1 Einleitung

Diese Arbeit hat die numerische Lösung des Eigenwertproblems der skalaren Helmholtzgleichung

$$-\Delta u(x,y) - f(x,y)u(x,y) = \lambda u(x,y)$$

auf einem beschränkten, zweidimensionalen Gebiet mit Dirichlet-Randbedingung zum Thema, wobei die beschränkte Funktion f sowohl reell- als auch komplexwertig sein kann. Die Aufgabe der Berechnung von Eigenlösungen dieser partiellen Differentialgleichung unter den genannten Voraussetzungen tritt in vielen Bereichen der Natur- und Ingenieurwissenschaften auf. In der integrierten Optik läßt sich die Bestimmung ausbreitungsfähiger Lichtmoden von in einer Raumrichtung invarianten optischen Strukturen auf diese Problemstellung zurückführen. In der Quantenmechanik beschreiben bestimmte Eigenfunktionen stationäre Zustände eines quantenmechanischen Systems, in der Akustik schließlich werden die Eigenlösungen der Helmholtzgleichung zur Untersuchung des Resonanzverhaltens mechanischer Komponenten benötigt. Dabei ist es in vielen Anwendungen, nämlich bei der Beschreibung von Systemen mit Erhaltungseigenschaften, ausreichend, nur den Fall einer reellen Funktion f, das heißt eines selbstadjungierten Helmholtzoperators, zu betrachten. Modelliert man jedoch auch Systeme mit Gewinn bzw. Verlust, so wird man auf ein Eigenwertproblem mit komplexwertiger Funktion f, also mit einem nichtselbstadjungierten Operator, geführt. Ein typisches Beispiel dafür ist eine wellenleitende optische Struktur mit Dämpfung oder Verstärkung in Ausbreitungsrichtung. Während nun das Studium der analytischen Eigenschaften des Problems mit reeller Funktion f (selbstadjungiertes Eigenwertproblem) wie auch mit komplexer Funktion f (nichtselbstadjungiertes Eigenwertproblem) als abgeschlossenes Forschungsgebiet angesehen werden kann, stellt die Entwicklung von Algorithmen zur numerischen Lösung des Eigenwertproblems, insbesondere im nichtselbstadjungierten Fall, ein aktuelles Thema mathematischer Forschungsarbeit dar.
Den Ausgangspunkt der Konstruktion numerischer Verfahren zur Behandlung des Eigenwertproblems bildet eine geeignete Diskretisierung des kontinuierlichen Problems. Dabei wird man auf ein algebraisches Eigenwertproblem der Form

$$Au = \lambda Bu$$

mit den im allgemeinen hochdimensionalen und dünnbesetzten Matrizen A und B geführt. Bei der in dieser Arbeit benutzten Finite-Elemente-Diskretisierung über Dreiecksgittern ist die Matrix A für reell- bzw. komplexwertige Funktionen f selbstadjungiert bzw. nichtselbstadjungiert, die Matrix B stets selbstadjungiert und positiv definit. Um eine möglichst gute Approximation der gesuchten kontinuierlichen Eigenwerte und Eigenfunktionen zu erreichen, wird die näherungsweise Berechnung dieser Lösungen nicht auf der Grundlage eines einzigen festen Gitters, sondern unter Zugrundelegung einer Folge von adaptiv verfeinerten Triangulierungen durchgeführt. Aufgrund

der so entstehenden hierarchischen Mehrgitter-Struktur bieten sich in natürlicher Weise Mehrgitter-Methoden zur Lösung der auftretenden diskreten Probleme an. Diese Verfahren zählen zu den schnellsten Lösern der im Zusammenhang mit der Diskretisierung partieller Differentialgleichungen vorkommenden algebraischen Systeme, da der Rechenaufwand nur proportional zur Anzahl der zu bestimmenden Unbekannten ansteigt. Das konkrete Anliegen dieser Arbeit besteht nun in der Verallgemeinerung eines für den selbstadjungierten Fall und die Berechnung einer einfachen Eigenlösung existierenden Mehrgitter-Verfahrens von Mandel und McCormick [42] auf den nichtselbstadjungierten Fall und die simultane Bestimmung mehrerer Eigenlösungen. Die entwickelte Methode basiert auf der Schur-Zerlegung beliebiger Matrizen und gestattet die direkte Bestimmung der gewünschten Lösungen des diskreten Eigenwertproblems. Der gewählte Zugang erlaubt eine einheitliche Behandlung des selbstadjungierten und nichtselbstadjungierten Falls, wobei (insbesondere für Probleme mit komplexer Funktion f) häufig benutzte Techniken wie Störungsrechnung oder Pfadverfolgung nicht benötigt werden.
Die vorliegende Arbeit gliedert sich im wesentlichen in drei Kapitel. Im einführenden Kapitel 2 wird zunächst gezeigt, daß die Bestimmung geführter Lichtmoden optischer Komponenten unter geeigneten Modellannahmen durch Lösung des Eigenwertproblems der skalaren Helmholtzgleichung erfolgen kann. Anschließend wird die Variationsformulierung dieses Eigenwertproblems motiviert und hergeleitet. In den beiden folgenden Abschnitten werden zum einen die analytischen Eigenschaften des Problems untersucht, wobei Punkte wie die Struktur des Spektrums des Helmholtzoperators und die Vollständigkeit der Eigenlösungen behandelt werden, zum anderen wird darauf aufbauend eine Sensitivitätsanalyse in Bezug auf die Funktion f durchgeführt, das heißt die Abhängigkeit der Eigenlösungen von Störungen in f diskutiert. Der Gegenstand des nächsten Abschnittes ist die Diskretisierung des kontinuierlichen Problems aus der Variationsformulierung mittels finiter Elemente. Es werden Abschätzungen für die Approximationsfehler sowohl in den Eigenwerten als auch in den korrespondierenden Eigenfunktionen angegeben. Im letzten Abschnitt des Kapitels 2 werden ein abstraktes Verfahren, die Projektionsmethode, zur Lösung von algebraischen Eigenwertproblemen und einige darauf beruhende Lösungsverfahren, die Krylovraum-Methoden, dargestellt.
Im sich anschließenden Kapitel 3, welches die Mehrgitter-Methoden zur Lösung von Eigenwertproblemen beinhaltet, wird einführend ein Überblick über die allgemeine Mehrgitteridee und existierende Mehrgitter-Verfahren gegeben. Der zweite Abschnitt behandelt die Lösung des selbstadjungierten Problems und hat die Verallgemeinerung der Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung von Mandel und McCormick [42] auf die simultane Berechnung mehrerer Eigenlösungen zum Inhalt. Dazu wird zunächst vom Rayleigh-Quotienten zu einem allgemeineren Funktional zur Charakterisierung des von den gesuchten Eigenvektoren aufgespannten invarianten Unterraumes übergegangen. Es werden verschiedene Minimierungsverfahren zur simultanen Berechnung der kleinsten Eigenwerte und der korrespondierenden Eigenvektoren auf einem Gitter

vorgestellt, wobei speziell die Konvergenzeigenschaften der Methode der konjugierten Gradienten, insbesondere deren Glättungseigenschaft, näher untersucht werden. Nach diesen vorbereitenden Betrachtungen wird ein Mehrgitter-Verfahren zur Bestimmung des zu den kleinsten Eigenwerten gehörenden invarianten Unterraumes angegeben. Dieses läßt sich als Rekursion in Form von Eigenwertproblemen realisieren. Diese Formulierung erlaubt dann die Verallgemeinerung der Mehrgitter-Methode auf den nichtselbstadjungierten Fall, welche im dritten Abschnitt von Kapitel 3 vorgenommen wird. Abschließend wird gezeigt, daß das entwickelte Mehrgitter-Verfahren der Klasse der Projektionsmethoden angehört.
Im letzten Kapitel 4 dieser Arbeit werden einige numerische Beispielrechnungen (darunter anspruchsvolle Anwendungen aus der integrierten Optik), welche mit Hilfe der konstruierten Mehrgitter-Methode durchgeführt worden sind, dokumentiert. Insbesondere zeigt sich in diesen Tests die optimale Komplexität des Mehrgitter-Algorithmus, wobei ausschließlich adaptiv erzeugte Triangulierungen zugrunde gelegt wurden.

Danksagung. An dieser Stelle möchte ich all jenen herzlich danken, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt und gefördert haben. Dabei geht mein erster Dank an Prof. Peter Deuflhard für die Betreuung dieser Arbeit und die hervorragenden Arbeitsbedingungen am Konrad-Zuse-Zentrum. Mein nächster Dank gilt meinem Kollegen Dr. Frank Schmidt für die aufgebrachte Geduld und Mühe bei der Beantwortung jeder meiner Fragen. Ich danke weiterhin Dr. Folkmar Bornemann, Prof. David E. Edmunds (University of Sussex at Brighton) und Dr. Dirk Werner (Freie Universität Berlin) für die gewährte Unterstützung bei der Erstellung des Abschnittes 2.3. Weiterer Dank gebührt Dr. Reinhard März (Siemens AG München) für die stets gute und anregende Kooperation und die Bereitstellung der Daten zur Simulation des optischen Verstärkers.
Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des Programmes „Förderung von anwendungsorientierten Verbundprojekten auf dem Gebiet der Mathematik“ des Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie in dem Projekt „Entwicklung von adaptiven Mehrgitter-Methoden zur Berechnung von Eigenlösungen der Helmholtzgleichung für Halbleiterstrukturen der integrierten Optik“ (Projektnummer 03-DE7ZIB-5). Dem BMBF möchte ich abschließend für die finanzielle Förderung meiner Tätigkeit danken.