Überblick

Dieses Buch behandelt die numerische Lösung elliptischer und parabolischer Systeme, während die numerische Lösung hyperbolischer Erhaltungsgleichungen nur angerissen wird. Der Schwerpunkt liegt auf der Herleitung *effizienter* Algorithmen, die *Adaptivität* bezüglich *Raum- und Zeitdiskretisierung* realisieren, wobei auch weitere Spielarten von Adaptivität hinzukommen. Bei der Darstellung der mathematischen Theorie wird besonderer Wert auf Einfachheit gelegt, was nicht heißen kann, um schwierigere Themen einen Bogen zu machen. Zur Erläuterung komplexer Sachverhalte haben wir zahlreiche Abbildungen eingefügt. Am Ende jedes Teilkapitels wird die Fortsetzung der jeweiligen Thematik angerissen und auf weiterführende Literatur hingewiesen. Wie in den beiden vorigen Bänden wird die historische Entwicklung mit eingeflochten. Am Ende jedes Kapitels sind Übungsaufgaben aufgeführt; Programmieraufgaben haben wir bewusst keine gestellt, weil sie zu eng mit der jeweiligen Software-Umgebung verbunden sind.

Das Buch enthält neun allgemein methodische Kapitel, einen Anhang zu theoretischem Hintergrundwissen und einen Softwarenachweis.

Die ersten beiden Kapitel führen in *Modelle* partieller Differentialgleichungen ein.

In **Kapitel 1** beginnen wir – zum Kennenlernen des Gebiets – mit einer Reihe von elementaren partiellen Differentialgleichungen. Zunächst stellen wir die Klassiker vor: Laplace- und Poisson-Gleichung unter Einschluss von Robin-Randbedingungen, die sich auch als roter Faden durch das Buch ziehen. Bereits hier diskutieren wir das „unsachgemäß gestellte“ elliptische Anfangswertproblem und geben ein Beispiel aus der Medizin an, wo das Problem trotzdem auftritt. Die frühe Einführung des Laplaceschen Eigenwertproblems erweist sich in folgenden Kapiteln als äußerst hilfreich. Daran anschließend behandeln wir Diffusions- und Wellengleichung. Schließlich führen wir die Schrödinger-Gleichung und die Helmholtz-Gleichung ein, womit wir schon die gängige Unterteilung in elliptische, parabolische und hyperbolische Differentialgleichungen verlassen.

In **Kapitel 2** zeigen wir, dass die im ersten Kapitel gewählten Beispiele in Naturwissenschaft und Technik tatsächlich auftreten. Unter den zahlreichen hierzu denkbaren Anwendungsgebieten wählen wir Elektrodynamik, Strömungsdynamik und Elastomechanik aus. In allen drei Fällen stellen wir die gängigen Modellhierarchien überblickshaft dar. Die numerische Lösung der strömungsdynamischen Differentialgleichungen wird in diesem Buch nicht vertieft. Zur Elektrodynamik und Elastomechnik geben wir jedoch später nichttriviale Anwendungsbeispiele.

Die beiden folgenden Kapitel beschäftigen sich mit der *Diskretisierung* von elliptischen Problemen.

In **Kapitel 3** arbeiten wir zunächst *Differenzenmethoden* auf äquidistanten Gittern aus. Für den Poisson-Modellfall leiten wir die traditionelle Approximationstheorie her, zuerst in der L^2-Norm und der Energienorm, dann in der L^∞-Norm. Anschließend zeigen wir für nichtäquidistante Gitter die unterschiedlichen algorithmischen Strategien auf und weisen auf deren jeweilige Schwachstellen hin. Insbesondere krumme Randgeometrien und stark lokalisierte Phänomene bereiten Schwierigkeiten.

In **Kapitel 4** behandeln wir *Galerkin-Methoden* als Alternative, und zwar sowohl globale *Spektralmethoden* als auch *Finite-Elemente-Methoden* (FEM). Zunächst entwickeln wir die abstrakte Theorie aus einfachen geometrischen Konzepten im Hilbertraum. Darauf aufbauend leiten wir die jeweiligen Approximationseigenschaften her, bei FEM für den Fall uniformer Gitter, und zwar sowohl für Rand- wie für Eigenwertprobleme. Für Fourier-Galerkin-Methoden geben wir eine adaptive Variante an, bei der die benötigte Dimension der Basis automatisch angepasst wird. Für FEM gehen wir etwas mehr ins Detail der algorithmischen Realisierung, in 2D und 3D ebenso wie für höhere Ordnung der lokalen Polynome. Bei nichtuniformen FE-Netzen spielt eine Winkelbedingung eine wichtige Rolle, die wir im einfachen Fall herleiten und die uns in Kapitel 6.2.2 nützlich sein wird.

Die nächsten drei Kapitel beschreiben *Algorithmen* zur numerischen Lösung linearer elliptischer Rand- und Eigenwertprobleme.

In **Kapitel 5** behandeln wir *diskrete elliptische* Randwertprobleme, bei denen ein vorab festgelegtes Gitter existiert, so dass nur noch elliptische Gittergleichungssysteme fester Dimension zu lösen sind. Hierfür gibt es als algorithmische Alternativen entweder *direkte Sparse-Löser* oder *iterative Methoden*, jeweils für symmetrisch positiv definite Matrizen. Für direkte Löser diskutieren wir die zugrundeliegenden Prinzipien der symbolischen Faktorisierung und Frontenlösung. Unter den iterativen Lösern führen wir die klassischen Matrixzerlegungsalgorithmen (Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahren) sowie die Methode der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren) an, letztere inklusive Vorkonditionierung und adaptivem Abbruchkriterium in der *Energienorm* – eine nicht allgemein bekannte Methodik, auf die wir in nachfolgenden Kapiteln wiederholt zurückgreifen. Darüber hinaus arbeiten wir eine Variante des

CG-Verfahrens für die Minimierung des Rayleigh-Quotienten aus. Anschließend diskutieren wir die genannten iterativen Methoden unter dem Gesichtspunkt der Fehlerglättung und leiten über zu einer elementaren Darstellung von Mehrgittermethoden und Hierarchische-Basis-Methoden, zunächst auf vorgegebenen hierarchischen Gittern. Für Mehrgittermethoden bieten wir den klassischen Konvergenzbeweis an, der jedoch nur bis zu W-Zyklen trägt. Tiefergehende Beweise haben wir auf das nachfolgende Kapitel 7 verschoben.

In **Kapitel 6** legen wir die Basis für die effiziente Konstruktion adaptiver hierarchischer Gitter. Zunächst behandeln wir die gängigen a-posteriori-Fehlerschätzer unter Einschluss der oft vernachlässigten hierarchischen Fehlerschätzer. Die Darstellung liefert sowohl eine einheitliche Theorie als auch Details der algorithmischen Realisierung, speziell im Kontext finiter Elemente. In hinreichendem Detail gehen wir auch auf Gitterverfeinerung ein. Die hp-Verfeinerung sparen wir hingegen aus, weil wir uns im Wesentlichen auf finite Elemente niedriger Ordnung einschränken. Für eine Modellverfeinerung geben wir einen Konvergenzsatz an. Danach wird die Anwendung dieser Fehlerschätzer zur näherungsweisen Äquilibrierung von Diskretisierungsfehlern theoretisch wie algorithmisch (lokale Extrapolation) ausgearbeitet. Die Theorie wird an einem elementaren Beispiel über einem Gebiet mit einspringenden Ecken illustriert. Auf der Basis adaptiver Gitter lassen sich sowohl effiziente direkte oder iterative Löser der numerischen linearen Algebra als auch iterative Mehrgittermethoden realisieren. Für ersteren Fall geben wir ein quadratisches Eigenwertproblem für den Entwurf eines Plasmon-Polariton-Wellenleiters als nichttriviales Beispiel an. Dabei nutzen wir Vorwissen über optische Wellenleiter aus Kapitel 2.1.2.

In **Kapitel 7** gehen wir *kontinuierliche* Randwertprobleme direkt als Probleme im Funktionenraum an, d. h. durch eine Kombination aus Finite-Elemente-Diskretisierungen, Mehrgittermethoden und adaptiven hierarchischen Gittern. Als Basis für die Konvergenztheorie für Mehrgittermethoden legen wir zunächst das abstrakte Rüstzeug von sequentiellen und parallelen Unterraum-Korrekturmethoden bereit. Im Vorbeigehen wenden wir es auch auf Gebietszerlegungsmethoden und auf FEM höherer Ordnung an. Auf diesem theoretischen Hintergrund sind wir in der Lage, multiplikative und additive Mehrgitterzugänge (HB- und BPX-Vorkonditionierung) auch für den adaptiven Fall vergleichend zu analysieren. Als algorithmisch besonders einfachen Kompromiss zwischen multiplikativen und additiven Mehrgittermethoden arbeiten wir auch kaskadische Mehrgittermethoden aus. Hierzu arbeiten wir eine neuen Vorschlag zur Aufteilung der Diskretisierungsfehler in Raum- und Zeitanteile aus. Abschließend stellen wir zwei Arten von adaptiven Mehrgittermethoden zur Lösung linearer Eigenwertprobleme vor, eine lineare Mehrgittermethode und eine Variante der Rayleigh-Quotienten-Minimierung.

Die letzten beiden Kapitel erweitern die bis dahin auf stationäre lineare Probleme eingeschränkte Darstellung auf *nichtlineare elliptische* und auf *nichtlineare parabolische* Probleme.

In **Kapitel 8** stellen wir *affin-konjugierte* Newton-Methoden für *nichtlineare elliptische Randwertprobleme* vor. Auch hier betrachten wir zunächst Methoden auf fest vorgegebenen räumlichen Gittern, d. h. diskrete Newton-Methoden für elliptische Gittergleichungssysteme, bei denen Adaptivität sich lediglich auf Dämpfungsstrategien und Abbruchkriterien für innere PCG-Iterationen bezieht. Daran anschließend stellen wir *volladaptive Newton-Mehrgitter-Methoden* vor, bei denen noch die Konstruktion geeigneter adaptiver hierarchischer Gitter unter zusätzlicher Berücksichtigung der Nichtlinearität hinzukommt. Ein Problem ohne Lösung dient zur Illustration des Unterschieds zwischen diskreten und kontinuierlichen Newton-Methoden. Als nichttriviales Beispiel fügen wir abschließend eine Methode zur Operationsplanung in der Mund-Kiefer-Gesichts-Chirurgie an. Dabei greifen wir auf Vorwissen zur nichtlinearen Elastomechanik aus Kapitel 2.3 zurück. Es zeigt sich, dass wir in diesem Beispiel das Feld der konvexen Minimierung verlassen müssen. Für diesen Spezialfall skizzieren wir einen algorithmischen Zugang.

In **Kapitel 9** behandeln wir *zeitabhängige Differentialgleichungen vom parabolischen Typ*. Die derzeit im Schwange befindlichen diskontinuierlichen Galerkin-Methoden klammern wir aus, da sie sich eher für hyperbolische als für parabolische Probleme eignen. Quasi als Schnelldurchgang durch Band 2 stellen wir ein Wiederholungskapitel über steife gewöhnliche Differentialgleichungen an den Anfang. Über Band 2 hinaus richten wir unser spezielles Augenmerk auf die bei der Diskretisierung parabolischer Differentialgleichungen auftretende *Ordnungsreduktion*. Wie bei den stationären Problemen (Kapitel 5 und 8.1) behandeln wir auch hier zunächst den Fall fest vorgegebener Raumgitter, die klassische Linienmethode mit adaptiver Zeitschrittsteuerung. Sodann diskutieren wir ihre etwas schwierige Erweiterung in Richtung auf mitbewegte räumliche Gitter, eine Methode, die sich allenfalls in einer Raumdimension bewährt. Als Alternative stellen wir die *volladaptive Zeitschichtenmethode* (auch: *Rothe-Methode*) vor, bei der räumliche und zeitliche Adaptivität in natürlicher Weise gekoppelt werden können; dazu leiten wir eine leicht verbesserte adaptive Strategie her. Als nichttriviales Beispiel geben wir Resultate zur numerischen Simulation eines Modells der elektrischen Erregung des Herzmuskels an, sowohl für den gesunden Herzschlag als auch für den Prozess des Kammerflimmerns (Fibrillation).