph Schwab (ETH Zürich) (Besuche von Schwab in Chemnitz 20.–23.11.2001 und 7.–8.7.2002, Beuchler in Zürich 8.–13.9.2002) konnte für eine biorthogonale Waveletbasis $\{\psi_j^k\}_{k \leq l} \subset \mathbb{U}_l$, d.h. $\langle \psi_j^k, \tilde{\psi}_{j'}^{k'} \rangle = \delta_{kk'} \delta_{jj'}$, und eine Gewichtsfunktion ω , die die Annahmen

- $\|v\|_0^2 \sim \sum_{k=1}^{\infty} \sum_j |\langle v, \psi_j^k \rangle|^2 \sim \sum_{k=1}^{\infty} \sum_j |\langle v, \tilde{\psi}_j^k \rangle|^2 \quad \forall v \in L_2((0,1))$
-

$$\|v\|_1^2 \sim \sum_{k=1}^{\infty} 2^{2l} \sum_j |\langle v, \psi_j^k \rangle|^2 \quad \forall v \in H_0^1((0,1)) \quad (2.12)$$

- $\psi_j^k \in W^{1,\infty}((0,1)), \tilde{\psi}_j^k \in W^{1,\infty}((0,1))$
- $\psi_j^k \approx x^\beta$ bei $x=0$, $\tilde{\psi}_j^k \approx x^{\tilde{\beta}}$ bei $x=0$,
- $\omega(x) \in W^{1,\infty}((\delta,1))$ mit einem gewissen $\delta > 0$,
- $\omega(x) \approx x^\alpha$ bei $x=0$,

- $\alpha + \beta > -0.5$, $-\alpha + \tilde{\beta} > -0.5$

erfüllen, gezeigt werden, dass

$$M_\omega^\psi \sim D_{M_\omega^\psi} \quad (2.13)$$

gilt. Aus (2.12) und (2.13) folgen nun sofort die Beziehungen (2.11), da $\beta = \tilde{\beta} = 1$ und $\alpha = 1$, d.h. alle Annahmen erfüllt sind, und es stückweise lineare biorthogonale Waveletbasen gibt, die die verbleibenden Bedingungen erfüllen. Ein Beispiel sind die Waveletfamilien ψ_{26} mit 2 verschwindenden Momenten auf primaler und 6 verschwindenden Momenten auf dualer Seite. Daraus lässt sich ein Vorkonditionierer für $K_{1,d}$ entwickeln. Die Herangehensweise wird am Beispiel $d = 2$ erläutert und lässt sich mit analogen Tensorproduktargumenten auf den allgemeinen Fall übertragen.

Mit Q bezeichnen wir die Basistransformationsmatrix zwischen der Wavelet-Basis $\{\psi_j^k\}_{k \leq l}$ und $\{\phi_i^{(1,l)}\}_{i=1}^{n-1}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} K_{1,2} &= F_1 \otimes D_1 + D_1 \otimes F_1 \\ &\sim 3n^2 \left(T_{\omega=1}^\phi \otimes M_{\omega=x}^\phi + M_{\omega=x}^\phi \otimes T_{\omega=1}^\phi \right) \\ &= 3n^2 \left(Q^{-T} T_{\omega=1}^\psi Q^{-1} \otimes Q^{-T} M_{\omega=x}^\psi Q^{-1} + Q^{-T} M_{\omega=x}^\psi Q^{-1} \otimes Q^{-T} T_{\omega=1}^\psi Q^{-1} \right) \\ &= 3n^2 \left(Q^{-T} \otimes Q^{-T} \right) \left(T_{\omega=1}^\psi \otimes M_{\omega=x}^\psi + M_{\omega=x}^\psi \otimes T_{\omega=1}^\psi \right) \left(Q^{-1} \otimes Q^{-1} \right) \\ &\sim 3n^2 \left(Q^{-T} \otimes Q^{-T} \right) \left(D_{T_{\omega=1}^\psi} \otimes D_{M_{\omega=x}^\psi} + D_{M_{\omega=x}^\psi} \otimes D_{T_{\omega=1}^\psi} \right) \left(Q^{-1} \otimes Q^{-1} \right) \\ &= 3n^2 C_2^\psi. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Die Operation $C_2^\psi \underline{w} = \underline{r}$ kostet $\mathcal{O}(n^d) = \mathcal{O}(p^d)$ arithmetische Operationen, ist also optimal. Analog lässt sich nun ein Vorkonditionierer C_d^ψ für $K_{1,d}$ entwickeln.

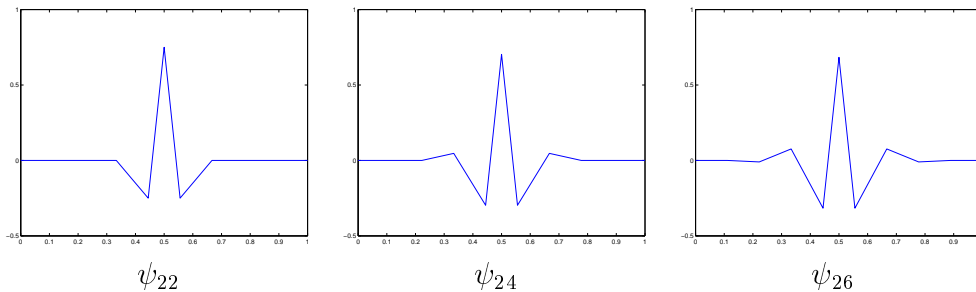
Aufbauend auf diesem Resultat konnte in [Beu03c] mit ähnlichen Argumenten auch die Spektraläquivalenzbeziehung $2nF_1 \sim T_{\omega=1}^\phi$ (2.10) gezeigt werden, die eine Verschärfung der Abschätzung $T_{\omega=1}^\phi \preceq 2nF_1 \preceq (1 + \log n)T_{\omega=1}^\phi$ ist, vgl. Arbeits- und Ergebnisbericht SFB 393 1999–2001. Die Beziehung (2.10) bewirkt auch die Verschärfung der Konditionszahlabschätzungen in [Beu02] von $\kappa((\mathcal{M}^S)^{-\frac{1}{2}} K_2 (\mathcal{M}^S)^{-\frac{1}{2}}) \preceq (1 + \log p)$ für die Multigradvorkonditionierer für K_2 auf $\kappa((\mathcal{M}^S)^{-\frac{1}{2}} K_2 (\mathcal{M}^S)^{-\frac{1}{2}}) = \mathcal{O}(1)$. Die Resultate aus [Beu03c], [BSS04] bildeten nun die Grundlage für die Definition eines geeigneten Fortsetzungsoperators, welcher in (2.4) die Matrix $K_I^{-1} K_{IE}$ durch eine Matrix $-E$ ersetzt, [BS03]. Diese Konstruktion lässt sich auch auf den 3D-Fall übertragen.

Die Tabellen 2.2 und 2.3 zeigen Iterationszahlen und Rechenzeiten des PCG-Verfahrens zum Lösen von $K_d \underline{u} = \underline{f}$, $d = 2, 3$ mit verschiedenen Waveletvorkonditionierungen mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-10} in der vorkonditionierten Energienorm. Es wurden die Waveletfamilien ψ_{2i} mit zwei verschwindenden Momenten auf primaler und $i = 2, 4, 6$ verschwindenden Momenten auf dualer Seite benutzt. In Abbildung 2.4 ist jeweils ein Wavelet der entsprechenden Familien abgebildet. Die Vorkonditionierung mit dem Wavelet ψ_{22} zeigt dabei in Bezug auf Rechenzeit und Iterationszahlen, die geringfügig ansteigen, die besten Ergebnisse. Für das Wavelet ψ_{26} sind die Iterationszahlen relativ hoch.

p	ψ_{22}		ψ_{24}	ψ_{26}
	Zeit in sek.	It.		
7	0.000	41	7	7
15	0.000	22	22	22
31	0.031	30	38	30
63	0.094	36	56	72
127	0.406	42	81	141
255	2.220	46	115	296
511	11.000	51	147	489
1023	48.600	55	175	752
2047	241.000	58	200	963

Tabelle 2.2: Iterationszahlen der Wavelet-VK für $K_2 \underline{u} = \underline{f}$.

p	ψ_{22}		ψ_{24}	ψ_{26}
	Zeit in Sek.	It.		
7	0.004	3	19	19
15	0.266	41	41	41
31	3.480	50	67	49
63	38.200	56	104	164
127	447.000	64	160	446
255	4293.000	72	228	996

Tabelle 2.3: Iterationszahlen der Wavelet-VK für $K_3 \underline{u} = \underline{f}$.Abbildung 2.4: Wavelets ψ_{22} , ψ_{24} , ψ_{26} .

Implementierung des DD -Vorkonditionierers in 2D

Wir betrachten die Poisson-Gleichung in einem Gebiet $\bar{\Omega} = \bigcup_{i=1}^{nel} \bar{\Omega}_i$ mit $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ für $i \neq j$. Dann lässt sich für die in Abschnitt 2.3.3 beschriebene Matrix $K^{(1)}$ (2.2) folgender Vorkonditionierer entwickeln.

$$C^{(1)} = \begin{bmatrix} I_E & K_{EI}K_I^{-1} \\ 0 & I_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{S,E} & 0 \\ 0 & C_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_E & 0 \\ K_I^{-1}K_{IE} & I_I \end{bmatrix}.$$

Dabei ist C_I der Vorkonditionierer für den Löser der Teilgebiete. Als Wahlmöglichkeiten bieten sich der von Sven Beuchler im Rahmen seiner Promotion [Beu03b] entwickelte Multigrid-Vorkonditionierer \mathcal{M}^S , d.h. $C_I = \text{blockdiag} [\mathcal{M}^S]_{i=1}^{nel}$ oder der in (2.14) entwickelte Wavelet-Vorkonditionierer C_2^ψ an, d.h.

$$C_I = \text{blockdiag} [W^\psi]_{i=1}^{nel} \quad \text{mit} \quad W^\psi = 3n^2 P \text{blockdiag} [C_2^\psi]_{i=1}^4 P^T \quad (2.15)$$

und der Permutationsmatrix P aus Beziehung (2.7). Dann gelten für beide Vorkonditionierer die Spektraläquivalenzbeziehungen $C_I \sim A_I$, [Beu03c]. Als Vorkonditionierer für S_E werden die in [JK97] beschriebenen Vorkonditionierer benutzt. Zusätzlich wurde für den Block K_V der Matrix K ein Yserentant-Vorkonditionierer mit Grobgridlöser benutzt, falls eine Diskretisierung mittels hp -Version der FEM vorliegt. Diese Domain-Decomposition Vorkonditionierer wurden von Sven Beuchler im Berichtszeitraum in das bestehende parallele Programm *SPC-PM-Po2p* implementiert und auf dem Chemnitzer Linux Cluster (CLiC) auf ihre Effizienz hin in verschiedenen Beispielen untersucht. Exemplarisch seien hier die Beispiele *hufen* und *qua1* aufgeführt. Abbil-

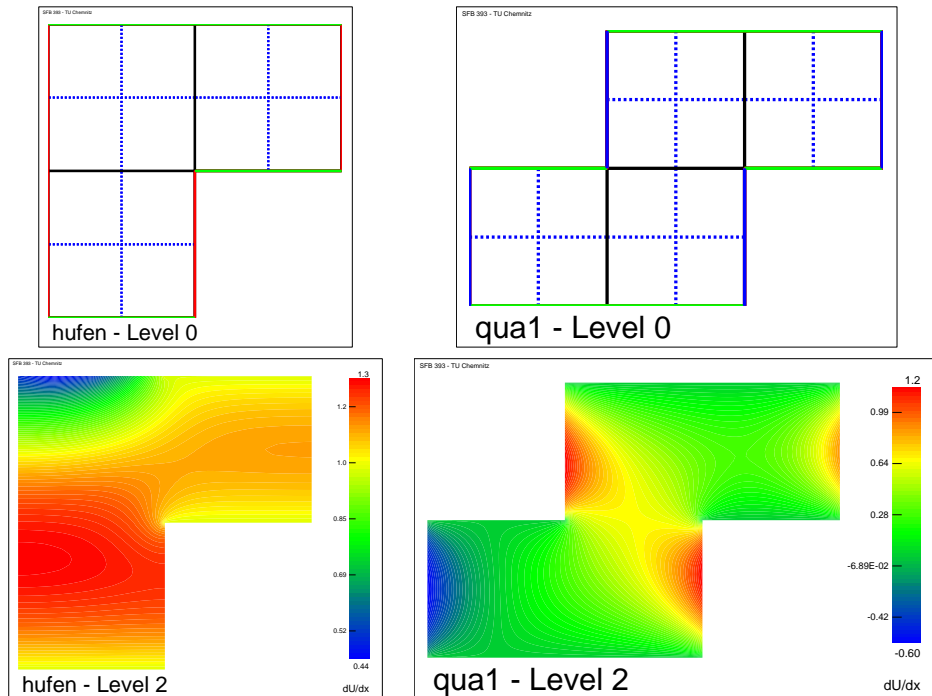


Abbildung 2.5: Beispiele *hufen* (links) und *qua1* (rechts).

		Levels of refinement							Levels of refinement				
p		0	1	2	3	4	p		0	1	2	3	4
1		2	10	16	20	24	1		2	10	16	20	25
3		11	21	27	31	34	3		10	20	28	32	35
5		15	25	32	35	38	5		13	25	31	36	40
9		16	29	36	40	43	9		14	28	34	41	44
15		18	31	37	44	46	15		15				
25		20	34	39	47	50	25		17				
33		22	35	40	49	52	33		18				
45		24	36	42			45		19				
63		27	40	43			63		21				
125		30					125		23				
243		34					243		24				
513		36					513		26				

Tabelle 2.4: Iterationszahlen des PCG-Verfahrens bei den Beispielen `huf en` (links) und `qua1` (rechts).

dung 2.5 zeigt die Vernetzung des Gebietes im Level 0 (Grobnetz) und das Verhalten der Lösung, Tabelle 2.4 die Iterationszahlen des PCG-Verfahrens mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-5} in Abhängigkeit vom Polynomgrad (p -Verfeinerung) und der Anzahl der Levels (gleichmäßige h -Verfeinerung). Dabei ist ein moderates Anwachsen der Iterationszahlen bezüglich p in allen Levels festzustellen. Die Ursache für dieses Anwachsen ist in der Abschätzung (2.3) und in den Konditionszahlabschätzungen $\kappa(C_{S,E}^{-\frac{1}{2}} S_E C_{S,E}^{-\frac{1}{2}}) \leq (1 + \log p)^\alpha$ mit $\alpha = 1$ begründet.

Weitere Experimente sind in der Arbeit [Beu03a] und unter der Homepage

<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/software/p-version-2D>

zu finden. Dabei ist ein ähnliches asymptotisches Verhalten bezüglich anwachsendem Polynomgrad wie in den anderen Beispielen festzustellen, die absoluten Iterationszahlen sind jedoch teilweise sehr verschieden.

Vorkonditionierung bei entarteten Elementen in 2D

Kritisch waren vor allem Elemente, die in ihren geometrischen Abmessungen sehr stark vom Quadrat abweichen, wie z.B. ein Rechteck mit den Seitenlängen a und b mit $a \gg b$. Dann fließen in die Konditionszahlabschätzungen für $C_1^{-1} A_1$ die Parameter a und b ein. Im Falle des Rechteckes mit den Seitenlängen a und b lässt sich mittels

$$C_{2,a,b}^{\psi} = 3n^2 (Q^{-T} \otimes Q^{-T}) \left(\frac{a}{b} D_{T_{\omega=1}^{\psi}} \otimes D_{M_{\omega=x}^{\psi}} + \frac{b}{a} D_{M_{\omega=x}^{\psi}} \otimes D_{T_{\omega=1}^{\psi}} \right) (Q^{-1} \otimes Q^{-1})$$

anstelle von C_2^{ψ} (2.14) ein optimaler Wavelet-Vorkonditionierer konstruieren, bei dem die Konditionszahl der vorkonditionierten Systemmatrix unabhängig vom Polynomgrad und den Parametern a und b ist, [BSS04].

2.4.4 Software

Überblick

In Kooperation mit den Teilprojekten A3 – A11 – A12 – D1 (im Wesentlichen) sind Programmrealisierungen entstanden, die konsequent auf gleichartigen Grundbibliotheken basieren. Die im Folgenden aufgelisteten Experimentalprogramme unterscheiden sich somit lediglich in ihrer konkreten Aufgabenverfolgung, nicht aber im Aufbau aus hochgradig gleichen Bausteinen (Modul-Bibliotheken). Deshalb wurden sie mit folgender Namensgebung belegt:

<i>SPC-</i>	für <i>scientific parallel computing</i> in Chemnitz
<i>PM</i>	für Programm-Modul
<i>Name</i>	mit der Spezifikation der Leistung.

Im Einzelnen entstanden:

<i>SPC-PM 2Ad</i>	adaptives 2D-FE-Programm für Reaktions-Diffusionsaufgaben und lineare Elastizität Zusatz: Kontakt, Rissfortschritt, Rotationssymmetrie
<i>SPC-PM 3Ad</i>	adaptives 3D-FE-Programm für Reaktions-Diffusionsaufgaben und lineare Elastizität Parallelversion mit Balancierung aus Tp. B8
<i>SPC-PM 2Ad Nl</i>	adaptives 2D-FE-Programm für Deformationsprobleme mit nichtlinearem Materialverhalten
<i>SPC-PM AdSt</i>	adaptives 2D-FE-Programm für das Stokes-Problem
<i>SPC-PM AdMix</i>	adaptives 2D-FE-Programm für allgemeinere gemischte FE-Formulierungen
<i>SPC-PM AdPl</i>	adaptives 2D-FE-Programm für die Mindlin-Reissner-Plattengleichung mit MITC-Elementen
<i>SPC-PM Po2p</i>	nichtadaptives, paralleles 2D-Programm für Laplace mit beliebigem Polynomgrad

Die geschilderten numerischen Experimente wurden mit dem Programmbaustein *SPC-PM 2Ad* („Programm-Modul 2D-adaptive FEM für Potential- und Elastizitätsprobleme“) durchgeführt, der (schon konzipiert in der vorangegangenen Phase, siehe Arbeits- und Ergebnisbericht SFB 393 1999–2001) wesentlich weiter verbessert und komplettiert wurde. Neue Bestandteile sind:

- Netzvergrößerung – erreicht durch eine zusätzliche, aber sehr sparsame Datenstruktur des „Elementebaums“,
- Stabile Rechnung auch bei sehr starken Verfeinerungen, z.B. an Singularitäten (s.u.),
- Signorini-Kontakt mit beliebig geformten Hindernissen (s. Tp. A12),
- „Risswachstum“ – Aufreißen des Netzes zum Schlitzgebiet unter Erhalt der hierarchischen Datenstrukturen (s. Tp. D1).

Stabile adaptive Rechnung

Für die hier geschilderten Ergebnisse ist insbesondere die Stabilisierung der numerischen Rechnung bei extremen Verfeinerungen von Wichtigkeit. Immer wenn Gradienten im Element zu berechnen sind, wird von der üblichen Transformation eines Masterelements auf das Weltelement Gebrauch gemacht und der Jacobian dieser Abbildung benötigt. Dies tritt unumgänglich bei den Elementroutinen auf (Gradienten der Formfunktionen in Gaußpunkten zu berechnen) und im Post-Processing v.a. bei Fehlerschätzern (z.B. Sprung von $(\nabla u) \cdot \mathbf{n}$ über einer Elementkante). Die klassischen Finite Elemente Routinen berechnen diese Jacobi-Matrix mit der Formel

$$J = \sum_{i=1}^{n_e} (\nabla N_i) x^{(i)T}$$

aus den Knoten $x^{(i)}$ des Elements und den Formfunktionen des Masterelements $N_i(\hat{x})$. Dabei treten stets Differenzen von Knotenkoordinaten auf (z.B. im einfachsten Falle des linearen Dreiecks $J = (x^{(2)} - x^{(1)} : x^{(3)} - x^{(1)})^T$). Da bei jeder Kantenteilung die neuen Knoten eine Bitrepräsentation ihrer Mantisse erhalten, die um 1 Bit mehr mit der ihrer Väter übereinstimmt, führt die adaptive Teilung nach etwa 20 Schritten zu Instabilitäten, weil J wegen drastiger Mantissenauslöschung nicht mehr genau genug berechenbar ist.

Dies wurde in [Mey03b] für Dreiecke und Vierecke sowie für 3D-Elemente besonders untersucht. Es wurde eine „Vererbung“ der Matrix J bei der Teilung der Elemente angegeben, die diese Instabilität vollständig beseitigt. Eine Ausdehnung auf gekrümmte Ränder ist in [Mey03a] angefügt.

Literaturverzeichnis

- [AB98] M. Ainsworth und I. Babuška. Reliable and robust a posteriori error estimation for singularly perturbed reaction-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 36:331–353, 1998.
- [AD03] Th. Apel und N. Düvelmeyer. Transformation of hexahedral finite element meshes into tetrahedral meshes according to quality criteria. *Computing*, 71:293–304, 2003.
- [AGJM01] Th. Apel, S. Grosman, P. K. Jimack und A. Meyer. A new methodology for anisotropic mesh refinement based upon error gradients. Preprint SFB393/01-11, TU Chemnitz, 2001. Erweiterte Fassung erscheint bei Appl. Numer. Math. 2004.
- [ANS01] Th. Apel, S. Nicaise und J. Schöberl. Finite element methods with anisotropic meshes near edges. In P. Neittaanmäki und M. Křížek, Hrsg., *Proc. Internat. Conf. Finite Element Methods: Three-dimensional Problems, GAKUTO Internat. Series, Math. Sci. Appl.*, Bd. 15, S. 1–8, Tokyo, 2001. Gakkotosho.
- [Ape04] Th. Apel. Interpolation in h -version finite element spaces. In E. Stein, R. de Borst und T. J. R. Hughes, Hrsg., *Encyclopedia of Computational Mechanics*. Wiley, 2004.
- [AS02] Th. Apel und J. Schöberl. Multigrid methods for anisotropic edge refinement. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40:1993–2006, 2002.
- [Beu02] S. Beuchler. Multi-grid solver for the inner problem in domain decomposition methods for p -FEM. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40(3):928–944, 2002.

- [Beu03a] S. Beuchler. A Dirichlet-Dirichlet DD preconditioner for p -FEM. Preprint SFB393 03-12, Technische Universität Chemnitz, July 2003.
- [Beu03b] S. Beuchler. Multi-level solvers for degenerated problems with applications to p -versions of the fem. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, 2003.
- [Beu03c] S. Beuchler. Optimal preconditioners for the p -version of the FEM. Preprint SFB393 03-03, Technische Universität Chemnitz, March 2003.
- [BS03] S. Beuchler und J. Schöberl. Extension operators on tensor product structures in 2d and 3d. Technical Report 2003-01, Johann Radon Institute for Computational Applied Mathematics, Linz, December 2003.
- [BSS04] S. Beuchler, R. Schneider und C. Schwab. Multiresolution weighted norm equivalences and applications. *Numerische Mathematik*, 2004. (zur Veröffentlichung angenommen).
- [CKN03] E. Creusé, G. Kunert und S. Nicaise. A posteriori error estimation for the Stokes problem: Anisotropic and isotropic discretizations. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 2003. (eingereicht).
- [Dör96] W. Dörfler. A convergent adaptive algorithm for Poisson's equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33:1106–1124, 1996.
- [Gay02] Chr. Gay. Solving of Poisson equations with singularities. Projet de fin d'études, TU Chemnitz, 2002.
- [Gro02] S. Grosman. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion problem on anisotropic finite element meshes. Preprint SFB393/02-07, TU Chemnitz, 2002.
- [Gro04] S. Grosman. The robustness of the hierarchical a posteriori error estimator for reaction-diffusion equation on anisotropic meshes. Preprint SFB393/04-02, TU Chemnitz, 2004.
- [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.
- [KMN03] G. Kunert, Z. Mghazli und S. Nicaise. A posteriori error estimation for a finite volume discretization on anisotropic meshes. Preprint SFB393/03–16, TU Chemnitz, 2003.
- [KN04] G. Kunert und S. Nicaise. Zienkiewicz–Zhu error estimators on anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. *Math. Model. Numer. Anal.*, 2004. (zur Veröffentlichung angenommen).
- [Kun99] G. Kunert. *A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes*. Dissertation, TU Chemnitz, 1999. Logos, Berlin, 1999.
- [Kun01] G. Kunert. A posteriori H^1 error estimation for a singularly perturbed reaction diffusion problem on anisotropic meshes. Preprint SFB393/01-21, TU Chemnitz, August 2001. *IMA J. Numer. Anal.* (eingereicht).
- [Kun02] G. Kunert. Towards anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. *Numer. Meth. PDE*, 18(6):625–648, 2002.

- [Kun03a] G. Kunert. Advances in a posteriori error estimation on anisotropic finite element discretizations. TU Chemnitz, März 2003. Habilitationsschrift.
- [Kun03b] G. Kunert. A posteriori error estimation for convection dominated problems on anisotropic meshes. *Math. Methods Appl. Sci.*, 26(7):589–617, 2003.
- [KW98] B. N. Khoromskij und G. Wittum. Robust interface reduction for highly anisotropic elliptic equations. In W. Hackbusch und G. Wittum, Hrsg., *Multigrid Methods V, Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, Bd. 3, S. 140–151. Springer, 1998. Proceedings of the Fifth European Multi-Grid Conference held in Stuttgart, Germany, October 1–4, 1996.
- [Mey03a] A. Meyer. Stable calculation of the Jacobians for curved triangles. Preprint SFB393/03-05, TU Chemnitz, 2003.
- [Mey03b] A. Meyer. Stable evaluation of Jacobian matrices on highly refined finite element meshes. *Computing*, 70:359–373, 2003.
- [MNS00] P. Morin, R. H. Nochetto und K. Siebert. Data oscillation and convergence of adaptive FEM. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38:466–488, 2000.
- [Sei02] J. Seidel. Eine Auflösungsmethode für das Finite-Elemente-Gleichungssystem bei anisotroper Diskretisierung in der Umgebung einer Kante. Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2002.
- [Zha92] X. Zhang. Multilevel Schwarz methods. *Numer. Math.*, 63:521–539, 1992.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Das Teilprojekt A3 soll in der nächsten Antragsperiode nicht wieder beantragt werden. Das ergibt sich zum einen aus dem Weggang der Antragsteller Th. Apel und G. Kunert, die vor allem auf dem Gebiet der anisotropen Diskretisierungen in den letzten Jahren viel Arbeit geleistet haben, die auch international Anerkennung gefunden hat. Zum anderen wurde das Teilthema *Auflösungsstrategien für Verfahren höherer Ordnung* vor allem von S. Beuchler bearbeitet, der die TU Chemnitz ebenfalls verlassen hat. Der Ruf von Th. Apel auf eine Professur, die Habilitation von G. Kunert und die Promotion von S. Beuchler bescheinigen dem Projekt eine erfolgreiche Arbeit, die von der bereits abzusehenden Promotion von S. Grosman noch ergänzt wird.

Natürlich gibt es noch offene Fragen. Nach der ersten Arbeit von Gerd Kunert zu anisotropen Fehlerschätzern beim Stokes-Problem sollen weitere Systeme partieller Differentialgleichungen angegangen werden. Dabei ist zunächst an ein singular gestörtes System von zwei partiellen Differentialgleichungen gedacht, von denen eine 2. Ordnung und eine 4. Ordnung ist. Dazu wird Th. Apel einen DFG-Einzelantrag stellen, wobei S. Grosman als Bearbeiter vorgesehen ist.

Interessant ist auch die Erweiterung der Fehlerschätzer für die Navier-Stokes-Gleichungen, da dort ebenfalls anisotrope Randschichten entstehen können. Bei beiden Systemen könnte jedoch die bisherige Herangehensweise an ihre Grenzen stoßen, so dass alternative Methoden untersucht werden sollten.

Weiterhin muss die numerische Validierung der Fehlerschätzer weitergeführt werden, um den Einfluss der Alignment Measures zu belegen.