

Teilprojekt

**A7**

Gebietsadaptierte Wavelets und parallele  
Multiskalenmethoden für Randintegraloperatoren



## 2.1 Teilprojekt A7

Gebietsadaptierte Wavelets und parallele Multiskalenmethoden für Randintegraloperatoren

### 2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Reinhold Schneider  
20.03.1957  
Professur Scientific Computing  
Universität Kiel  
Christian-Albrechts-Platz 4  
24118 Kiel  
Tel.: (0431) 880-7470  
Fax: (0431) 880-4464  
rs@numerik.uni-kiel.de

Prof. Dr. Guido Brunnett  
22.12.1959  
Professur Grafische Datenverarbeitung  
Fakultät für Informatik  
Technische Universität Chemnitz  
09107 Chemnitz  
Tel.: (0371) 531-1533  
Fax: (0371) 531-1801  
guido.brunnett@informatik.tu-chemnitz.de

### 2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Helmut Harbrecht, Fakultät für Mathematik, Technische Universität Chemnitz

Dr. Marek Vanco, Fakultät für Informatik, Technische Universität Chemnitz

Dipl.-Math. Ulf Kähler, Fakultät für Mathematik, Technische Universität Chemnitz

Dipl.-Math. Maharavo Randrianarivony, Fakultät für Informatik, Technische Universität Chemnitz

## 2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Eine Reihe praxisrelevanter Randwertprobleme, wie beispielsweise Außenraumprobleme der Akustik und der Elektrostatik, sowie Randwertprobleme der Elastizitätstheorie und der Strömungsmechanik, lassen sich mittels Randintegralgleichungsmethoden bzw. durch Kombination von Finite-Element- und Randintegralgleichungsmethoden vorteilhaft behandeln. Solche Randintegralmethoden führen jedoch üblicherweise auf vollbesetzte Matrizen. Die Behandlung vollbesetzter großdimensionierter Gleichungssysteme verbietet sich naturgemäß wegen des enormen Bedarfs an Speicherplatz und Rechenzeit. Moderne Ansätze wie das *Panel-Clustering-Verfahren* [HN], die *schnelle Multipolentwicklung* [GR], oder zu diesen verwandte Verfahren wie  *$\mathcal{H}$ -Matrizen* [HK] oder die *Adaptive Cross Approximation* [BR], versprechen einen Ausweg aus dieser Situation. Ein weiterer Zugang sind *Multiskalen- oder Waveletapproximationsmethoden* [BCR, S], welche auf der Verwendung von Multiskalenbasen oder biorthogonalen Waveletbasen zur

Diskretisierung der Integralgleichungen beruhen. Die dadurch entstehenden Systemmatrizen sind quasi-dünnbesetzt, d.h. sie lassen sich ohne Verlust an Genauigkeit durch dünnbesetzte Matrizen ersetzen. Zudem können sie leicht mittels Diagonalskalierung vorkonditioniert werden [DKU].

Die Aufgabenstellung dieses Teilprojektes bestand darin, Wavelet-Galerkin-Verfahren dahingehend weiterzuentwickeln, dass sie sich zur Lösung von Randintegralgleichungen auf komplexen Oberflächen eignen. Dabei sollten sowohl Oberflächen, die aus stückweise glatten Teilflächen bestehen, als auch polygonal approximierte Flächen betrachtet werden. In der letzteren Situation sollte die Wavelet-Konstruktion nach Tausch/White zum Einsatz kommen.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

### 2.3.1 Weiterentwicklung des Wavelet-Galerkin-Verfahrens für stückweise glatte Oberflächen

Für die Anwendung der Wavelet-Matrixkompression nach Schneider auf Probleme mit komplexen Geometrien war es notwendig, die zum Antragszeitpunkt vorhandenen Methoden in verschiedener Hinsicht weiterzuentwickeln. Dabei wurden insbesondere die folgenden Fragestellungen betrachtet:

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

### 2.3.2 Vorverarbeitung der Geometriedaten

Sollen Integralgleichungen auf realistischen Geometrien gelöst werden, so ist davon auszugehen, dass das geometrische Modell unter Einsatz eines kommerziellen Modellierungswerkzeuges (CAD-System) erstellt wurde und der Export in das System zur Lösung der Integralgleichung (Solver) über ein normiertes Austauschformat erfolgt. Die zentrale Aufgabe bestand in der Realisierung von Softwareprozeduren, die diesen Datentransfer automatisieren und dafür sorgen, dass die exportierten Daten vom Solver auch tatsächlich verarbeitet werden können. Für diese Arbeiten wurde das weitverbreitete Austauschformat IGES (Initial Graphics Exchange Specification) ausgewählt.

Weitere für die Geometrieverarbeitung benötigte Funktionen betreffen die geeignete Diskretisierung der Flächenstücke, die Flächenanpassung an diskrete Daten sowie die Segmentierung der Oberfläche etwa an scharfen Kanten.

### 2.3.3 Ein Wavelet-Galerkin-Verfahren für polygonale Oberflächen

Verfeinerungsstrategien, wie sie sonst zur Konstruktion von Wavelets verwendet werden, lassen sich auf polygonal approximierten Oberflächen nicht anwenden. Stattdessen kann man durch Vergrößerungsstrategien ebenfalls eine Hierarchie verschiedener Skalen schaffen. In [TAW] wurde eine konkrete Konstruktion angegeben, die die Problematik in beinahe idealer Art und Weise löst. Diese Konstruktion kann auf eine weitgehend beliebig gegebene Diskretisierung angewandt werden und liefert Basisfunktionen mit verschwindenden Multipolmomenten, bzw. solche, die orthogonal auf Polynomen im Raum stehen.

Das Ziel bestand darin, diese Wavelets zu konstruieren und sie als Grundlage für ein Galerkin-Verfahren basierend auf der *Standardform* zu verwenden. Die entstehende Systemmatrix wurde vom Antragsteller R. SCHNEIDER bereits eingehend untersucht [DPS2, DPS3, PS1, S]. Diese Matrix ist im Gegensatz zu den in der Regel vollbesetzten Systemmatrizen von traditionellen Einskalen-Galerkin-Verfahren quasi-dünnbesetzt. Dies bedeutet, dass sie mittels der sogenannten Matrixkompression auf eine dünnbesetzte Matrix komprimiert werden kann, ohne dass es zu Verlusten bei Stabilität oder Konvergenz kommt. Da die benötigten Koeffizienten a-priori bekannt sind, müssen nur die nichtverschwindenden Einträge der Systemmatrix berechnet werden. Das Aufstellen der komprimierten Systemmatrix ist jedoch keineswegs einfach zu bewerkstelligen. Daher war ein großer Teil der Arbeit dem möglichst schnellen und effektiven Berechnen der Systemmatrix gewidmet. Die Fragen der Konvergenz des komprimierten Verfahrens, der Vorkonditionierung, sowie entsprechender Abschätzungen (Approximationseigenschaft und inverse Ungleichung), wie sie für biorthogonale Waveletbasen bekannt und grundlegend sind [D, S], bedurften für diese neuartigen Basisfunktionen ebenfalls noch einer genaueren Untersuchung.

### Literaturverzeichnis

- [BCR] G. Beylkin, R. Coifman, and V. Rokhlin. The fast wavelet transform and numerical algorithms. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 44:141–183, 1991.
- [BR] M. Bebendorf and S. Rjasanow. Adaptive low-rank approximation of collocation matrices. *Computing*, 70, No.1, 1–24, 2003.
- [CDD1] A. Cohen, W. Dahmen, and R. DeVore. *Adaptive Wavelet Methods for Elliptic Operator Equations – Convergence Rates*, Math. Comp. **70**, 27–75 (2001).
- [CDD2] A. Cohen, W. Dahmen, and R. DeVore. *Adaptive Wavelet Methods II – Beyond the Elliptic Case.*, Found. Comput. Math. **2**, 203–245 (2002).
- [D] A. COHEN, I. DAUBECHIES, J.-C. FEAUVEAU, Biorthogonal bases of compactly supported wavelets, *Pure Appl. Math.*, 45:485–560, 1992.
- [DKU] W. DAHMEN, A. KUNOTH, AND K. URBAN, Biorthogonal spline-wavelets on the interval – stability and moment conditions, *Appl. Comp. Harm. Anal.*, 6:259–302, 1999.
- [DPS2] W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, Wavelet approximation methods for periodic pseudodifferential equations. Part 2 - Fast solution and matrix compression, *Advances in Computational Mathematics*, **1**, 259–335, (1993).

- [DPS3] W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, Multiscale methods for pseudo-differential equations on smooth manifolds, in: *Proceedings of the International Conference on Wavelets: Theory, Algorithms, and Applications*, C.K. Chui, L. Montefusco, L. Puccio (eds.), *Wavelet Analysis and Applications*, **5**, Academic Press, 385–424, (1994).
- [GR] L. GREENGARD AND V. ROKHLIN, A fast algorithm for particle simulation, *J. Comput. Phys.*, 73:325–348, 1987.
- [H] H. HARBRECHT, *Wavelet-Galerkin-Schemes for boundary integral equations in three Dimensions*, Dissertation, Technische Universität Chemnitz (2001).
- [HK] W. HACKBUSCH AND B.N. KHOROMSKIJ, A sparse  $\mathcal{H}$ -matrix arithmetic, II: Application to multi-dimensional problems, *Computing*, 64:21–47, 2000.
- [HN] W. HACKBUSCH AND Z.P. NOWAK, On the fast matrix multiplication in the boundary element method by panel clustering, *Numer. Math.*, 54:463–491, 1989.
- [PS1] T. VON PETERSDORFF, C. SCHWAB, Wavelet approximation of first kind integral equations in a polygon, *Numer. Math.*, **74**, 479–516, (1996).
- [S] R. SCHNEIDER, Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme, Habilitationsschrift, TH Darmstadt, (1995), *Advances in Numerical Mathematics*, Teubner Stuttgart, (1998).
- [TAW] J. TAUSCH, J. WHITE, Multiscale bases for the sparse representation of boundary integral operators on complex geometries, *SIAM J. Sci. Comput.*, 24:1610–1629, 2003.

## 2.4 Ergebnisse

### 2.4.1 Weiterentwicklung des Wavelet-Galerkin-Verfahrens für stückweise glatte Oberflächen

Die durchgeführten Arbeiten zur Thematik von Waveletbasen auf Oberflächen haben dazu geführt, dass deren Konstruktion im Wesentlichen verstanden und realisiert ist. Unsere Erfahrung zeigt, dass Wavelets mit möglichst kleinem Träger auf die besten Kompressionsergebnisse führen und die Performance des Wavelet-Galerkin-Verfahrens erheblich verbessern. Gegenüber ersten Ansätzen sind gerade hier große Fortschritte erzielt worden: die (vereinfachten) Tensorproduktwavelets vom Typ II und III können durch ein wesentlich kleineres Wavelet (optimiertes Wavelet vom Typ II) ersetzt werden ohne die Multiskalenräume zu verändern, vergleiche Abbildung 2.1. Für weitere Details und Vergleichsrechnungen sei auf [HS3] verwiesen.

Die a-priori Kompressionstrategie, die in [S] entwickelt wurde, ist durch eine zusätzliche a-posteriori Kompressionstrategie ergänzt worden [DHS]. Wie numerische Ergebnisse belegen [DHS, HS1, HS4], verbessert diese die Wavelet-Matrixkompression zusätzlich um einen Faktor 2–4. Um die Effizienz des Verfahrens kurz darzustellen, führen wir beispielhaft die numerischen Ergebnisse für die Einfachschichtgleichung des Laplace [DHS]

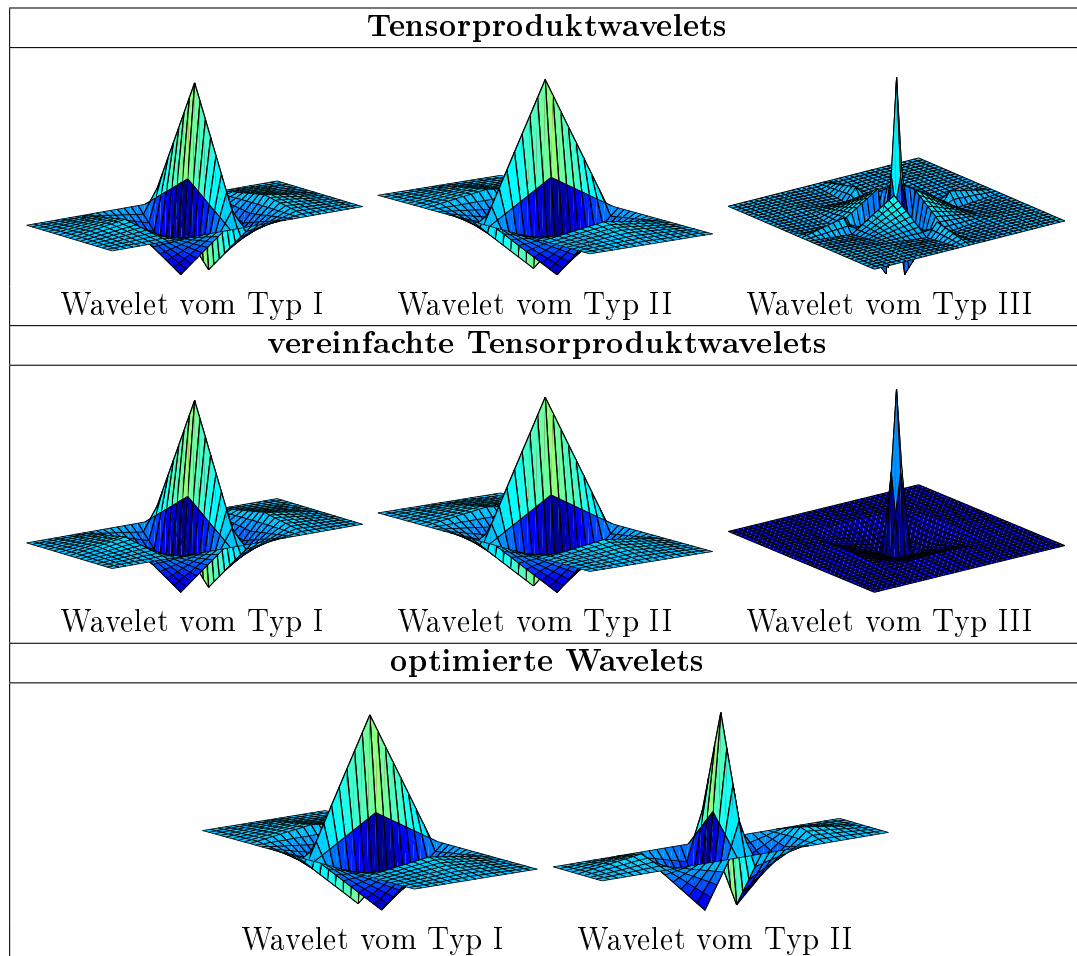


Abb. 2.1: Übersicht zur Konstruktionen der stückweise bilinearen Wavelets mit vier verschwindenden Momenten.

kurz auf: Auf einer Kugel (parametrisiert via 6 Patches) bzw. einer Kurbelwelle (parametrisiert via 142 Patches, vergleiche auch Abbildung 2.3) sind pro Zeile im Durchschnitt nur 254 bzw. 406 Einträge a-priori relevant. A-posteriori reduziert sich deren Zahl sogar auf 130 bzw. 139 relevante Einträge, ohne die Genauigkeit des Galerkin Verfahrens zu beeinträchtigen. Diese Ergebnisse wurden erzielt im Falle von 1.6 bzw. 2.3 Mio. Unbekannten. Abbildung 2.2 visualisiert zusätzlich in beiden genannten Fällen das asymptotische Verhalten der Kompressionsstrategie. Uns ist bislang kein Verfahren bekannt, das bei Randintegralgleichungen hinsichtlich der Kompression eine vergleichbare Datenreduktion bietet.

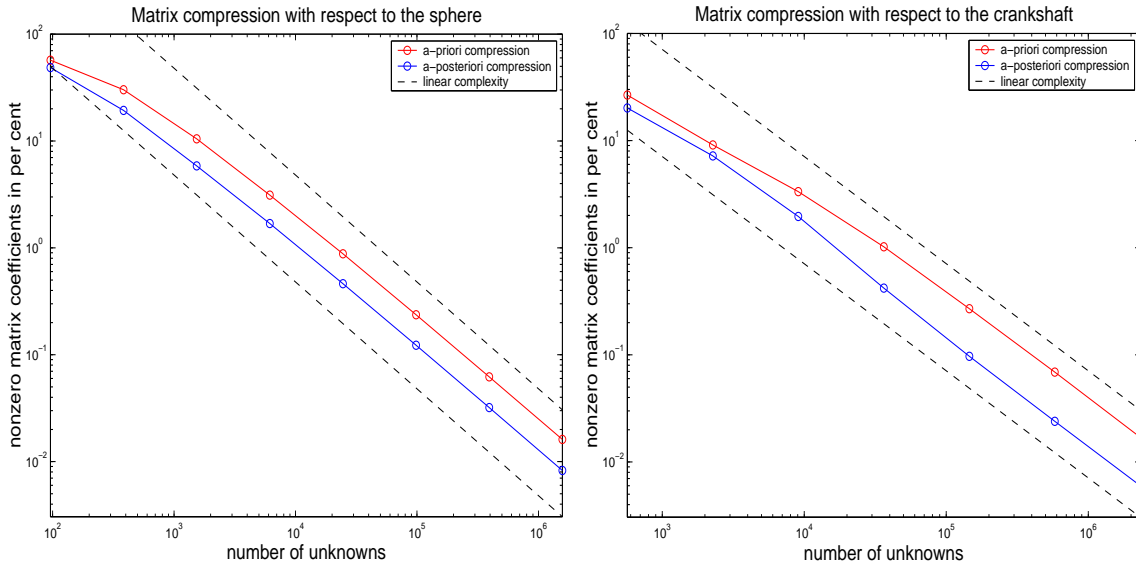


Abb. 2.2: Kompressionsraten bezüglich der Einheitssphäre und einer Kurbelwelle.

Der größte Anteil an Rechenzeit wird nach wie vor zur Berechnung der relevanten Matrixeinträge benötigt, das heißt für die numerische Quadratur. Zwar ist es inzwischen verstanden, dass theoretisch jede exponentiell konvergente  $hp$ -Quadratur auf eine insgesamt lineare Komplexität führt, jedoch wird in unseren Beispielen diese Asymptotik noch nicht erreicht. Hinsichtlich der Berechnung der Matrixkoeffizienten sehen wir noch Verbesserungsbedarf. Die aktuelle Realisierung basiert auf Tensorprodukt-Gauß-Legendre-Quadraturformeln kombiniert mit dem Duffy-Trick für die auftretenden singulären Integrale [DHS, HS5]. Die in [BBDMK] untersuchten Alternativen scheinen allerdings keinen großen Leistungssprung zu ermöglichen. Es sei allerdings auch angemerkt, dass wir seit den ersten Ergebnissen in [S] bis heute unser Verfahren durch algorithmische und mathematische Verbesserungen (die verbesserte Rechentechnik ist hierbei ausgeklammert) um einen Faktor 40–50 beschleunigt haben.

Die Vorkonditionierung der Systemmatrizen von Operatoren positiver oder negativer Ordnung ist mit Wavelets aufgrund der Normäquivalenzen einfach durch eine Diagonalskalierung durchführbar. Eine Verbesserung dieser zwar asymptotisch optimalen, praktisch aber oftmals unzufriedenstellenden Vorkonditionierung ist in [HS4] vorgeschlagen worden. Es darf an dieser Stelle auch auf [BSS] hingewiesen werden, in dem vermittelt Waveletbasen sogar degenerierte elliptische Operatoren erfolgreich vorkonditioniert



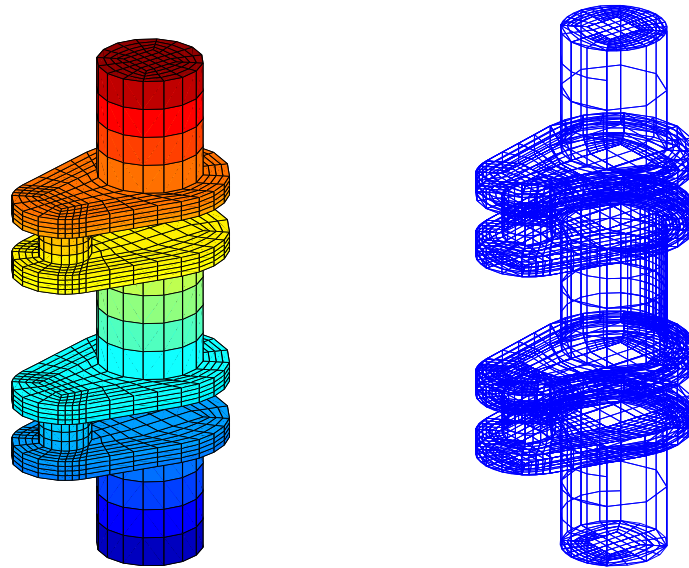


Abb. 2.3: Parametrische Darstellung der Kurbelwelle und adaptive Netzverfeinerung.

worden sind. Mit Hilfe der Normäquivalenzen konnte auch ein modifiziertes Verfahren zur Regularisierung schlecht gestellter oder inverser Probleme entwickelt werden. Hierzu muss die Regularität der Lösung a-priori nicht bekannt sein. Eine quasi-optimale Lösung kann durch eine Selbstregularisierung für Operatoren negativer Ordnung gefunden werden [HPS]. Zur effizienten Berechnung kann ein Wavelet-Matrixkompressionsverfahren vorteilhaft angewendet werden.

Erste Fortschritte bei der Umsetzung eines adaptiven Wavelet-Galerkin-Verfahrens wurden in [HS2, HS4] erzielt. Im Vergleich zum nichtadaptiven Verfahren wird bei weitaus geringerem Aufwand die gleiche Genauigkeit erzielt. Allerdings benötigt der Konvergenzbeweis bisher noch die Saturationsannahme und die Optimalität des Verfahrens ist nicht sichergestellt. An einer Einarbeitung der neueren Entwicklungen von [CDD1, CDD2] wird derzeit gearbeitet. Eine adaptive Netzverfeinerung bezüglich der Kurbelwelle ist in Abbildung 2.3 (rechts) dargestellt.

Erwähnenswert ist ebenfalls die (Least-Squares-) Kopplung von Finiten Elementen und Wavelet-Randelementen, die theoretisch grundlegend untersucht und zumindest in 2D auch realisiert worden ist [HPPS1, HPPS2, GHS]. Eine Realisierung in 3D ist langfristig geplant.

Erfolgreich wird das vorliegende Wavelet-Galerkin-Verfahren zur Shape-Optimierung angewandt [EH1, EH2, EH3, EH4, EH5], bei der zur Gradienten- und Hessiansberechnung Dirichlet- oder Neumann-Daten und für Verfahren zweiter Ordnung sogar noch höhere Ableitungen der Zustandsgleichung effizient berechnet werden müssen.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Multiskalendiskretisierung von 2D und 3D Randwertproblemen durchgeführt wurde. Die Ergebnisse spiegeln die theoretischen Resultate wider und zeigen, dass für stückweise parametrische Geometriedarstellungen mit bis zu 1000 einzelnen Patches ein sehr leistungsfähiges Wavelet-Galerkin-Verfahren entstanden ist, das eine wesentliche Einsparung an Speicherplatz und Rechenzeit erbringt.

## 2.4.2 Vorverarbeitung der Geometriedaten

Die zentrale Aufgabe der Geometrievorverarbeitung besteht darin, eine im IGES-Format spezifizierte Oberflächenbeschreibung so aufzubereiten, dass das System zur Lösung der Integralgleichung (Solver) auf die Flächenelemente direkt zugreifen kann. Nach der Analyse der Struktur eines IGES-Files wurden Routinen erstellt, die aus einem beliebigen IGES-File die relevanten Daten extrahieren (Anzahl und Art der vorhandenen Flächenstücke und ihre Randkurven, spezifizierende Daten der Parametrisierung) und dem Solver zuführen. Für alle 30 Elemente der Entity Class „Curve and Surface Geometry“ wurden Auswertungsprozeduren erzeugt, die für einen Punkt im Parametergebiet der Fläche (Kurve) den zugehörigen Flächenpunkt (Kurvenpunkt) und die zugehörigen Ableitungen zurückliefern (Beispiel: de-Boor-Algorithmus für B-Spline-Flächen). Damit kann der Solver die durch IGES spezifizierte Geometrie grundsätzlich in vollem Umfang verarbeiten.

Eine besondere Schwierigkeit bei der Realisierung dieser Arbeit stellte die Behandlung der „Trimmed Surface Entity“ (Entity Type 144) dar. Bei einer getrimmten Fläche handelt es sich um eine beliebige Flächenparametrisierung über einem Standardparametergebiet, wobei durch Angabe geschlossener Kurven innerhalb des Parametergebietes gewisse Bereiche als „ungültig“ erklärt sind. Die IGES-Spezifikation erlaubt eine beliebige Anzahl derartiger Begrenzungskurven unter der Voraussetzung, dass sie keine Doppelpunkte besitzen, sich gegenseitig nicht schneiden und ihr Inneres paarweise disjunkt ist. In CAD Konstruktionen kommen getrimmte Flächen als Resultat von Flächenverschneidungen oder Blendingoperationen sehr häufig vor.

Da die Waveletkonstruktion von Schneider das Vorliegen des Standardparametergebietes  $[0, 1]^2$  annimmt, ist es notwendig, das Parametergebiet einer getrimmten Fläche in Teile zu zerlegen, die sich diffeomorph auf das Einheitsquadrat abbilden lassen. Das von uns entwickelte Verfahren vollzieht sich in einer Zerlegungs- und einer Konstruktionsphase [RBS].

In der Zerlegungsphase werden die Randkurven des Parametergebietes zunächst diskretisiert. Das dadurch entstandene mehrfach zusammenhängende Polygon wird dann in mehreren Schritten zunächst in eine Menge von einfach zusammenhängenden Polygonen, dann in eine Menge konvexer Polygone und schließlich in eine Menge vierseitiger Polygone zerlegt. Dabei ist darauf zu achten, dass die Zerlegung so erfolgt, dass die nachfolgende Ersetzung der Polygonseiten durch die entsprechenden Abschnitte der ursprünglichen gekrümmten Kurven in korrekter Weise möglich wird.

In der Konstruktionsphase wird mit Hilfe eines transfiniten Interpolationsschemas für jedes vierseitige Teilgebiet (mit gekrümmten Randkurven) ein Diffeomorphismus auf das Einheitsquadrat generiert. Dabei ist es unter Umständen notwendig, das vierseitige Teilgebiet weiter zu zerlegen, um zu garantieren, dass die erzeugte Abbildung tatsächlich ein Diffeomorphismus ist. Für den wichtigen Spezialfall von Randkurven, die in Bezierdarstellung gegeben sind, wurden zu diesem Zweck notwendige und hinreichende Bedingungen für die zulässige Lage der Bezierpunkte abgeleitet [RaB5].

Zu den benötigten Funktionen der Geometrieverarbeitung gehört darüber hinaus ein Werkzeug zur Diskretisierung der Oberflächen. In [RaB1] berichteten wir über die Ent-

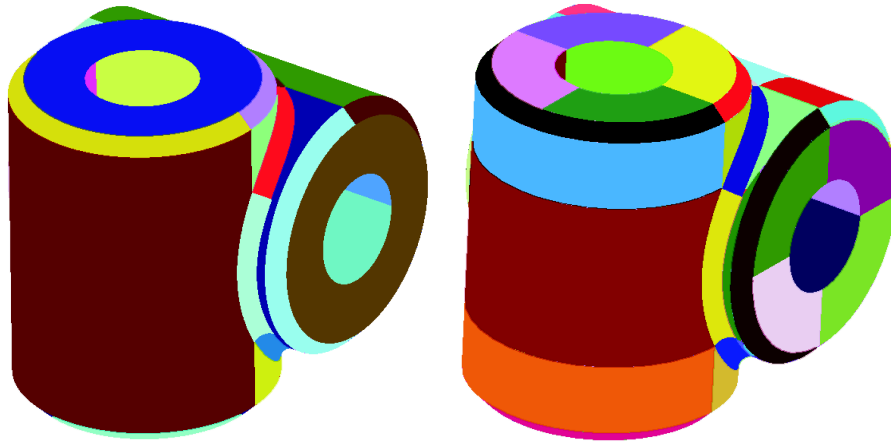


Abb. 2.4: Zerlegung in vierseitige Teilgebiete

wicklung einer derartigen Funktion, die für beliebige im IGES-Format spezifizierte Flächenverbände ein konsistentes Dreiecksnetz mit Fehlerkontrolle erzeugt. Hierbei wird zunächst jede Teilfläche unter Einsatz der Delaunay-Triangulierung in Dreiecke zerlegt. Jedes dieser Ausgangsnetze wird anschließend unter Einsatz einer lokalen Fehlerfunktion verfeinert. Im abschließenden Schritt werden die einzelnen Netze zu einem konsistenten Netz verschmolzen.

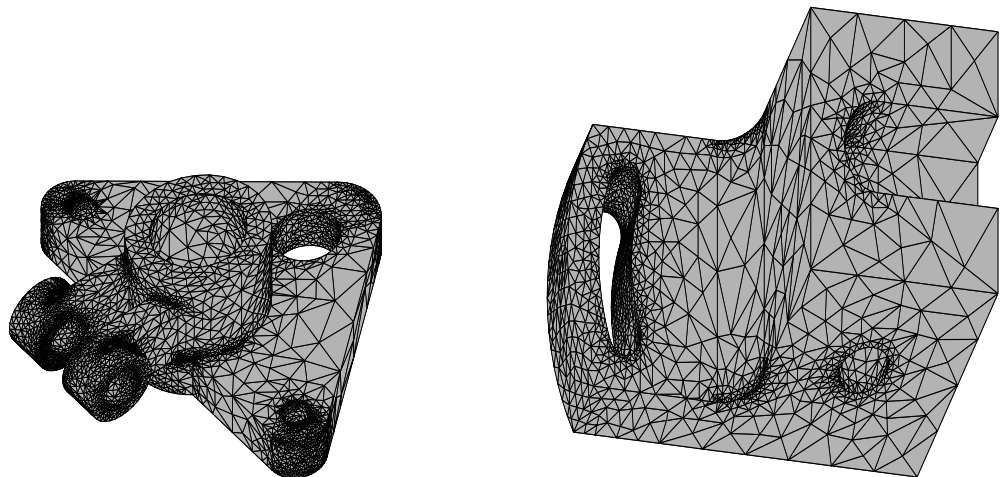


Abb. 2.5: Automatische Netzgenerierung für Oberflächen

Für sehr komplexe Modelle wird eine akzeptable Laufzeit des Verfahrens zur Lösung der Integralgleichung nur durch eine Simplifizierung der Oberflächenbeschreibung zu erzielen sein. Eine derartige Vereinfachung wird auf der Anpassung von Flächenstücken an diskrete Daten, die von der Oberfläche der Originalgeometrie gewonnen wurden, basieren. Es wurde deshalb ein Verfahren zur Anpassung von NURBS-Flächen an diskrete Daten realisiert, bei dem die Knoten der Splinedarstellung als freie Parameter betrachtet

werden [RaB2]. Aufgrund des hohen Bedarfs an Rechenzeit wurde in [RaB3, RaB4] eine parallele Implementierung dieser Methode mit Lastbalancierung vorgestellt.

Besitzt das zu approximierende Objekt scharfe Kanten, so ist es notwendig den Verlauf dieser Kanten zu detektieren, bevor eine Flächenanpassung durchgeführt werden kann. Hierzu wurde in [RaBr] ein Verfahren vorgestellt, das unter Einsatz von Waveletfunktionen Kantenverläufe in diskreten Daten detektiert.

### 2.4.3 Ein Wavelet-Galerkin-Verfahren für polygonale Oberflächen

Ausgangspunkt der Betrachtungen ist die Geometrie, gegeben als stückweise linear approximierte Oberfläche. Sowohl zur Konstruktion der Wavelets als auch zur Umsetzung des Konzeptes hierarchischer Matrizen und der Multipol-Methode wird eine hierarchische Unterteilung der polygonal gegebenen Oberfläche benötigt, der so genannte Clusterbaum. Zur Generierung des Clusterbaums wurde sowohl eine hierarchische räumliche Unterteilung als auch eine weitere Strategie realisiert, die auf der Zusammenfassung benachbarter Elemente in den Knoten des Baums beruht.

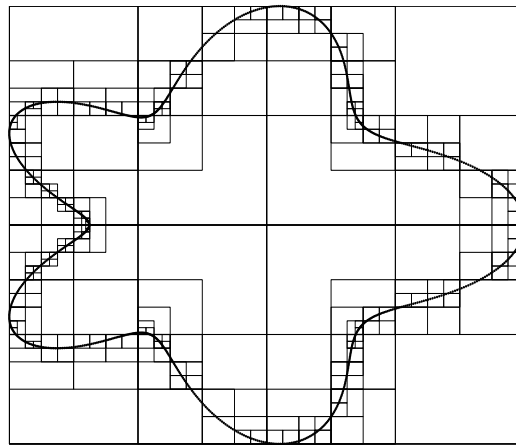


Abb. 2.6: Hierarchische Unterteilung des 'Orbitals'

Basierend auf der hierarchischen Unterteilung (Abbildung 2.6) lassen sich die Wavelets nach J. TAUSCH UND J. WHITE [TAW], die orthogonal auf den Spuren von Polynomen im Raum stehen, rekursiv aus stückweise konstanten bzw. stückweise linearen Ansatzfunktionen erzeugen. Bei dieser Vergrößerungsstrategie entstehen in jedem Rekursionsschritt Waveletfunktionen sowie Skalierungsfunktionen (Abbildung 2.7), die zur Erzeugung von Wavelets auf dem größeren Level weiterverwendet werden.

Die jeweiligen Multiwavelets spalten sich dabei erst durch die Singulärwertzerlegung lokaler Momentenmatrizen ab. Dieses Prinzip wurde in der Diplomarbeit von T. WEBER [Webe] durch Verwendung von einfachen QR-Zerlegungen verbessert, da die neuen Waveletfunktionen sogar eine ansteigende Anzahl von verschwindenden Multipolmomenten besitzen.

Die so entstandene Multiwaveletbasis (Abbildung 2.8) wurde als Grundlage für ein Galerkin-Verfahren verwendet. Stellvertretend für verschiedene Randintegralgleichungen rea-

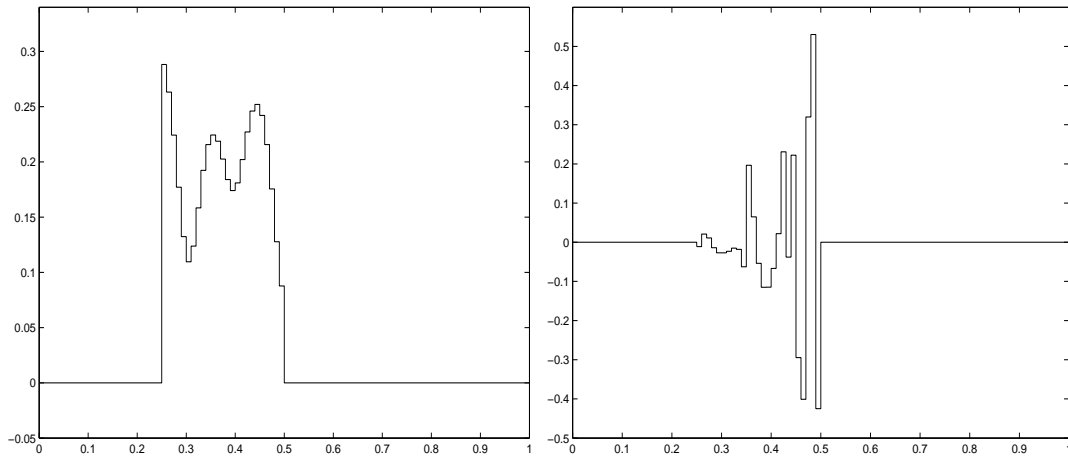


Abb. 2.7: Skalierungs- (links) und Waveletfunktion (rechts) für das in Abbildung 2.6 dargestellte Orbital

lisierte U. KÄHLER [Käh] das Wavelet-Galerkin-Verfahren für die indirekte Formulierung zur Lösung der Laplace-Gleichung. Dazu wurden das Einfachschicht- und das Doppelschichtpotential in 2 Raumdimensionen umgesetzt.

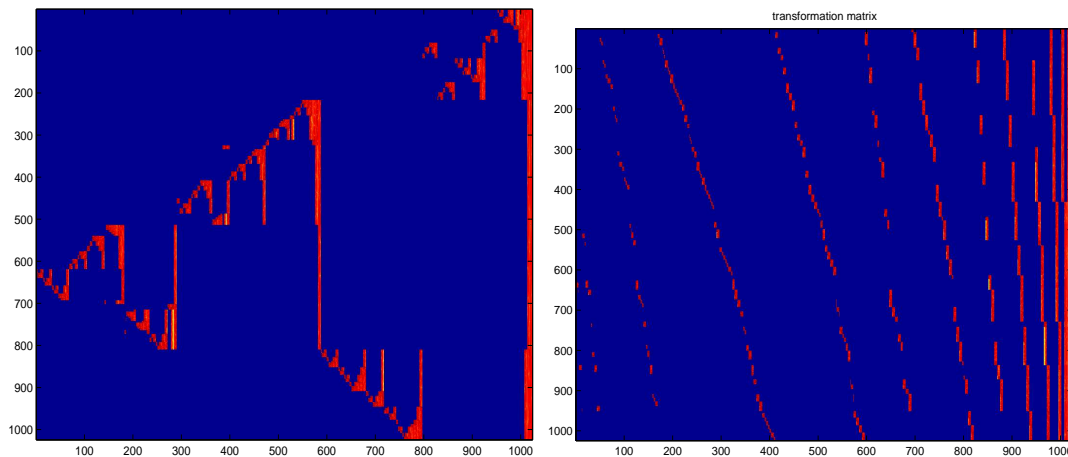


Abb. 2.8: Koeffizientenmatrix der Wavelets in rekursiver (links) bzw. nach Leveln geordneter Struktur (rechts)

Dabei werden mittels der a-priori-Kompression [HS4] die zu berechnenden Einträge der Systemmatrix bestimmt und anschließend mit Hilfe einer Reihenentwicklung analog zur Fast-Multipole-Methode berechnet. Zur effizienten Bestimmung der benötigten Polynomgrade dieser Reihen wurde ein a-posteriori-Fehlerkriterium verwendet, das H. HARBRECHT in seiner Dissertation [H] entwickelt hat. Es ist zu beachten, dass im Gegensatz zu anderen schnellen Verfahren die Systemmatrix explizit aufgestellt wird (Abbildung 2.9). Sie benötigt jedoch durch ihre dünnbesetzte Struktur (Abbildung 2.10) bei weitem nicht den Speicherplatz der Systemmatrix eines klassischen Einskalen-Verfahrens.

Die für dieses Verfahren notwendigen Untersuchungen der verwendeten Wavelets hin-

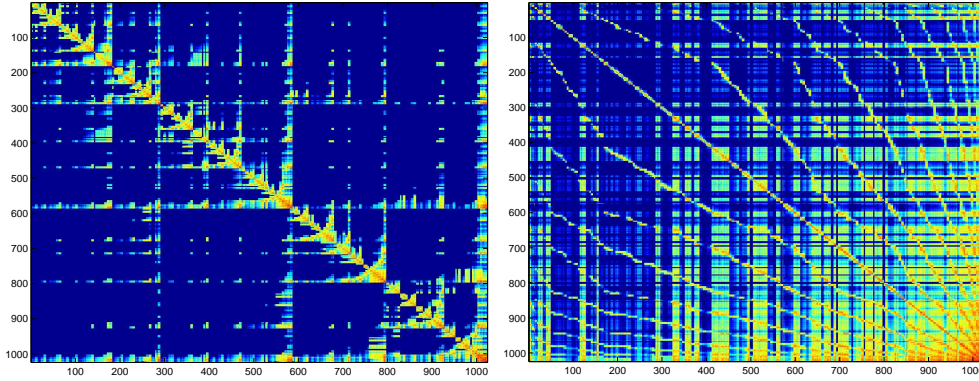


Abb. 2.9: Systemmatrix des Wavelet-Galerkin-Schemas in rekursiver (links) bzw. Fingerstruktur (rechts)

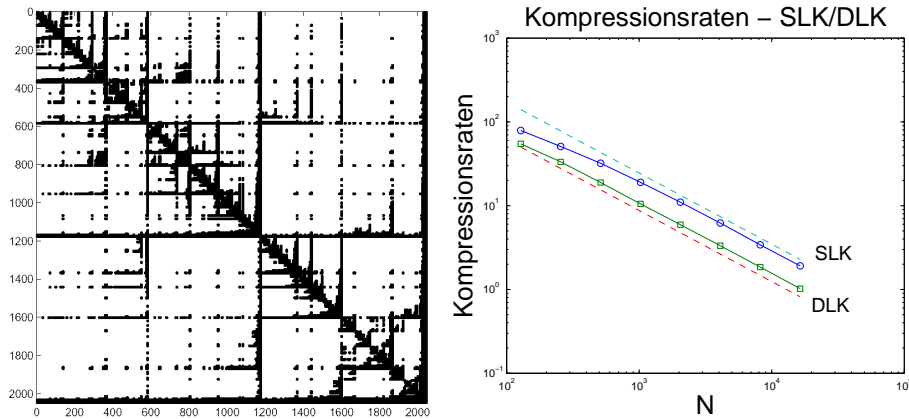


Abb. 2.10: Verteilung der nichtverschwindenden Einträge innerhalb der Systemmatrix (links) und die zugehörigen Kompressionsraten bzgl. des Einfachschicht- und des Doppelschichtpotentials (rechts)

sichtlich der Approximationseigenschaft und der inversen Ungleichung wurde in [HKS2] für beliebig viele Raumdimensionen durchgeführt. Es konnten hier aber auch die in [Käh] gemachten Aufwandsabschätzungen auf den allgemeinen  $n$ -dimensionalen Fall ausgeweitet werden.

Da zur Bestimmung der Systemmatrixeinträge bereits Teile des Fast-Multipole-Verfahrens verwendet wurden, war es naheliegend das Wavelet-Verfahren mit dem klassischen Einskalen-Verfahren und dem Multipol-Verfahren zu vergleichen. Die numerischen Ergebnisse zeigen die Konkurrenzfähigkeit des Wavelet-Galerkin-Verfahrens mit anderen schnellen Verfahren und lassen die Nach- und Vorteile des Verfahrens erkennen.

In Abbildung 2.11 erkennt man die asymptotische Unterlegenheit des klassischen Einskalen-Verfahrens gegenüber den anderen beiden Verfahren. Die Abbildung zeigt aber auch, dass das Wavelet-Verfahren in der gegenwärtigen Implementierung noch etwa um den Faktor drei langsamer ist als das Fast-Multipole-Verfahren. Die Ursache dafür liegt in der Verwendung der Multipole-Methode innerhalb des Wavelet-Verfahrens. Abbil-

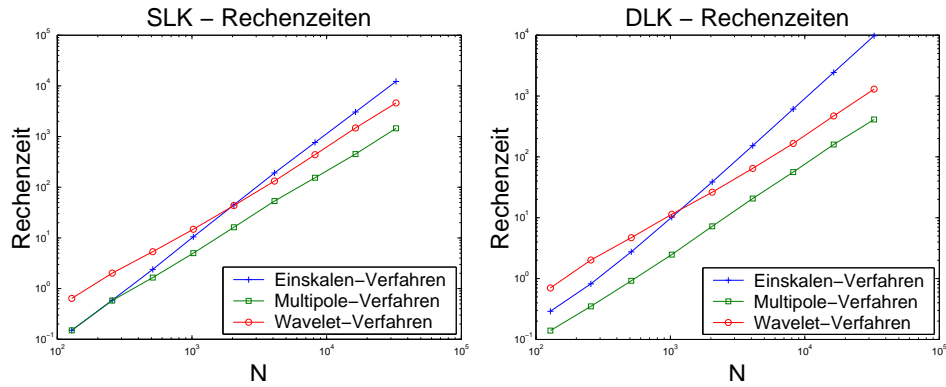


Abb. 2.11: Vergleich der Rechenzeiten des klassischen Eiskalen-Verfahrens, des Multipol-Verfahrens und des Wavelet-Galerkin-Verfahrens für das Einfachschicht- (links) bzw. Doppelschichtpotential (rechts)

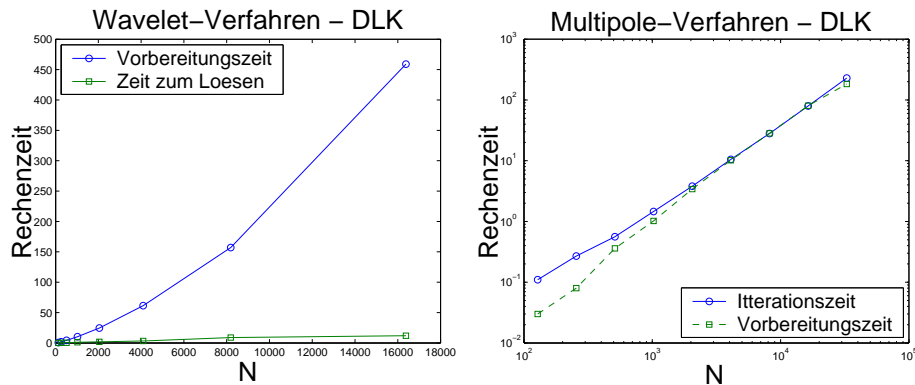


Abb. 2.12: Vergleich der Rechenzeiten zum Aufstellen der Systemmatrix und des anschließenden Lösen des entstandenen Gleichungssystems im Fall des Wavelet-Galerkin-Verfahrens (links) und Vergleich der Vorbereitungs- und der Iterationsphase im Fall der Fast-Multipole-Methode (rechts) für das Doppelschichtpotential

Abb. 2.12 illustriert die Vorteile des Wavelet-Galerkin-Verfahrens im Hinblick auf das Lösen von Randintegralgleichungen mit verschiedenen rechten Seiten. Da beim Wavelet-Verfahren für jede neue rechte Seite nur ein dünnbesetztes Gleichungssystem gelöst werden muss, ist der Mehraufwand verschwindend gering. Beim Multipol-Verfahren wird dagegen, ähnlich wie bei anderen schnellen Verfahren, für jede neue rechte Seite die Iterationsphase erneut durchlaufen. Hierbei ist zusätzlich zu beachten, dass beim Multipolverfahren die für die Iterationsphase benötigte Rechenzeit stark abhängig ist von der Konditionierung des Problems.

## Neuentstandene Literatur

- [BBDMK] A. BARINKA, T. BARSCH, S. DAHLKE, M. MOMMER, M. KONIK, *Quadrature formulas for refinable functions and wavelets, II. Error analysis*, J. Comput. Anal. Appl. **4**, 339–361, 2002.
- [BSS] S. BEUHLER, R. SCHNEIDER, C. SCHWAB, *Multiresolution weighted norm equivalences and applications*, Preprint SFB393/02-09, TU Chemnitz, 2002 (erscheint in Num. Math.).
- [DHS] W. DAHMEN, H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Compression Techniques for Boundary Integral Equations – Optimal Complexity Estimates*, Preprint SFB393/02-06, TU Chemnitz, 2002 (eingereicht bei SINUM).
- [EH1] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *Numerical Solution of Elliptic Shape Optimization Problems using wavelet-based BEM*, Optim. Methods Softw. **18**, No. 1, 105–123, 2003.
- [EH2] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *2nd Order Shape Optimization using Wavelet BEM*, Technical Report 06-2003, Preprint Series of the Institute of Mathematics, TU Berlin, 2003 (eingereicht bei Optim. Methods Softw.).
- [EH3] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *Exterior Electromagnetic Shaping using Wavelet BEM*, Technical Report 13-2003, Preprint Series of the Institute of Mathematics, TU Berlin, 2003 (eingereicht bei Math. Meth. Appl. Sci.).
- [EH4] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *Second order Lagrange multiplier approximation for constrained shape optimization problems*, Technical Report 35-2003, Preprint Series of the Institute of Mathematics, TU Berlin, 2003. (erscheint in Proceedings of 21. IFIP TC 7 Conference on system modeling and optimization).
- [EH5] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *Fast wavelet BEM for 3d electromagnetic shaping*, Bericht 03-9, Berichtsreihe des Mathematischen Seminars der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 2003, (erscheint bei Appl. Numer. Math.).
- [HKS] H. HARBRECHT, M. KONIK, R. SCHNEIDER, *Fully Discrete Wavelet Galerkin Schemes*, Engineering Analysis with Boundary Elements **27**, 423–437, 2003.
- [HKS2] H. HARBRECHT, U. KÄHLER, R. SCHNEIDER, *Wavelet Galerkin BEM on unstructured meshes*, Preprint SFB393/04-06, 2004.
- [HPPS1] H. HARBRECHT, F. PAIVA, C. PÉREZ, R. SCHNEIDER, *Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM*, Num. Math. **92**, 325–356, 2002.
- [HPPS2] H. HARBRECHT, F. PAIVA, C. PÉREZ, R. SCHNEIDER, *Multiscale preconditioning for the coupling of FEM-BEM*, Num. Lin. Alg. Appl. **10**, 197–222, 2003.
- [HPS] H. HARBRECHT, S. PEREVERZEV, R. SCHNEIDER, *Self-regularization by projection for noisy pseudodifferential equations of negative order*, Numer. Math. **95**, 123–143, 2003.
- [HS1] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Wavelets for the Fast Solution of Boundary Integral Equations*, Proceedings of the Fifth World Congress on Computational Mechanics (WCCM V), July 7-12, 2002, Vienna, Austria, Editors: Mang, H.A.; Rammerstorfer, F.G.; Eberhardsteiner, J., Publisher: Vienna University of Technology, Austria, (nichtreferierter Tagungsbeitrag).



- [HS2] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Adaptive Wavelet Galerkin BEM*, in *Computational Fluid and Solid Mechanics 2003*, vol. 2, edited by K.J. Bathe, Elsevier, 1982–1986, 2003.
- [HS3] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Biorthogonal wavelet bases for the boundary element method*, Preprint SFB393/03-10, TU Chemnitz, 2003 (erscheint in Mathematische Nachrichten).
- [HS4] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Wavelet based fast solution of boundary integral equations*, Preprint SFB393/03-07, TU Chemnitz, 2003 (erscheint in Proceedings of the International Conference on Abstract and Applied Analysis (ICAAA 2002)).
- [HS5] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Wavelet Galerkin Schemes for Boundary Integral Equations – Implementation and Quadrature*, Preprint SFB393/02-21, TU Chemnitz, 2002 (eingereicht bei SISC).
- [GHS] G.N. GATICA, H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Least squares methods for the coupling of FEM and BEM*, SINUM **41**, 1974–1995, 2003.
- [Käh] U. KÄHLER, *Waveletbasierte Matrixkompression für Randintegralgleichungen auf komplizierten Oberflächen*, Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2003.
- [RaBr] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *A multiresolution method for detecting higher order discontinuities from irregular noisy samples*, Proceeding Conference on curve and surface fitting, Saint-Malo, Nashboro Press, 333-342, ISBN: 0-9728482-1-5, 2003.
- [RaB1] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Generating well behaved meshes for parameterized surfaces*, Proceeding Conference on Geometric Modeling and Graphics, London, IEEE Computer Society, 56-61, ISBN: 0-7695-1985-7, 2000).
- [RaB2] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Approximation by NURBS curves with free Knots*, Proc. Vision, Modeling and Visualization 2002, Akademischer Verlagsgesellschaft, 195-201, ISBN: 3-89838-034-3, 2002.
- [RaB3] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Parallel implementation of curve reconstruction from noisy samples*, Preprint Sonderforschungsbereich 393, SFB393/02-15, 2002.
- [RaB4] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Parallel implementation of surface reconstruction from noisy samples*, Preprint Sonderforschungsbereich 393, SFB393/02-16, 2002.
- [RaB5] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Necessary and sufficient conditions for the regularity of a planar Coons map*, Preprint Sonderforschungsbereich 393, SFB393/04-07, 2004.
- [RBS] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, R. SCHNEIDER, *Constructing a diffeomorphism between a trimmed domain and the unit square*, Sonderforschungsbereich 393, Preprint SFB393/03-20, (2003), Eingereicht zur Veröffentlichung Conf. on Mathematical Methods for Curves and Surfaces, Tromsø, 2004.
- [Webe] T. WEBER, *Multiwavelet Packets*, Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2003.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

Ein augenblicklich aktives Forschungsfeld ist die Einarbeitung der Ideen und Entwicklungen von [CDD1, CDD2] in den bisher vorhandenen adaptiven Algorithmus für stückweise glatte Oberflächen. Realisiert werden soll ein effizienter adaptiver Algorithmus, der ohne Saturationsannahme mit optimaler Komplexität die beste  $n$ -Term Approximation an die Lösung einer Randintegralgleichung berechnet. Gerade hierfür ist die Beschreibung von Geometrien mit Hilfe von CAD-Programmen hilfreich und ermöglicht die Behandlung praxisrelevanter Probleme.

Aus dem Prinzip der separaten Verarbeitung der Teilflächen ergibt sich, dass die Anwendbarkeit des Verfahrens abhängig ist von der Anzahl gegebener Patches. Für sehr komplexe Modelle wird eine akzeptable Laufzeit des Verfahrens nur durch eine Simplifizierung der Oberflächenbeschreibung zu erzielen sein. Es ist deshalb geplant ein Clusterverfahren zu entwickeln, das abhängig von anwendungsrelevanten Parametern eine Reduzierung der Teilflächenanzahl durch Zusammenfassung von Patches durchführt.

Ferner wird an der Realisierung des Wavelet-Galerkin-Verfahrens zur Lösung weiterer Gleichungen gearbeitet, wie zum Beispiel der Helmholtz-Gleichung. Eine ebenfalls sehr interessante Aufgabenstellung ist die schnelle Lösung der Radiosity-Gleichung. Hierbei ist allerdings die effiziente Umsetzung der Sichtbarkeitsfunktion eine nichttriviale Aufgabe.

Der Ansatz von J. Tausch und J. White ist bisher nur für geschlossene Oberflächen formuliert worden. Deshalb soll das Verfahren so modifiziert werden, dass es für beliebige Flächenverbände einsetzbar wird. Aus der vorliegenden 2D-Implementierung des Verfahrens ist bekannt, dass eine Clusterbildung, die auf Zusammenfassung benachbarter Elemente beruht, der hierarchischen räumlichen Unterteilung überlegen ist. Deshalb soll als Alternative zur hierarchischen Raumunterteilung eine Clusterstrategie entwickelt werden, die das Prinzip der Zusammenfassung von Nachbarelementen auf die Oberflächensituation verallgemeinert.

Wir erwarten eine Reduzierung der Rechenzeit durch eine Berücksichtigung der verschwindenden Multipolmomente der Wavelets aus [Webe] bei der Reihenentwicklung der verwendeten Fast-Multipole-Methode. Durch diesen reduzierten Entwicklungsaufwand könnte das Wavelet-Verfahren im Falle dreier Raumdimensionen auch weniger Rechenzeit benötigen als das schon deutlich gründlicher erforschte Multipol-Verfahren. Im Anschluss an die sequentielle Realisierung des Tausch/White-Verfahrens in 3D ist die parallele Implementierung dieses Verfahrens vorgesehen.