

### 3 Mehrgitter-Methoden zur Lösung des Eigenwertproblems

#### 3.1 Überblick

Die Mehrgitter-Methoden zählen zu den schnellsten Verfahren zur Lösung des diskreten Eigenwertproblems (33), insbesondere bei Problemen mit sehr vielen Unbekannten. Der Aufwand zur Lösung des Systems (33) steigt bei diesen Algorithmen nur proportional zur Anzahl  $N$  der Freiheitsgrade an. Das bedeutet, die Verfahren haben optimale Komplexität. Zur Anwendung dieser Methoden wird eine Gitterhierarchie benötigt, das heißt eine Folge von Triangulierungen  $t_{h_0}, t_{h_1}, \dots, t_{h_{i_{\max}}}$  mit korrespondierenden Finite-Elemente-Räumen  $W_{h_0}, W_{h_1}, \dots, W_{h_{i_{\max}}}$ , wie sie beispielsweise durch fortgesetzte adaptive Gitterverfeinerung entsteht. Wir wollen im Rahmen dieser Arbeit nur konforme Methoden betrachten, also ineinander geschachtelte Triangulierungen, wobei die zugehörigen Räume die Inklusionsrelation

$$W_{h_0} \subset W_{h_1} \subset \dots \subset W_{h_{i_{\max}}} \subset H_0^1(\Omega)$$

erfüllen.

Das prinzipielle Vorgehen soll zuerst für den Zweigitter-Algorithmus dargestellt werden. Jeder Iterationsschritt der Methode gliedert sich in zwei Etappen, die Glättung und die Bestimmung einer Grobgitter-Korrektur. Im Glättungsschritt auf dem Feingitter werden durch ein einfaches Iterationsverfahren, den Glätter, die hochfrequenten Fehleranteile gedämpft. Zur Behandlung der niederfrequenten Fehleranteile wird danach ein Grobgitter-Korrekturproblem (von wesentlich kleinerer Dimension als das eigentliche Problem) aufgestellt und gelöst. Durch abwechselnde Wiederholung der Glättungs- und Grobgitter-Korrekturschritte entsteht ein iteratives Verfahren über zwei Gittern. Da das zur Bestimmung der Grobgitter-Korrektur zu lösende Problem von der gleichen Bauart wie das ursprüngliche Problem ist, kann dieses nun ebenfalls nach dem eben beschriebenen Prinzip von Glättung und Grobgitter-Korrektur bearbeitet werden. Dadurch entsteht in jedem Iterationsschritt eine Rekursion über mehrere Gitter, das resultierende Verfahren ist eine Mehrgitter-Methode. Die jeweils auftretenden Grobgitterprobleme werden dabei nur noch auf dem größten Gitter exakt, ansonsten typischerweise durch einen oder zwei Iterationsschritte (V-Zyklus oder W-Zyklus) näherungsweise gelöst. Die Glättungsschritte verteilt man üblicherweise gleichmäßig auf die Phase vor und nach der (approximativen) Bestimmung der Grobgitter-Korrektur.

Aus diesem allgemeinen Konzept sind verschiedene Varianten von Mehrgitter-Methoden zur Lösung des Eigenwertproblems (33) entwickelt worden. Diese Verfahren lassen sich grob in zwei Klassen einteilen. Bei den Algorithmen der ersten Klasse wird eine Mehrgitter-Methode zur Lösung auftretender linearer Teilprobleme benutzt, während bei den Methoden der zweiten Klasse das Mehrgitterkonzept direkt auf das zu lösende

Problem (33) angewandt wird. Wir beginnen mit einer kurzen Beschreibung einiger Verfahren der ersten Klasse.

Dem Algorithmus von BANK [4] liegt die inverse Vektoriteration zugrunde. Die dabei in jedem Teilschritt entstehenden Gleichungssysteme werden mit einem Mehrgitter-Verfahren für lineare Probleme gelöst. Bei der Methode von BANK und CHAN [5] wird die Bestimmung einer einfachen Eigenlösung als parameterabhängiges Problem mit dem skalaren Parameter  $\lambda$  angesehen, zu dessen Lösung eine Mehrgitter-Fortsetzungsmethode angewandt wird. HACKBUSCH [27] betrachtet das Eigenwertproblem (33) als nichtlineares Problem in den Unbekannten  $U$  und  $T$  und benutzt zur Lösung das Newton-Verfahren, wobei die auftretenden linearen Teilprobleme mit einer der Struktur der Jacobi-Matrix angepaßten Mehrgitter-Methode behandelt werden.

Häufig wird das Mehrgitterkonzept auch zur Vorkonditionierung benutzt. Die im nächsten Abschnitt für den selbstadjungierten Fall dargestellte Rayleigh-Quotienten-Minimierung auf dem feinsten Gitter wird bei JUNG et al. [32] mit einem linearen Mehrgitter-Verfahren zur Vorkonditionierung verknüpft. Die von BRAMBLE et al. [8] und LEINEN et al. [39] zur Lösung des selbstadjungierten Eigenwertproblems vorgeschlagene Methode läßt sich in diesem Zusammenhang als spezielle Variante einer vorkonditionierten simultanen Rayleigh-Quotienten-Minimierung auffassen.

Kommen wir nun zu den Verfahren der zweiten Klasse. Dabei wollen wir zunächst die Methode von HACKBUSCH [26, S. 257 ff.] für den Fall der Berechnung eines einfachen Eigenwertes darstellen. Die Gleichung

$$(A - \lambda_1 B)u_1 = 0 \quad (39)$$

wird als parameterabhängiges lineares Problem betrachtet, auf das die Mehrgitter-Idee direkt angewandt wird. Vor jedem Mehrgitter-Zyklus wird dabei eine Näherung des Eigenwertes  $\lambda_1$  durch Bildung des Rayleigh-Quotienten bzw. verallgemeinerten Rayleigh-Quotienten

$$\tilde{\lambda}_1 = \frac{\tilde{u}_1^* A \tilde{u}_1}{\tilde{u}_1^* B \tilde{u}_1} \quad \text{bzw.} \quad \tilde{\lambda}_1 = \frac{\tilde{v}_1^* A \tilde{u}_1}{\tilde{v}_1^* B \tilde{u}_1}$$

bestimmt, wobei  $\tilde{u}_1$  und  $\tilde{v}_1$  Approximationen des rechten und linken Eigenvektors  $u_1$  und  $v_1$  sind. Dieser Parameterwert wird dann während des gesamten Zyklus konstant gehalten. Als Glätter wird ein „klassisches“ Iterationsverfahren zur Lösung linearer Probleme, beispielsweise das Jacobi- oder das Gauß-Seidel-Verfahren, eingesetzt. Die zur Berechnung der Grobgitter-Korrekturen zu lösenden Probleme sind von der Form

$$(A_l - \tilde{\lambda}_{1,l} B_l)w_l = d_l, \quad l = 0, \dots, l_{\max} - 1 \quad .$$

Dabei sind  $A_l$  und  $B_l$  die zur Triangulierung  $t_{h_l}$  korrespondierenden Matrizen, der Wert  $\tilde{\lambda}_{1,l}$  eine Näherung des zu diesem Gitter gehörenden Eigenwertes  $\lambda_{1,l}$  mit kleinstem

Realteil und die Größe  $d_l$  der Defekt, der sich aus dem aktuellen Residuum bezüglich der nächstfeineren Triangulierung ergibt. Um die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung  $w_l$  auch im Falle  $\tilde{\lambda}_{1,l} = \lambda_{1,l}$  sichern zu können, sind Projektionen von  $d_l$  und  $w_l$  bezüglich des zu  $\tilde{\lambda}_{1,l}$  gehörenden (approximativen) Eigenvektors  $\tilde{u}_{1,l}$  gemäß

$$\begin{aligned} d_l &\mapsto d_l^\perp = d_l - (\tilde{v}_{1,l}^* d_l) B_l \tilde{u}_{1,l} \\ w_l &\mapsto w_l^\perp = w_l - (\tilde{v}_{1,l}^* B_l w_l) \tilde{u}_{1,l} \end{aligned}$$

erforderlich, wobei  $\tilde{v}_{1,l}$  eine Näherung des korrespondierenden linken Eigenvektors mit  $\tilde{v}_{1,l}^* B_l \tilde{u}_{1,l} = 1$  ist. In unserem speziellen Fall sind die Matrizen  $A_l$  komplex symmetrisch und die Matrizen  $B_l$  reell symmetrisch, das heißt die linken Eigenvektoren sind die konjugiert komplexen rechten Eigenvektoren. Damit können wir hier  $\tilde{v}_{1,l}^*$  durch  $\tilde{u}_{1,l}^T$  ersetzen. Die in jedem Zyklus des Mehrgitter-Verfahrens benötigten Approximationen der Eigenpaare  $(\lambda_{1,l}, u_{1,l})$  werden mit der „nested-iteration“-Technik (einer geschachtelten Iteration) bestimmt. Dabei löst man das Problem zunächst für die Grundtriangulierung  $t_{h_0}$ , danach für die folgende Triangulierung  $t_{h_1}$  usw., wobei als Startwerte stets die berechneten Lösungen vom letzten Gitter benutzt werden. Im Falle der Berechnung mehrerer Eigenwerte werden  $q$  Gleichungen der Form (39) gelöst. Die Bestimmung der Eigenwertapproximationen zu Beginn jedes Zyklus erfolgt dabei durch Lösung eines projizierten Eigenwertproblems (38), wobei  $W = \tilde{U} = (\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_q)$  mit den aktuellen Eigenvektornäherungen  $\tilde{u}_j$  gesetzt wird. Die entsprechend auftretenden  $q$  Grobgitterprobleme behandelt man simultan, das heißt die oben beschriebenen Projektionen werden für jedes  $d_{j,l}$  und  $w_{j,l}$  bezüglich des von den (approximativen) Eigenvektoren  $\tilde{u}_{1,l}, \dots, \tilde{u}_{q,l}$  aufgespannten Unterraumes durchgeführt. Eine Konvergenztheorie für diese Mehrgitter-Methode ist in der Arbeit [25] dargestellt.

Ein zweites Verfahren, bei dem das Mehrgitterkonzept direkt auf das zu lösende Eigenwertproblem angewandt wird, ist die Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung von MANDEL und MCCORMICK [42] zur Berechnung eines einfachen Eigenwertes und des korrespondierenden Eigenvektors. Diese Methode ist zunächst nur im selbstadjungierten Fall anwendbar. Wesentliches Strukturmerkmal des Algorithmus ist, daß dieser nach Konstruktion eine monoton fallende Folge von Eigenwertnäherungen liefert, welche aufgrund der Beschränktheit des Rayleigh-Quotienten im selbstadjungierten Fall stets konvergent ist. Diese Eigenschaft verleiht dem Verfahren eine hohe numerische Stabilität. Das Anliegen dieser Arbeit ist die Verallgemeinerung der Methode auf den nichtselbstadjungierten Fall. Dazu werden wir zunächst im folgenden Abschnitt die Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung in einer äquivalenten Formulierung beschreiben, wobei wir gleich die Erweiterung des Verfahrens zur Berechnung invarianter Unterräume entwickeln. Es stellt sich heraus, daß das Verfahren als Mehrgitter-Rekursion in Form von Eigenwertproblemen dargestellt werden kann. Diese Darstellung bildet die Grundlage der Entwicklung einer direkten Mehrgitter-Methode für den nichtselbstadjungierten Fall. Wir erhalten ein Mehrgitter-Verfahren, welches zur Lösung des

allgemeinen Problems (33) eine Rekursion in Form von Schurproblemen realisiert.

*Bemerkung 13.* Die Darstellung des Verfahrens der Rayleigh-Quotienten-Minimierung als eine Iteration in Form von Eigenwertproblemen geht auf FADDEJEW und FADDEJEWA [19, S. 415] zurück. Die Formulierung der Mehrgitter-Minimierung als Rekursion von Eigenwertproblemen wird unter anderem auch von CHAN und SHARAPOV [10] im Zusammenhang mit Gebietszerlegungsmethoden zur Bestimmung einer einfachen Eigenlösung des selbstadjungierten Problems benutzt.

## 3.2 Selbstadjungierte Eigenwertprobleme

In diesem Abschnitt soll die Verallgemeinerung der Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung von MANDEL und MCCORMICK [42] zur simultanen Berechnung mehrerer Eigenwerte und der korrespondierenden Eigenvektoren dargestellt werden. Im selbstadjungierten diskreten Fall können analog zu Lemma 2 (ii) die Eigenvektoren reell gewählt werden, so daß das zu lösende Problem die Form

$$\begin{aligned} AU &= BUA \\ U^T BU &= I \end{aligned} \tag{40}$$

annimmt, wobei alle Matrizen reellwertig sind. Die dünn besetzten  $(N \times N)$ -Matrizen  $A$  und  $B$  sind symmetrisch, die Matrix  $B$  ist positiv definit. Die Matrix  $\Lambda$  ist eine  $(q \times q)$ -Diagonalmatrix, bestehend aus den gesuchten  $q$  kleinsten Eigenwerten.

Wir beginnen mit der Herleitung der Methode der Rayleigh-Quotienten-Minimierung auf einem Gitter. Eine spezielle Variante dieses Algorithmus wird in dem weiter unten beschriebenen Mehrgitter-Verfahren die Rolle des Glätters übernehmen. Das allgemeine Prinzip dieses Verfahrens wollen wir zunächst an der Bestimmung des kleinsten (einfachen) Eigenwertes  $\lambda_1$  und des korrespondierenden Eigenvektors  $u_1$  des Matrixpaares  $(A, B)$  erläutern. Dabei legen wir, wie auch im weiteren dieses Abschnitts, den Euklidischen Vektorraum  $\mathbb{R}^N$  zugrunde. Nach dem diskreten Courantschen Minimaxprinzip (32) ist der Eigenwert  $\lambda_1$  durch

$$\lambda_1 = \min_{u \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}} R(u) = R(u_1)$$

mit dem Rayleigh-Quotienten

$$R(u) = \frac{u^T Au}{u^T Bu}$$

charakterisiert. Die wesentliche Idee aller Rayleigh-Quotienten-Minimierungsverfahren zur Berechnung des untersten Eigenpaares  $(\lambda_1, u_1)$  besteht jetzt in folgendem: zu einer

Näherung  $(\tilde{\lambda}_1, \tilde{u}_1)$  und einer vorgegebenen, von  $\tilde{u}_1$  linear unabhängigen Suchrichtung  $\tilde{p}$  wird über den Minimierungsansatz

$$\hat{\lambda}_1 = \min_{\delta \in \mathbb{R}} R(\tilde{u}_1 + \delta \tilde{p}) = R(\hat{u}_1) \quad (41)$$

eine neue Approximation  $(\hat{\lambda}_1, \hat{u}_1)$  bestimmt. Nach Definition von  $\hat{\lambda}_1$  besteht dabei die Relation  $\hat{\lambda}_1 \leq \tilde{\lambda}_1$ . Aufgrund der Homogenität nullter Ordnung  $R(\vartheta u) = R(u)$  des Rayleigh-Quotienten läßt sich (41) allgemeiner als zweidimensionale Minimierungsaufgabe gemäß

$$\hat{\lambda}_1 = \min_{\begin{pmatrix} \varphi \\ \psi \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}} R(\varphi \tilde{u}_1 + \psi \tilde{p}) = R(\hat{u}_1) \quad (42)$$

schreiben. Aus  $R(\varphi \tilde{u}_1 + \psi \tilde{p}) = (\xi^T \tilde{A} \xi) / (\xi^T \tilde{B} \xi)$  mit

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} \tilde{u}_1 & \tilde{p} \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} \tilde{u}_1 & \tilde{p} \end{pmatrix} \quad , \quad \tilde{B} = \begin{pmatrix} \tilde{u}_1 & \tilde{p} \end{pmatrix}^T B \begin{pmatrix} \tilde{u}_1 & \tilde{p} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \xi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \psi \end{pmatrix}$$

sehen wir, daß die Bestimmung von  $(\hat{\lambda}_1, \hat{u}_1)$  äquivalent ist zur Berechnung des kleineren Eigenwertes und zugehörigen Eigenvektors des projizierten  $(2 \times 2)$ -Matrixpaares  $(\tilde{A}, \tilde{B})$ . Die Matrizen  $\tilde{A}$  und  $\tilde{B}$  sind nach Definition reell und symmetrisch,  $\tilde{B}$  ist aufgrund der linearen Unabhängigkeit von  $\tilde{u}_1$  und  $\tilde{p}$  positiv definit. Damit ist zur Bestimmung von  $(\hat{\lambda}_1, \hat{u}_1)$  strukturell dasselbe wie das ursprüngliche Problem (40) zu lösen, wenn wir noch  $\hat{u}_1$  gemäß  $\hat{u}_1^T B \hat{u}_1 = 1$  normieren.

Durch wiederholte Anwendung dieses Prinzips erhalten wir ein Iterationsverfahren, das eine monoton fallende Folge von Eigenwertnäherungen mit korrespondierenden Eigenvektorapproximationen liefert. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden wir im folgenden die Tilden und die Hüte über den iterierten Vektoren und den Index 1 unterdrücken. Die verschiedenen Varianten der Rayleigh-Quotienten-Minimierungsverfahren unterscheiden sich nun lediglich in der Wahl der Suchrichtung  $p$  in jedem Iterationsschritt. Bei der Koordinatenrelaxation von FADDEJEW und FADDEJEW [19, S. 412 ff.] dienen die Einheitsvektoren  $e_k$  als Suchrichtungen, die im Laufe der Iteration zyklisch durchlaufen werden. Die Methode ist das Äquivalent zum Gauß-Seidel-Verfahren für die Lösung linearer Gleichungssysteme. Im Zusammenhang mit der Approximation mittels finiter Elemente läßt sich dieser Algorithmus auch als Minimierungsmethode im Funktionenraum  $H_0^1(\Omega)$  deuten, wobei in jedem Schritt in Richtung einer Basisfunktion des zugrunde liegenden Finite-Elemente-Raumes minimiert wird. Eine weitere Variante der Rayleigh-Quotienten-Minimierung, eingeführt von HESTENES und KARUSH [29], beruht auf der Methode des steilsten Abstiegs. Hier wird der negative Gradient des Rayleigh-Quotienten im Punkt  $u$  als Suchrichtung benutzt, das heißt  $p = -g(u)$ , wobei der Gradient durch

$$g(u) = \nabla R(u) = \frac{2}{u^T B u} (A u - R(u) B u)$$

gegeben ist. Wegen  $u^T g(u) = 0$  sind  $u$  und  $p$  für  $u \neq u_j$  stets linear unabhängig. Auf eine dritte Methode, die Rayleigh-Quotienten-Minimierung mit konjugierten Gradienten, wollen wir im folgenden näher eingehen. Diese Variante geht ursprünglich auf BRADBURY und FLETCHER [6] zurück. Wir wollen hier jedoch der Darstellung in DÖHLER [15] folgen. Den Ausgangspunkt der Herleitung bildet der Ansatz  $p = r + \chi s$  für die Suchrichtung. Der Vektor  $r$  ist dabei zunächst beliebig, der Vektor  $s$  wird jeweils aus der vorangegangenen Eigenvektorapproximation und der dazu korrespondierenden Suchrichtung durch Maximierung des Rayleigh-Quotienten analog zu Gleichung (42) gewonnen. Die aktuelle Eigenvektornäherung  $u$  und der Vektor  $s$  erfüllen somit die Relationen

$$(u \ s)^T A (u \ s) = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad (u \ s)^T B (u \ s) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} ,$$

wobei wir  $\lambda$  echt kleiner als  $\mu$  voraussetzen wollen. Zur Berechnung des reellen Parameters  $\chi$  benutzen wir die Taylorentwicklung

$$R(u + \Delta u) = \underbrace{R(u) + g(u)^T \Delta u + \frac{1}{2} \Delta u^T H(u) \Delta u}_{= J(u, \Delta u)} + \dots$$

des Rayleigh-Quotienten im Punkt  $u$ , wobei die Hessesche Matrix durch

$$H(u) = \frac{2}{u^T B u} (A - R(u)B - g(u)(Bu)^T - (Bu)g(u)^T)$$

bestimmt ist. Wir setzen  $\Delta u = \delta p = \delta(r + \chi s)$ , wobei  $\delta$  beliebig sein soll, und bestimmen  $\chi$  durch Minimierung des quadratischen Funktionals

$$J(u, \delta(r + \chi s)) = \lambda + \delta(g^T r + \chi g^T s) + \frac{\delta^2}{2}(r^T H r + 2\chi s^T H r + \chi^2 s^T H s)$$

mit  $g = g(u)$  und  $H = H(u)$ . Da  $u^T A s = u^T B s = 0$  gilt, ergibt sich  $g^T s = 0$ . Notwendige Bedingung für die Existenz eines Minimums ist das Verschwinden der ersten Ableitung

$$\frac{\partial}{\partial \chi} J(u, \delta(r + \chi s)) = \delta^2 (s^T H r + \chi s^T H s) = \delta^2 s^T H (r + \chi s) = \delta^2 s^T H p ,$$

also die  $H$ -Konjugiertheit der Vektoren  $s$  und  $p$ . Wegen  $s^T H = 2s^T(A - \lambda B)$  folgt daraus für  $\chi$  die Bestimmungsgleichung

$$\chi = -\frac{s^T H r}{s^T H s} = -\frac{s^T (A r - \lambda B r)}{\mu - \lambda} . \quad (43)$$

Für die zweite Ableitung erhalten wir

$$\frac{\partial^2}{\partial \chi^2} J(u, \delta(r + \chi s)) = \delta^2 s^T H s = 2\delta^2(\mu - \lambda) \quad ,$$

das heißt das so bestimmte  $\chi$  ist wegen  $\mu > \lambda$  für jede nicht verschwindende Korrektur  $\delta$  tatsächlich ein Minimum. Wählen wir nun in jedem Iterationsschritt  $r = -g$ , das heißt  $p = -g + \chi s$ , wobei  $\chi$  aus Gleichung (43) bestimmt wird, so erhalten wir das Verfahren der konjugierten Gradienten zur Minimierung des Rayleigh-Quotienten.

*Bemerkung 14.* Eine andere Wahl des Vektors  $r$ , die wir weiter unten im Zusammenhang mit adaptiven Mehrgitter-Verfahren benötigen werden, ergibt sich aus folgender Betrachtung: analog zur Koordinatenrelaxation von FADDEJEW und FADDEJEW werden die einzelnen Komponenten  $r_k$  des Vektors  $r$  durch Minimierung des quadratischen Funktionals  $J(u, \Delta u)$  in Richtung der Einheitsvektoren  $e_k$  bestimmt, das heißt wir setzen  $\Delta u = r_k e_k$  und minimieren die Funktion

$$J(u, r_k e_k) = \lambda + r_k g_k + \frac{r_k^2}{2} H_{kk}$$

bezüglich  $r_k$ . Als notwendige Bedingung erhalten wir

$$r_k = -\frac{g_k}{H_{kk}} = -\frac{1}{2} \frac{g_k}{A_{kk} - \lambda B_{kk} - 2(Bu)_k g_k} \quad ,$$

wobei wir wieder die Normierung  $u^T B u = 1$  verwenden. Setzen wir nun voraus, daß die Approximation  $u$  schon in einer geeigneten Umgebung des gesuchten Eigenvektors  $u_1$  liegt und für  $u_1$  die Relation  $u_1 \neq e_k$  gilt, so erfüllt zum einen die korrespondierende Eigenwertnäherung  $\lambda$  die Ungleichung  $A_{kk} - \lambda B_{kk} > 0$ , zum anderen sind die Diagonalelemente  $H_{kk}$  von  $H$  alle positiv. Somit wird bei  $r_k$  tatsächlich ein Minimum angenommen, und für hinreichend kleines  $g_k$  haben wir die Entwicklung

$$r_k = -\frac{1}{2} \frac{g_k}{A_{kk} - \lambda B_{kk}} \sum_{m=0}^{\infty} \left( \frac{2(Bu)_k g_k}{A_{kk} - \lambda B_{kk}} \right)^m \quad .$$

Berücksichtigen wir hier nur den ersten Summanden, erhalten wir insgesamt für  $r$  die Darstellung

$$r = -\frac{1}{2} (\text{diag}(A - \lambda B))^{-1} g \quad . \quad (44)$$

Verwendet man allgemein anstelle von  $r = -g$  den Vektor  $r = -C^{-1}g$  in der Methode der konjugierten Gradienten, so nennt man das Verfahren vorkonditioniert und die Matrix  $C$  Vorkonditionierungsmatrix. Die eben beschriebene Methode heißt in Analogie zum Vorgehen bei linearen Gleichungssystemen Jacobi-Vorkonditionierung.

Weitere Varianten der Vorkonditionierung können durch Änderung des zugrundeliegenden Skalarproduktes gewonnen werden. Die Richtung des steilsten Abstiegs des Rayleigh-Quotienten im Punkt  $u$  ist beispielsweise bezüglich des diskreten  $L^2$ - bzw. Energie-Skalarproduktes durch  $r = -B^{-1}g$  bzw.  $r = -(A + \mu B)^{-1}g$  (mit einer geeigneten Spektralverschiebung  $\mu$ ) gegeben.

Wenden wir uns jetzt der Verallgemeinerung des Verfahrens zur Berechnung des zu den kleinsten Eigenwerten korrespondierenden invarianten Unterraumes, das heißt der simultanen Bestimmung der Eigenwerte  $\lambda_1, \dots, \lambda_q$  und der korrespondierenden Eigenvektoren  $u_1, \dots, u_q$ , zu. Dabei wollen wir voraussetzen, daß die gewünschten Eigenwerte separiert vom restlichen Spektrum liegen, das heißt die Relation  $\lambda_j < \lambda_k$  für  $j \leq q < k$  gilt. Die Grundlage für die Herleitung des Algorithmus bildet die adäquate Erweiterung des Courantschen Minimaxprinzips (32) auf ein allgemeineres Minimalprinzip [15] zur Charakterisierung des gesuchten invarianten Unterraumes, welches im folgenden kurz beschrieben werden soll. Die aus den Eigenvektoren gebildete Matrix  $U_1 = (u_1 \ \cdots \ u_q) \in \mathbb{R}^{N \times q}$  erfüllt die Minimaleigenschaft

$$F(U_1) = \min_{\substack{U \in \mathbb{R}^{N \times q} \\ \text{rang}(U)=q}} F(U) = \lambda_1 + \dots + \lambda_q \quad (45)$$

mit dem Funktional

$$F(U) = \text{spur}(\Lambda(U)) \quad , \quad \Lambda(U) = (U^T B U)^{-1} (U^T A U) \quad ,$$

wobei  $\mathbb{R}^{N \times q}$  den Raum aller reellen  $(N \times q)$ -Matrizen bezeichnet. Da ähnliche Matrizen dieselbe Spur besitzen, ergibt sich  $F(U\Theta) = F(U)$  für jede invertierbare Matrix  $\Theta \in \mathbb{R}^{q \times q}$ , das heißt der Minimalwert des Funktional wird von jeder  $(N \times q)$ -Matrix, deren Spaltenvektoren eine Basis des zu den kleinsten Eigenwerten gehörenden invarianten Unterraumes bilden, angenommen. Umgekehrt sehen wir unter Zuhilfenahme des Gradienten

$$G(U) = 2(AU - BU\Lambda(U))(U^T B U)^{-1}$$

von  $F$  im Punkt  $U$ , daß jede  $(N \times q)$ -Matrix mit vollem Rang, für die der Minimalwert des Funktional angenommen wird, zu einer Basis des gesuchten invarianten Unterraumes korrespondiert. Insgesamt erhalten wir also, daß die durch (45) gegebene Charakterisierung den invarianten Unterraum eindeutig bestimmt. Ist nun durch  $\tilde{U}_1 \in \mathbb{R}^{N \times q}$  eine Approximation der Matrix  $U_1$  und durch  $\tilde{P} \in \mathbb{R}^{N \times n}$  eine Matrix, bestehend aus  $n$  Suchrichtungen, mit  $\text{rang}((\tilde{U}_1 \ \tilde{P})) = q + n$  gegeben, so wird analog zu (42) über den Minimierungsansatz

$$F(\hat{U}_1) = \min_{\substack{(\Phi \\ \Psi) \in \mathbb{R}^{(q+n) \times q} \\ \text{rang}((\Phi \\ \Psi))=q}} F(\tilde{U}_1 \Phi + \tilde{P} \Psi) = \hat{\lambda}_1 + \dots + \hat{\lambda}_q \quad (46)$$



eine neue Näherung  $\widehat{U}_1$  berechnet. Es ist  $F(\widetilde{U}_1\Phi + \widetilde{P}\Psi) = \text{spur}((\Xi^T \widetilde{B}\Xi)^{-1}(\Xi^T \widetilde{A}\Xi))$  mit

$$\widetilde{A} = \begin{pmatrix} \widetilde{U}_1 & \widetilde{P} \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} \widetilde{U}_1 & \widetilde{P} \end{pmatrix} \quad , \quad \widetilde{B} = \begin{pmatrix} \widetilde{U}_1 & \widetilde{P} \end{pmatrix}^T B \begin{pmatrix} \widetilde{U}_1 & \widetilde{P} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \Xi = \begin{pmatrix} \Phi \\ \Psi \end{pmatrix} \quad ,$$

wobei  $\widetilde{A}, \widetilde{B} \in \mathbb{R}^{(q+n) \times (q+n)}$  und  $\Xi \in \mathbb{R}^{(q+n) \times q}$  gilt, so daß die Lösung der Minimierungsaufgabe (46) gleichbedeutend ist zur Bestimmung der  $q$  kleinsten Eigenwerte des projizierten Matrixpaares  $(\widetilde{A}, \widetilde{B})$ , das heißt zur Lösung des Eigenwertproblems

$$\begin{aligned} \widetilde{A}\Xi &= \widetilde{B}\Xi\widehat{\Lambda} \\ \Xi^T \widetilde{B}\Xi &= I \quad , \end{aligned} \tag{47}$$

wenn wir noch die Normierung  $\widehat{U}_1^T B \widehat{U}_1 = I$  einführen. Die Matrizen  $\widetilde{A}$  und  $\widetilde{B}$  sind hierbei reell und symmetrisch, die Matrix  $\widetilde{B}$  ist aufgrund des vollen Ranges von  $\begin{pmatrix} \widetilde{U}_1 & \widetilde{P} \end{pmatrix}$  positiv definit.

Wie im Falle der einfachen Rayleigh-Quotienten-Minimierung erhalten wir durch sukzessive Wiederholung des dargelegten Schemas ein Iterationsverfahren, welches eine monoton fallende Folge von Funktionalwerten produziert. Diese iterative Methode zur approximativen Berechnung des zu den Eigenwerten  $\lambda_1, \dots, \lambda_q$  korrespondierenden invarianten Unterraumes wird simultanes Rayleigh-Quotienten-Minimierungsverfahren genannt. Es existieren auch hier verschiedene Varianten dieses Algorithmus. Bei der simultanen Koordinatenrelaxation von SCHWARZ [53] besteht die Suchrichtung  $P$  (wir lassen Tilden und Hüte und den Index 1 fortan wieder weg) aus einem  $n$ -spaltigen Block der  $(N \times N)$ -Einheitsmatrix. Wählen wir  $P = -G(U)$  und damit  $n = q$ , so ergibt sich das simultane Gradienten-Verfahren, wie es beispielsweise von LONGSINE und MCCORMICK in [40] beschrieben ist. Für die Darstellung der Methode der konjugierten Gradienten orientieren wir uns wieder an der Arbeit [15] von DÖHLER. Für die Suchrichtung  $P \in \mathbb{R}^{N \times n}$  mit  $n = q$  wird der Ansatz  $P = R + SX$  mit einer noch zu spezifizierenden Matrix  $R \in \mathbb{R}^{N \times q}$  und der Matrix  $S \in \mathbb{R}^{N \times q}$  gemacht, die den Bedingungen

$$(U \ S)^T A (U \ S) = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad (U \ S)^T B (U \ S) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

mit  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_j)_{j=1, \dots, q}$  und  $M = \text{diag}(\mu_k)_{k=1, \dots, q}$  genügen soll. Diese Matrix  $S$  wird im Laufe der Iteration durch vollständige Lösung des projizierten Eigenwertproblems (47) aus den vorherigen Eigenvektorapproximationen und zugehörigen Suchrichtungen bestimmt, wobei wir  $\lambda_j < \mu_k$  voraussetzen wollen. Durch Minimierung des quadratischen Taylorfunktional von  $F(U)$  läßt sich nun analog zur einfachen Rayleigh-Quotienten-Minimierung eine Bestimmungsgleichung für die Matrix  $X \in \mathbb{R}^{q \times q}$  ableiten. Es stellt sich heraus, daß  $X$  als Lösung der Sylvester-Gleichung

$$MX - X\Lambda = -S^T(AR - BRA) \tag{48}$$

berechnet werden kann. Für die einzelnen Komponenten von  $X$  erhalten wir somit

$$\chi_{kj} = -\frac{s_k^T(Ar_j - \lambda_j Br_j)}{\mu_k - \lambda_j} \quad ,$$

wobei  $s_k$  bzw.  $r_j$  die  $k$ -te bzw.  $j$ -te Spalte von  $S$  bzw.  $R$  bezeichnet. Das Verfahren der konjugierten Gradienten ergibt sich jetzt durch die Wahl  $R = -G = -G(U)$ , das heißt  $P = -G + SX$  mit  $X$  aus Gleichung (48).

*Bemerkung 15.* Ersetzen wir hier den Gradienten  $G$  durch  $C^{-1}G$ , so nennt man die Methode ähnlich wie in Bemerkung 14 vorkonditioniert. Die dort beschriebene Jacobi-Vorkonditionierung erfolgt im simultanen Fall durch Lösung des Gleichungssystems

$$2(\text{diag}(A)R - \text{diag}(B)R\Lambda) = -G \quad , \quad (49)$$

das heißt durch simultane Verwendung von  $q$  Gleichungen der Form (44).

Die bisherigen Untersuchungen dieses Abschnitts fassen wir in dem folgenden Algorithmus zusammen, dem vorkonditionierten Verfahren der konjugierten Gradienten zur simultanen Berechnung der kleinsten Eigenwerte und korrespondierenden Eigenvektoren auf einem Gitter. Der Übersichtlichkeit halber lassen wir die Iterationsindizes weg.

### Algorithmus 2.

- Initialisierung:

- \* Vorgabe von  $U \in \mathbb{R}^{N \times q}$  mit  $U^T B U = I$

- \* setze  $P = R = -C^{-1}(AU - BU\Lambda(U)) \in \mathbb{R}^{N \times q}$

- Iteration für  $m = 1, \dots, \nu$ :

- \* setze  $W = (U \ P)$

- \* bestimme  $Q \in \mathbb{R}^{2q \times 2q}$  und  $\Lambda \in \mathbb{R}^{2q \times 2q}$  aus

$$\begin{aligned} (W^T A W)Q &= (W^T B W)Q\Lambda \\ Q^T (W^T B W)Q &= I \end{aligned} \quad (50)$$

mit  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_j)_{j=1, \dots, 2q}$ , wobei  $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_q < \lambda_{q+1} \leq \dots \leq \lambda_{2q}$

- \* setze  $(U \ S) = WQ$

- \* berechne  $R = -C^{-1}(AU - BU\Lambda(U))$

- \* bestimme  $X \in \mathbb{R}^{q \times q}$  aus

$$\Lambda(S)X - X\Lambda(U) = -S^T(AR - BR\Lambda(U))$$

\* setze  $P = R + SX$

*Bemerkung 16.* Da in jedem Schritt des Iterationsverfahrens ein projiziertes Eigenwertproblem der Form (50) gelöst wird, zählt der Algorithmus zu der in Abschnitt 2.6 dargestellten Klasse der orthogonalen Projektionsmethoden.

Nach Konstruktion des Verfahrens liefert dieses eine monoton fallende Folge von Funktionalwerten, die aufgrund der Beschränktheit des Funktionals nach unten stets konvergent ist. Genaue Bedingungen für die Konvergenz gegen den untersten Eigenwert  $\lambda_1$  im Fall  $q = 1$  sind in der Arbeit von YANG [59] für eine modifizierte Variante des Verfahrens angegeben. Die numerische Erfahrung zeigt, daß die Konvergenzraten im Fall  $C = B$  abhängig sind vom Abstand der gewünschten Eigenwerte  $\lambda_1, \dots, \lambda_q$  zum restlichen Spektrum (jedoch nicht vom Abstand der gesuchten Eigenwerte untereinander) und von der Gitterweite der zugrundeliegenden Triangulierung des Gebietes  $\Omega$  bei der Finite-Elemente-Approximation. Diese Beobachtung wollen wir im folgenden anhand der einfachen Rayleigh-Quotienten-Minimierung ( $q = 1$ ) mittels konjugierter Gradienten näher untersuchen. Dabei setzen wir voraus, daß sämtliche Eigenwerte des Matrixpaares  $(A, B)$  der Größe nach, also gemäß  $\lambda_1 < \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$  angeordnet sind. Da sich das Verfahren asymptotisch wie die Methode der konjugierten Gradienten zur Minimierung quadratischer Funktionale verhält, wird die Konvergenz im wesentlichen durch den Quotienten

$$\rho = \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}$$

mit der modifizierten spektralen Konditionszahl

$$\kappa = \frac{\lambda_N - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

der Hesseschen Matrix  $H(u_1) = 2(A - \lambda_1 B)$  des Rayleigh-Quotienten am Lösungspunkt  $u_1$  bestimmt [47]. Daraus sehen wir zum einen, daß die Konvergenzrate für dicht benachbarte Eigenwerte ( $\lambda_1 \approx \lambda_2$ ) nahe der Eins liegt ( $\rho \approx 1$ ). Aus Theorem 1 wissen wir weiterhin, daß die Eigenwerte des kontinuierlichen Problems eine gegen unendlich strebende Folge bilden. Da die diskreten Eigenwerte obere Schranken für die kontinuierlichen Eigenwerte sind, erhalten wir somit andererseits mit feiner werdender Triangulierung des Gebietes  $\Omega$ , das heißt für  $N \rightarrow \infty$ , die Relation  $\kappa \rightarrow \infty$  und damit  $\rho \rightarrow 1$ . Eine von der Gitterweite und damit von der Anzahl  $N$  der Unbekannten unabhängige Konvergenzrate kann durch eine andere, geeignetere Vorkonditionierung erreicht werden. Wählen wir als Vorkonditionierungsmatrix  $C = A + \mu B$ , wobei die Spektralverschiebung  $\mu$  der Bedingung  $0 < \lambda_1 + \mu$  genügen soll, so ergibt sich für die Konditionszahl die in [54, S. 343] angegebene Relation

$$\kappa = \frac{1 - (\lambda_1 + \mu)/(\lambda_N + \mu)}{1 - (\lambda_1 + \mu)/(\lambda_2 + \mu)},$$

das heißt im Grenzfalle  $N \rightarrow \infty$  die Beziehung

$$\kappa = \frac{1}{1 - \zeta} \quad \text{mit} \quad 0 < \zeta = \frac{\lambda_1 + \mu}{\lambda_2 + \mu} < 1 \quad .$$

Damit erhalten wir als Konvergenzrate für das vorkonditionierte Verfahren

$$\rho_{\text{PCG}} = \frac{(1 - \zeta)^{-\frac{1}{2}} - 1}{(1 - \zeta)^{-\frac{1}{2}} + 1} = \frac{1}{4}\zeta + \frac{1}{8}\zeta^2 + \dots \quad ,$$

welche nur vom Quotienten  $\zeta$  der verschobenen Eigenwerte  $\lambda_1 + \mu$  und  $\lambda_2 + \mu$  abhängig ist.

*Bemerkung 17.* In Abbildung 7 ist  $\rho_{\text{PCG}}$  in Abhängigkeit von  $\zeta$  dargestellt, wobei wir zum Vergleich zusätzlich die Konvergenzrate der spektralverschobenen, inversen Vektoriteration

$$\rho_{\text{IPM}} = \zeta$$

aufgenommen haben. Aus der Grafik ist insbesondere zu erkennen, daß mit dem vorkonditionierten Verfahren der konjugierten Gradienten bei dicht zusammenliegenden Eigenwerten ( $\zeta \approx 1$ ) durch eine kleine Änderung der Spektralverschiebung eine deutlich verbesserte Konvergenzrate als mit der inversen Vektoriteration erzielt werden kann.

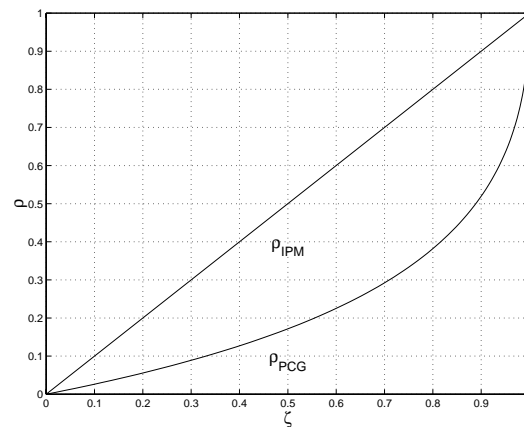


Abbildung 7: Konvergenzraten des vorkonditionierten Verfahrens der konjugierten Gradienten  $\rho_{\text{PCG}}$  und der spektralverschobenen, inversen Vektoriteration  $\rho_{\text{IPM}}$  in Abhängigkeit von  $\zeta$

Da die effiziente Berechnung möglichst guter Approximationen der kontinuierlichen Eigenlösungen die Verwendung einer Folge von adaptiv verfeinerten Triangulierungen erforderlich macht, wird bei Lösung der entsprechenden diskreten Eigenprobleme mit Algorithmus 2 stets eine vorkonditionierte Variante benutzt. Aufbauend auf die eben durchgeführte Analyse wird dabei meist eine approximative Lösung des linearen Gleichungssystems  $(A + \mu B)R = -G$  bestimmt. Eine Untersuchung des vorkonditionierten Verfahrens der konjugierten Gradienten, bei dem zur näherungsweisen Berechnung von  $R$  eine lineare Mehrgittermethode angewandt wird, findet sich in der Arbeit von JUNG et al. [32].

Alternativ zur eben beschriebenen Vorkonditionierung lassen sich von der Gitterweite unabhängige Konvergenzraten durch direkte Anwendung des Mehrgitterkonzepts auf das zu lösende Eigenwertproblem ohne explizite Verwendung einer Spektralverschiebung gewinnen. Dabei wird das Verfahren der konjugierten Gradienten, zunächst ohne die in Bemerkung 15 beschriebene Jacobi-Vorkonditionierung (das heißt  $C = I$ ), als Glättungsverfahren eingesetzt. Im folgenden Beispiel wollen wir dazu zunächst anhand eines einfachen Modellproblems die Glättungseigenschaft von Algorithmus 2 aufzeigen.

**Beispiel 9.** Wir betrachten das Eigenwertproblem

$$-u''(x) = \lambda u(x)$$

auf  $\Omega = (0, 1)$  mit Dirichlet-Randbedingung  $u(0) = u(1) = 0$ . Die kontinuierlichen Lösungen des Problems sind durch  $\lambda_j = \pi^2 j^2$  und  $u_j(x) = \sqrt{2} \sin(\pi j x)$  mit  $j = 1, 2, \dots$  gegeben. Die Diskretisierung mit linearen finiten Elementen über einem äquidistanten Gitter mit der Gitterweite  $h = 1/N$  führt auf die System- bzw. Massenmatrix

$$A = N \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad B = \frac{1}{6N} \begin{pmatrix} 4 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 4 & 1 \\ & & & 1 & 4 \end{pmatrix},$$

wobei  $A, B \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ . Daraus bestimmen sich die diskreten Eigenwerte zu

$$\lambda_j = 12 N^2 \frac{\sin^2(\pi j / (2N))}{2 + \cos(\pi j / N)}, \quad j = 1, \dots, N-1$$

und die Komponenten der korrespondierenden normierten Eigenvektoren zu

$$u_{lj} = \sqrt{\frac{6}{2 + \cos(\pi j / N)}} \sin(\pi j l / N), \quad l = 1, \dots, N-1$$

(den Diskretisierungsparameter  $h$  unterdrücken wir im folgenden wiederum). Zur Illustration der Glättungseigenschaft von Algorithmus 2 im Fall  $q = 1$  (einfache Rayleigh-Quotienten-Minimierung) führen wir die Iteration nicht im Funktionenraum für den Vektor  $u$ , sondern im Koeffizientenraum für den Vektor  $a = (a_j)_{j=1, \dots, N-1}$ , der aus den Koeffizienten der Basisdarstellung

$$u = \sum_{j=1}^{N-1} a_j u_j$$

von  $u$  bezüglich der diskreten Eigenvektoren  $u_j$  gebildet wird, durch. Dabei ist zu beachten, daß das Iterationsverfahren ohne Vorkonditionierung im Funktionenraum in ein Verfahren mit Vorkonditionierung im Koeffizientenraum übergeht, wobei die Komponenten  $c_{kj}$  der Vorkonditionierungsmatrix  $C$  durch  $c_{kj} = u_k^T u_j$  gegeben sind. In unserem speziellen Fall beispielsweise ergibt sich daraus

$$C^{-1} = \text{diag} \left( \frac{2 + \cos(\pi j/N)}{3N} \right)_{j=1, \dots, N-1} .$$

Für die Iteration im Koeffizientenraum ersetzen wir nun in Algorithmus 2 die Systemmatrix  $A$  durch die aus den  $N - 1$  diskreten Eigenwerten bestehende Diagonalmatrix  $D = \text{diag}(\lambda_j)_{j=1, \dots, N-1}$  mit  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_{N-1}$ , die Massenmatrix  $B$  durch die Identität, den iterierten Vektor durch den Koeffizientenvektor  $a$  und die Vorkonditionierungsmatrix entsprechend der oben gemachten Bemerkung. Die Komponenten des Startvektors initialisieren wir gemäß  $a_j = 1/\sqrt{N-1}$  für  $j = 1, \dots, N-1$ . In Abbildung 8 sind für die Werte  $N = 500$  und  $N = 1000$  der Startvektor und die ersten vier Iterierten des Verfahrens im Koeffizientenraum dargestellt.  $\diamond$

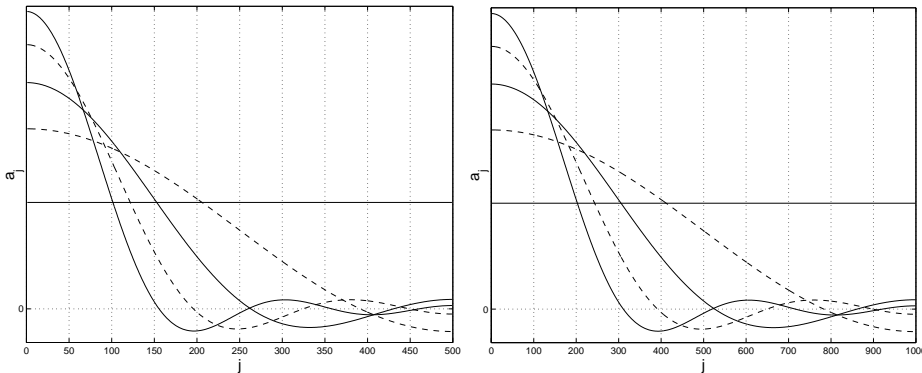


Abbildung 8: Rayleigh-Quotienten-Minimierung mit konjugierten Gradienten im Koeffizientenraum für  $N = 500$  und  $N = 1000$  (horizontale Linie: Startvektor)

Schon durch wenige Schritte des Iterationsverfahrens werden die Anteile in Richtung der Eigenvektoren zu großen Eigenwerten erheblich gedämpft. Wie aus Abbildung 8 ersichtlich, ist dabei das qualitative Glättungsverhalten von der Anzahl der Freiheitsgrade  $N$  unabhängig. Zur Behandlung der Anteile in Richtung der Eigenvektoren zu den kleineren Eigenwerten minimiert man das oben eingeführte Funktional  $F(U)$  über den Ansatz (46) simultan in Richtung der Finite-Elemente-Basisfunktionen eines im aktuellen Feingitterraum enthaltenen Grobgitterraumes der Dimension  $n$ . Die Matrix  $P \in \mathbb{R}^{N \times n}$  der Suchrichtungen besteht dabei spaltenweise aus der Koordinatendarstellung der Grobgitterbasisfunktionen in Bezug auf die Feingitterbasisfunktionen, ist also die im Mehrgitterkontext üblicherweise auftretende Prolongationsmatrix.

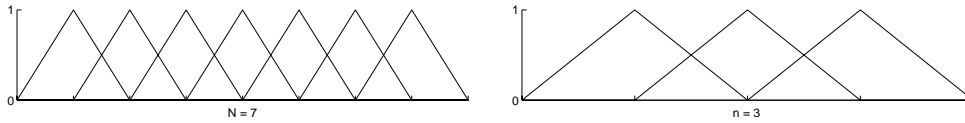


Abbildung 9: Feingitter- und Grobgitterbasisfunktionen über einem Intervall

**Beispiel 10.** Für die in Abbildung 9 gezeigte Feingitter-Grobgitter-Konstellation erhalten wir beispielsweise die Prolongationsmatrix

$$P = \begin{pmatrix} 1/2 & & & & & & \\ 1 & & & & & & \\ 1/2 & 1/2 & & & & & \\ & 1 & & & & & \\ & 1/2 & 1/2 & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & 1/2 & & & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & 1/2 & \end{pmatrix} . \quad \diamond$$

Wie wir weiter oben gesehen haben, ist die Lösung der Minimierungsaufgabe (46) äquivalent zur Berechnung der  $q$  kleinsten Eigenwerte des projizierten Matrixpaares  $(W^T A W, W^T B W)$  mit  $W = \begin{pmatrix} U & P \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times (q+n)}$ , wobei  $U$  die aktuelle Iterierte bezeichnet. Das bedeutet, daß die Bestimmung der Grobgitter-Korrekturen zur Behandlung der niederfrequenten Anteile strukturell auf dasselbe Problem wie das ursprünglich zu lösende führt. Daher kann dieses bei Vorhandensein einer weiteren Gitterebene nun ebenfalls nach dem Prinzip der Glättung und Bestimmung einer Grobgitter-Korrektur näherungsweise gelöst werden. Aufgrund der speziellen Struktur der projizierten Matrizen wird dabei die Matrix

$$\begin{pmatrix} 0 \\ P' \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(q+n) \times n'} \quad (51)$$

als Suchrichtungsmatrix gewählt, wobei  $P'$  die zum aktuellen und nächsten Grobgitter korrespondierende Prolongationsmatrix ist. Somit erfolgt die Berechnung der nächsten Grobgitter-Korrektur insgesamt auf der Grundlage des projizierten Matrixpaares  $((WW')^T A(WW'), (WW')^T B(WW'))$  mit

$$W' = \begin{pmatrix} \Phi & 0 \\ \Psi & P' \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(q+n) \times (q+n')} .$$

Unter Beachtung von  $WW' = (U\Phi + P\Psi \quad PP') \in \mathbb{R}^{N \times (q+n')}$  sehen wir zum einen, daß die aktuellen Korrekturen  $\Phi$  und  $\Psi$  im nächsten Grobgitter-Korrekturschritt bereits berücksichtigt werden, und zum anderen, daß die Struktur der projizierten Matrizen erhalten bleibt. Bei Existenz noch weiterer Gitterebenen kann daher das eben beschriebene Vorgehen rekursiv fortgesetzt werden. Die algorithmische Umsetzung dieser Idee ist durch den folgenden Mehrgitter-Zyklus gegeben.

**Algorithmus 3.**

$[U_l, \Lambda_l] = \mathbf{MGM}(A_l, B_l, U_l, \Lambda_l, l)$

1. Vorglättung mit Algorithmus 2:  $U_l \rightarrow \tilde{U}_l, \Lambda_l \rightarrow \tilde{\Lambda}_l$
2. Grobgitter-Korrektur:  $\tilde{U}_l \rightarrow \hat{U}_l, \tilde{\Lambda}_l \rightarrow \hat{\Lambda}_l$ 
  - berechne  $A_{l-1} = W_l^T A_l W_l$  und  $B_{l-1} = W_l^T B_l W_l$ , wobei für
    - \*  $l = l_{\max}$ :  $W_l = \begin{pmatrix} \tilde{U}_l & P_l \end{pmatrix}$
    - \*  $l < l_{\max}$ :  $W_l = \begin{pmatrix} \tilde{U}_l & 0 \\ \tilde{\Psi}_l & P_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\Phi}_l & 0 \\ \tilde{\Psi}_l & P_l \end{pmatrix}$
  - falls
    - \*  $l > 1$ :
      - Initialisierung:  $U_{l-1} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}, \Lambda_{l-1} = \tilde{\Lambda}_l$
      - Iteration für  $m = 1, \dots, \mu$ :  
 $[U_{l-1}, \Lambda_{l-1}] = \mathbf{MGM}(A_{l-1}, B_{l-1}, U_{l-1}, \Lambda_{l-1}, l-1)$
    - \*  $l = 1$ :
      - exakte Lösung von  $A_0 U_0 = B_0 U_0 \Lambda_0, U_0^T B_0 U_0 = I$
  - setze  $\hat{U}_l = W_l U_{l-1}, \hat{\Lambda}_l = \Lambda_{l-1}$
3. Nachglättung mit Algorithmus 2:  $\hat{U}_l \rightarrow U_l, \hat{\Lambda}_l \rightarrow \Lambda_l$

*Bemerkung 18.* Die Matrix  $\hat{U}_l$  auf jeder Stufe der Mehrgitterrekursion ergibt sich für



$$* \quad l = l_{\max} \text{ zu } \widehat{U}_l = \begin{pmatrix} \widetilde{U}_l & P_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{l-1} \\ \Psi_{l-1} \end{pmatrix} = \widetilde{U}_l \Phi_{l-1} + P_l \Psi_{l-1} \text{ und}$$

$$* \quad l < l_{\max} \text{ zu } \widehat{U}_l = \begin{pmatrix} \widetilde{\Phi}_l & 0 \\ \widetilde{\Psi}_l & P_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{l-1} \\ \Psi_{l-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{\Phi}_l \Phi_{l-1} \\ \widetilde{\Psi}_l \Phi_{l-1} + P_l \Psi_{l-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\Phi}_l \\ \widehat{\Psi}_l \end{pmatrix}.$$

In Algorithmus 3 bezeichnet  $A_l$  bzw.  $B_l$  (mit dem Gitterparameter  $0 \leq l \leq l_{\max}$ ) die (projizierte) System- bzw. Massenmatrix, welche zum Gitter mit der Gitterweite  $h_l$  korrespondiert. Die  $q$ -spaltige Matrix  $U_l$  ist jeweils die gesuchte Koeffizientenmatrix, die Matrix  $\Lambda_l$  eine Diagonalmatrix mit den gesuchten Eigenwerten  $\lambda_1, \dots, \lambda_q$  in der Diagonalen, und die Matrix  $P_l$  die Prolongationsmatrix zwischen den Gittern der Gitterweite  $h_l$  und  $h_{l-1}$ . Durch vollständige Induktion erhalten wir für die projizierten Matrizen die Darstellungen

$$A_{l-1} = (V_l \quad Q_l)^T A (V_l \quad Q_l) \quad \text{und} \quad B_{l-1} = (V_l \quad Q_l)^T B (V_l \quad Q_l)$$

mit

$$* \quad V_l = \widetilde{U}_l \text{ und } Q_l = P_l \text{ für } l = l_{\max},$$

$$* \quad V_l = V_{l+1} \widetilde{\Phi}_l + Q_{l+1} \widetilde{\Psi}_l \text{ und } Q_l = Q_{l+1} P_l \text{ für } l < l_{\max}.$$

Auf jeder Stufe des Mehrgitter-Zyklus wird daher ein projiziertes Eigenwertproblem der Form (47) durch rekursive Benutzung von Algorithmus 2 näherungsweise ( $l > 1$ ) bzw. exakt ( $l = 1$ ) gelöst, wobei sämtliche bereits bestimmten Korrekturen berücksichtigt werden. Da in jedem Schritt des Glättungsverfahrens wiederum die Lösung eines projizierten Eigenwertproblems bestimmt wird, ergibt sich insgesamt beim Durchlaufen des Mehrgitter-Zyklus aufgrund der Äquivalenz des projizierten Eigenproblems (47) und des Minimierungsproblems (46) eine monoton fallende Folge von Funktionalwerten. Im Fall  $q = 1$  fällt die Rekursion mit der monotonen Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung von MANDEL und MCCORMICK [42] zusammen. Abschließend wollen wir noch die vollständige Mehrgitter-Prozedur angeben.

#### Algorithmus 4.

- Initialisierung:

$$* \quad \text{Vorgabe von } U \in \mathbb{R}^{N \times q} \text{ mit } U^T B U = I, U^T A U = \Lambda$$

- Iteration:

$$* \quad \text{falls } \|AU - BU\Lambda\|_{\text{diag}(B)^{-1}} > \text{tol: } [U, \Lambda] = \mathbf{MGM}(A, B, U, \Lambda, l_{\max})$$

*Bemerkung 19.* Das Abbruchkriterium ergibt sich hierbei durch Übergang vom Eigenwertproblem (40) zum speziellen Eigenwertproblem  $CX = X\Lambda$ ,  $X^T X = I$  mit  $C = R^{-T} A R^{-1}$  und  $X = RU$ , wobei  $R$  aus der Cholesky-Zerlegung  $B = R^T R$  bestimmt wird, über die Gleichungskette

$$\begin{aligned} \|CX - X\Lambda\| &= \sqrt{\lambda_{\max}((CX - X\Lambda)^T(CX - X\Lambda))} \\ &= \sqrt{\lambda_{\max}((AU - BU\Lambda)^T R^{-1} R^{-T} (AU - BU\Lambda))} \\ &= \|AU - BU\Lambda\|_{B^{-1}} \quad . \end{aligned}$$

Die Bestimmung der Lösung der so auftretenden linearen Gleichungssysteme mit der Koeffizientenmatrix  $B$  wird nun in Algorithmus 4 nur näherungsweise durch einen Schritt des linearen Jacobi-Verfahrens zum Startwert 0 durchgeführt, das heißt  $\|\cdot\|_{B^{-1}}$  durch  $\|\cdot\|_{\text{diag}(B)^{-1}}$  ersetzt.

Die numerische Erfahrung zeigt, daß die Konvergenzraten des Verfahrens unabhängig von der Gitterweite sind, das heißt die benötigte Anzahl an Mehrgitter-Zyklen zum Unterschreiten einer gewünschten Genauigkeit  $\text{tol}$  ist unabhängig von der Verfeinerungstiefe  $l_{\max}$ . Da jeder Schritt des Glättungsverfahrens (Algorithmus 2) nur einen Aufwand an Operationen proportional zur Anzahl der Freiheitsgrade benötigt und die Berechnung der projizierten Matrizen  $A_{l-1}$ ,  $B_{l-1}$  auf rekursivem Wege erfolgt, ist der benötigte Aufwand pro Zyklus insgesamt proportional zum Parameter  $N$ . Zusammen mit der zuvor erwähnten Unabhängigkeit der Iterationszahl von der Gitterweite erhalten wir somit die optimale Komplexität der Mehrgitter-Methode.

*Bemerkung 20.* Insbesondere im Zusammenhang mit stark nichtuniformen (adaptiven) Gittern und großen Sprüngen in den Funktionswerten der in der Helmholtzgleichung auftretenden Funktion  $f$  beobachtet man bei numerischen Experimenten im Vergleich zur Glättung ohne Vorkonditionierung eine wesentliche Verbesserung der Konvergenzraten, falls der Glättungsalgorithmus mit der in Bemerkung 15 angegebenen simultanen Jacobi-Vorkonditionierung versehen wird. In Übereinstimmung mit (51) benutzen wir dabei Gleichung (49) im Fall  $l < l_{\max}$  nur zur Berechnung der Zeilen von  $R$  mit Index größer als  $q$ , während die ersten  $q$  Zeilen von  $R$  gleich Null gesetzt werden.

Eine theoretische Untersuchung des Konvergenzverhaltens der Mehrgitter-Methode im Fall  $q = 1$  (einfache Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung) findet sich für den Zweigitter-Algorithmus in dem Artikel von MCCORMICK [43], für den Mehrgitter-Algorithmus in der Arbeit von CAI et al. [9] (wobei allerdings als Glättungsverfahren eine linearisierte Variante von Algorithmus 2 zugrunde gelegt wird).

*Bemerkung 21.* Im Gegensatz zu der in Abschnitt 3.1 dargestellten Mehrgitter-Methode von HACKBUSCH sind in Algorithmus 3 in jedem Glättungsschritt und bei jeder Grobgitter-Korrekturbestimmung die Eigenwertnäherungen ebenfalls Unbekannte, die automatisch beim Durchlaufen des Zyklus berechnet werden. Außerdem sind in der

durch Algorithmus 3 beschriebenen Mehrgitter-Rekursion keine Projektionen bezüglich der (approximativen) Eigenvektoren gröberer Gitter notwendig. Der wesentliche strukturelle Unterschied beider Verfahren liegt jedoch in der bereits oben bemerkten Tatsache, daß durch Algorithmus 3 eine monoton fallende Folge von Funktionalwerten erzeugt wird, die aufgrund der Beschränktheit des Funktionals nach unten stets konvergent ist. Diese Eigenschaft verleiht dem Mehrgitter-Minimierungsverfahren eine wesentlich höhere Robustheit. Ein numerischer Vergleich zwischen dem Verfahren von HACKBUSCH und der Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung von MANDEL und MCCORMICK im Zusammenhang mit adaptiv erzeugten Triangulierungen ist in dem Artikel [13] anhand eines einfachen, eindimensionalen Testbeispiels dokumentiert. Bei der dort angegebenen Testrechnung bestätigte sich zum einen die erwartete höhere Robustheit der Rayleigh-Quotienten-Minimierung gegenüber HACKBUSCHS Verfahren, zum anderen ergaben sich für beide Methoden asymptotisch gleiche Konvergenzraten. Diese zweite Beobachtung läßt sich dadurch erklären, daß das Verfahren von HACKBUSCH als Linearisierung der Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung gedeutet werden kann [42].

### 3.3 Nichtselbstadjungierte Eigenwertprobleme

Wir kommen jetzt zur Erweiterung der im vorigen Abschnitt dargestellten Mehrgitter-Methode auf den nichtselbstadjungierten Fall (unter Zugrundelegung des unitären Vektorraumes  $\mathbb{C}^N$ ). Das zu lösende Problem ist nunmehr von der Gestalt

$$\begin{aligned} AU &= BUT \\ U^*BU &= I \quad , \end{aligned} \tag{52}$$

wobei wir die  $(N \times N)$ -Matrix  $A$  als nichtselbstadjungiert, die  $(N \times N)$ -Matrix  $B$  als selbstadjungiert und positiv definit voraussetzen wollen. Die  $(q \times q)$ -Matrix  $T$  ist eine obere Dreiecksmatrix mit den gesuchten  $q$  Eigenwerten mit kleinsten Realteilen in der Diagonalen, die  $(N \times q)$ -Matrix  $U$  besteht aus den dazu korrespondierenden Schurvektoren. Strukturell haben wir also dasselbe Problem wie im selbstadjungierten Fall (40), nämlich die Berechnung einer Basis des zu bestimmten Eigenwerten korrespondierenden invarianten Unterraumes, zu lösen (wobei wir wegen Bemerkung 12 auf Seite 31 als gesuchte Basis die aus Schurvektoren bestehende wählen). Im Unterschied zum selbstadjungierten Problem ist diese Basis jedoch nicht durch ein Minimalprinzip charakterisiert. Aus Abschnitt 2.3 wissen wir allerdings andererseits, daß alle weiteren Eigenschaften des selbstadjungierten Problems (wie zum Beispiel diskretes Spektrum, Existenz einer Eigenbasis) im nichtselbstadjungierten Fall erhalten bleiben. Da zwar die Charakterisierung durch die Minimaleigenschaft zur Herleitung der Mehrgitter-Methode für den selbstadjungierten Fall benutzt wurde, jedoch das Minimierungsproblem nicht mehr explizit in den Algorithmen des letzten Abschnittes auftaucht,

erwarten wir daher insgesamt, daß die prinzipielle Struktur der Mehrgitter-Methode im nichtselbstadjungierten Fall beibehalten werden kann. Die Strategie zur Verallgemeinerung der Algorithmen 2 und 3 auf den nichtselbstadjungierten Fall besteht nun konkret darin, die jeweils auftretenden projizierten Eigenwertprobleme der Form (47) durch entsprechende projizierte Schurprobleme der Gestalt

$$\begin{aligned}\tilde{A}\Xi &= \tilde{B}\Xi\hat{T} \\ \Xi^*\tilde{B}\Xi &= I\end{aligned}\tag{53}$$

mit

$$\tilde{A} = (U \ P)^* A (U \ P) \quad \text{und} \quad \tilde{B} = (U \ P)^* B (U \ P)$$

zu ersetzen, wobei  $U \in \mathbb{C}^{N \times q}$  die Matrix der aktuellen Schurvektornäherungen und  $P \in \mathbb{C}^{N \times n}$  eine Matrix, gebildet aus  $n$  Suchrichtungen, mit  $\text{rang}((U \ P)) = q + n$  ist. Dabei wählen wir  $\Xi \in \mathbb{C}^{(q+n) \times q}$  und die obere Dreiecksmatrix  $\hat{T} \in \mathbb{C}^{q \times q}$  so, daß in der Diagonalen von  $\hat{T}$  die  $q$  Eigenwerte von  $(\tilde{A}, \tilde{B})$  mit kleinsten Realteilen stehen.

Wir beginnen mit der Verallgemeinerung der Glättungsroutine (Algorithmus 2). In Analogie zum Verfahren der konjugierten Gradienten wird hierbei für die Suchrichtungsmatrix  $P \in \mathbb{C}^{N \times q}$  der Ansatz  $P = R + SX$  gemacht. Für die Matrix  $U \in \mathbb{C}^{N \times q}$  der approximativen Schurvektoren und die Matrix  $S \in \mathbb{C}^{N \times q}$  werden die Relationen

$$(U \ S)^* A (U \ S) = \begin{pmatrix} T_1 & T_{12} \\ 0 & T_2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad (U \ S)^* B (U \ S) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

mit den oberen Dreiecksmatrizen  $T_1$  und  $T_2$  und  $\Re\tau_{1,jj} < \Re\tau_{2,kk}$  vorausgesetzt. Die Berechnung von  $S$  erfolgt dabei durch vollständige Lösung des projizierten Schurproblems (53) aus den vorherigen Schurvektornäherungen und den dazugehörigen Suchrichtungen. Die Matrix  $R \in \mathbb{C}^{N \times q}$  ist zunächst beliebig, die Bestimmung der Matrix  $X \in \mathbb{C}^{q \times q}$  erfolgt in Verallgemeinerung des im letzten Abschnitt für den selbstadjungierten Fall dargestellten Vorgehens (der Minimierung eines quadratischen Funktionals) mit dem Ritz-Galerkin-Verfahren über das lineare Gleichungssystem

$$S^* A (U + \delta P) = S^* B (U + \delta P) T_1, \quad \delta \in \mathbb{C},$$

welches aufgrund der obigen Voraussetzungen äquivalent in die Sylvester-Gleichung

$$T_2 X - X T_1 = -S^* (A R - B R T_1) = Y$$

umgeformt werden kann. Da nun die Matrizen  $T_1$  und  $T_2$  obere Dreiecksgestalt haben, ergibt sich daraus für die Komponenten von  $X$  die leicht auswertbare Formel

$$\chi_{kj} = \frac{v_{kj} - \sum_{l=k+1}^q \tau_{2,kl} \chi_{lj} + \sum_{l=1}^{j-1} \chi_{kl} \tau_{1,lj}}{\tau_{2,kk} - \tau_{1,jj}},$$

wobei  $v_{kj}$  die entsprechende Komponente von  $Y$  bezeichnet (der Index  $j$  durchläuft dabei in einer äußeren Schleife die Werte  $j = 1, 2, \dots, q$ , der Index  $k$  in einer inneren Schleife die Werte  $k = q, q-1, \dots, 1$ ). Die volle Erweiterung von Algorithmus 2 zur Behandlung nichtselbstadjungierter Eigenwertprobleme erhalten wir schließlich, indem wir  $R = -C^{-1}(AU - BUT(U))$  mit  $T(U) = U^*AU = T_1$  setzen (die Matrix  $C$  ist wiederum eine Vorkonditionierungsmatrix, auf deren Wahl wir weiter unten eingehen werden). Zusammengefaßt ergibt sich so der folgende

### Algorithmus 5.

- Initialisierung:
  - \* Vorgabe von  $U \in \mathbb{C}^{N \times q}$  mit  $U^*BU = I$
  - \* setze  $P = R = -C^{-1}(AU - BUT(U)) \in \mathbb{C}^{N \times q}$
- Iteration für  $m = 1, \dots, \nu$ :
  - \* setze  $W = \begin{pmatrix} U & P \end{pmatrix}$
  - \* bestimme  $Q \in \mathbb{C}^{2q \times 2q}$  und  $T \in \mathbb{C}^{2q \times 2q}$  aus

$$\begin{aligned} (W^*AW)Q &= (W^*BW)QT \\ Q^*(W^*BW)Q &= I \quad , \end{aligned} \tag{54}$$

wobei  $T$  obere Dreiecksmatrix mit Diagonalelementen  $\lambda_j$ , sortiert nach aufsteigenden Realteilen gemäß  $\Re\lambda_1 \leq \dots \leq \Re\lambda_q < \Re\lambda_{q+1} \leq \dots \leq \Re\lambda_{2q}$

- \* setze  $\begin{pmatrix} U & S \end{pmatrix} = WQ$
- \* berechne  $R = -C^{-1}(AU - BUT(U))$
- \* bestimme  $X \in \mathbb{C}^{q \times q}$  aus

$$T(S)X - XT(U) = -S^*(AR - BRT(U))$$

- \* setze  $P = R + SX$

*Bemerkung 22.* In jedem Schritt des Iterationsverfahrens sind bei der Lösung des projizierten Schurproblems (54) die Diagonalelemente einer oberen Dreiecksmatrix nach der Größe ihrer Realteile zu sortieren. Da sich die Anzahl  $q$  der gewünschten Eigenwerte in den von uns betrachteten Fällen stets in der Größenordnung  $q = 1, \dots, 10$  bewegt, benutzen wir dazu in Algorithmus 5 als Sortierroutine den einfachen „bubble-sort“-Algorithmus [2, S. 176]. Nach einer Idee von RUHE [46] erfolgt das dabei eventuell notwendige paarweise Vertauschen benachbarter Diagonalelemente durch komplexe

Givens-Rotationen. Das wesentliche Prinzip wollen wir hier nur am Tausch der Diagonalelemente einer oberen  $(2 \times 2)$ -Dreiecksmatrix darstellen. Es ist eine unitäre Matrix  $Q$ , das heißt eine Matrix  $Q$  mit  $Q^*Q = I$  gesucht, so daß

$$Q^* \begin{pmatrix} \lambda_1 & \tau_{12} \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} Q = \begin{pmatrix} \lambda_2 & \tau'_{12} \\ 0 & \lambda_1 \end{pmatrix}$$

gilt. Aus dem Ansatz

$$Q = \begin{pmatrix} \alpha & \bar{\beta} \\ -\beta & \bar{\alpha} \end{pmatrix}$$

lassen sich nun leicht die Komponenten von  $Q$  bestimmen, wobei zur Vermeidung von Exponentenüberlauf zwischen den Fällen

- (i)  $|\lambda_1 - \lambda_2| \leq |\tau_{12}|$ :  $\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + |\gamma|^2}}$ ,  $\beta = \gamma\alpha$  mit  $\gamma = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\tau_{12}}$  und
- (ii)  $|\lambda_1 - \lambda_2| > |\tau_{12}|$ :  $\beta = \frac{1}{\sqrt{1 + |\gamma|^2}}$ ,  $\alpha = \gamma\beta$  mit  $\gamma = \frac{\tau_{12}}{\lambda_1 - \lambda_2}$

zu unterscheiden ist.

Das durch Algorithmus 5 beschriebene Verfahren zählt zu der Klasse der orthogonalen Projektionsmethoden und kann als spezielle Variante eines (vorkonditionierten) Einschritt-Block-Arnoldi-Verfahrens interpretiert werden (vergleiche dazu auch Algorithmus 1 auf Seite 33). Numerische Experimente zeigen, daß schon durch wenige Schritte des Iterationsverfahrens mit  $C = I$  die hochfrequenten Anteile des iterierten Vektors stark gedämpft werden, der Algorithmus also über eine Glättungseigenschaft verfügt. Zur Behandlung der niederfrequenten Anteile greifen wir jetzt wie in Abschnitt 3.2 auf das direkte Mehrgitterkonzept zurück. Wir setzen  $W = (U \ P)$ , wobei die Matrix  $U$  die aktuellen Schurvektorapproximationen enthält und die Matrix  $P$  die Prolongationsmatrix zwischen dem aktuellen Feingitter und dem nächstgrößeren Gitter ist, und lösen zur Bestimmung der Grobgitter-Korrektur das Schurproblem zum projizierten Matrixpaar  $(W^*AW, W^*BW)$ , das heißt berechnen den zu den  $q$  Eigenwerten mit kleinsten Realteilen korrespondierenden invarianten Unterraum von  $(W^*AW, W^*BW)$ . Da nun dieses Grobgitter-Korrekturproblem wiederum von der gleichen Bauart wie das ursprünglich zu lösende Problem ist, kann wie im selbstadjungierten Fall unter Beachtung der speziellen Struktur der projizierten Matrizen eine Mehrgitter-Rekursion, hier in Form von Schurproblemen fallender Dimension, aufgebaut werden. Diese ist im folgenden Algorithmus realisiert.

**Algorithmus 6.**

$$[U_l, T_l] = \mathbf{MGM}(A_l, B_l, U_l, T_l, l)$$

- 
1. Vorglättung mit Algorithmus 5:  $U_l \rightarrow \tilde{U}_l, T_l \rightarrow \tilde{T}_l$
  2. Grobgitter-Korrektur:  $\tilde{U}_l \rightarrow \hat{U}_l, \tilde{T}_l \rightarrow \hat{T}_l$ 
    - berechne  $A_{l-1} = W_l^* A_l W_l$  und  $B_{l-1} = W_l^* B_l W_l$ , wobei für
      - \*  $l = l_{\max}$ :  $W_l = \begin{pmatrix} \tilde{U}_l & P_l \end{pmatrix}$
      - \*  $l < l_{\max}$ :  $W_l = \begin{pmatrix} \tilde{U}_l & 0 \\ & P_l \end{pmatrix}$
    - falls
      - \*  $l > 1$ :
        - Initialisierung:  $U_{l-1} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}, T_{l-1} = \tilde{T}_l$
        - Iteration für  $m = 1, \dots, \mu$ :  
 $[U_{l-1}, T_{l-1}] = \mathbf{MGM}(A_{l-1}, B_{l-1}, U_{l-1}, T_{l-1}, l-1)$
      - \*  $l = 1$ :
        - exakte Lösung von  $A_0 U_0 = B_0 U_0 T_0, U_0^* B_0 U_0 = I$
    - setze  $\hat{U}_l = W_l U_{l-1}, \hat{T}_l = T_{l-1}$
  3. Nachglättung mit Algorithmus 5:  $\hat{U}_l \rightarrow U_l, \hat{T}_l \rightarrow T_l$

Für eine Erläuterung der in Algorithmus 6 vorkommenden Matrizen verweisen wir auf die Ausführungen zu Algorithmus 3, wobei die dort auftretenden Diagonalmatrizen  $\Lambda_l$  durch die oberen Dreiecksmatrizen  $T_l \in \mathbb{C}^{q \times q}$  (mit den Approximationen der  $q$  Eigenwerte mit kleinsten Realteilen in der Diagonalen) zu ersetzen sind. Die projizierten System- bzw. Massenmatrizen sind hier von der Form

$$A_{l-1} = \begin{pmatrix} V_l & Q_l \end{pmatrix}^* A \begin{pmatrix} V_l & Q_l \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad B_{l-1} = \begin{pmatrix} V_l & Q_l \end{pmatrix}^* B \begin{pmatrix} V_l & Q_l \end{pmatrix} \quad ,$$

das heißt auf jeder Stufe des durch Algorithmus 6 beschriebenen Mehrgitter-Zyklus wird unter Berücksichtigung aller bereits bestimmten Korrekturen ein projiziertes Schurproblem der Form (53) (näherungsweise) gelöst. Die vollständige Mehrgitter-Prozedur für den nichtselbstadjungierten Fall ist schließlich gegeben durch

### Algorithmus 7.

- Initialisierung:
  - \* Vorgabe von  $U \in \mathbb{C}^{N \times q}$  mit  $U^* B U = I, U^* A U = T$
- Iteration:
  - \* falls  $\|AU - BUT\|_{\text{diag}(B)^{-1}} > \text{tol}$ :  $[U, T] = \mathbf{MGM}(A, B, U, T, l_{\max})$

*Bemerkung 23.* Das Abbruchkriterium in Algorithmus 7 ergibt sich dabei analog wie in Bemerkung 19 für den selbstadjungierten Fall dargestellt. Eine Untersuchung zur Güte der Eigenwertnäherungen und des (durch die Spaltenvektoren von  $U$  aufgespannten) korrespondierenden approximativen invarianten Unterraumes in Abhängigkeit von der Größe des Residuums  $AU - BUT$  ist in dem Artikel von KAHAN et al. [33] enthalten. Dort ist gezeigt, daß die näherungsweise Eigenlösungen  $U$  und  $T$  des Matrixpaares  $(A, B)$  als exakte Eigenlösungen eines gestörten Matrixpaares angesehen werden können, wobei die Größe der Störung durch die Norm des Residuums gegeben ist.

Wie wir an den in Kapitel 4 durchgerechneten Beispielen sehen werden, ist die Konvergenzrate des Verfahrens und damit die zum Erreichen einer geforderten Genauigkeit benötigte Anzahl an Mehrgitter-Zyklen unabhängig von der Gitterweite der zugrundeliegenden Triangulierung. Da weiterhin der Rechenaufwand pro Zyklus proportional zum Parameter  $N$  ist, erhalten wir so auch im nichtselbstadjungierten Fall die (allerdings nur experimentell belegte) optimale Komplexität der Mehrgitter-Methode.

*Bemerkung 24.* Ähnlich wie im selbstadjungierten Fall beobachten wir eine deutliche Verbesserung der Konvergenzraten des Verfahrens, falls der Glättungsalgorithmus 5 mit einer geeigneten Vorkonditionierung ausgestattet wird. In Verallgemeinerung der in Bemerkung 15 angegebenen Jacobi-Vorkonditionierung wird dabei die Berechnung von  $R$  auf der Grundlage des Gleichungssystems

$$\text{diag}(A)R - \text{diag}(B)RT = -(AU - BUT) \quad (55)$$

durchgeführt. Wegen der speziellen Struktur der projizierten Matrizen verwenden wir Gleichung (55) im Fall  $l < l_{\max}$  nur zur Bestimmung der Komponenten von  $R$  mit Zeilenindex größer als  $q$ , und setzen die ersten  $q$  Zeilen von  $R$  gleich Null.

Aus der Struktur der im Mehrgitter-Algorithmus 6 auftretenden Matrizen  $A_{l-1}$  und  $B_{l-1}$  und aus der bereits oben bemerkten Zugehörigkeit des Glättungsalgorithmus 5 zur Klasse der orthogonalen Projektionsmethoden erkennen wir, daß das Mehrgitter-Verfahren ausschließlich auf der Lösung projizierter Probleme der Form (34) basiert, also insgesamt zu den in Abschnitt 2.6 beschriebenen orthogonalen Projektionsmethoden zählt. Analog zu den dort dargestellten Krylovraum-Methoden läßt sich nun auch ein Mehrgitter-Verfahren konstruieren, welches auf „schiefen“ Projektionen, das heißt der sukzessiven Lösung projizierter Probleme der Gestalt (37) beruht. Der Vollständigkeit halber wollen wir für dieses Verfahren noch die Mehrgitter-Rekursion angeben, ohne allerdings weiter auf Details, wie zum Beispiel die Wahl eines geeigneten Glätters, einzugehen.

### Algorithmus 8.

$$[U_l, V_l, D_l] = \text{MGM}(A_l, B_l, U_l, V_l, D_l, l)$$

1. Vorglättung:  $U_l \rightarrow \tilde{U}_l, V_l \rightarrow \tilde{V}_l, D_l \rightarrow \tilde{D}_l$



2. Grobgitter-Korrektur:  $\tilde{U}_l \rightarrow \hat{U}_l$ ,  $\tilde{V}_l \rightarrow \hat{V}_l$ ,  $\tilde{D}_l \rightarrow \hat{D}_l$

- berechne  $A_{l-1} = \widehat{W}_l^* A_l W_l$  und  $B_{l-1} = \widehat{W}_l^* B_l W_l$ , wobei für
  - \*  $l = l_{\max}$ :  $W_l = \begin{pmatrix} \tilde{U}_l & P_l \end{pmatrix}$ ,  $\widehat{W}_l = \begin{pmatrix} \tilde{V}_l & Q_l \end{pmatrix}$
  - \*  $l < l_{\max}$ :  $W_l = \begin{pmatrix} \tilde{U}_l & 0 \\ & P_l \end{pmatrix}$ ,  $\widehat{W}_l = \begin{pmatrix} \tilde{V}_l & 0 \\ & Q_l \end{pmatrix}$
- falls
  - \*  $l > 1$ :
    - Initialisierung:  $U_{l-1} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $V_{l-1} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $D_{l-1} = \tilde{D}_l$
    - Iteration für  $m = 1, \dots, \mu$ :
 
$$[U_{l-1}, V_{l-1}, D_{l-1}] = \mathbf{MGM}(A_{l-1}, B_{l-1}, U_{l-1}, V_{l-1}, D_{l-1}, l-1)$$
  - \*  $l = 1$ :
    - exakte Lösung von  $A_0 U_0 = B_0 U_0 D_0$ ,  $A_0^* V_0 = B_0^* V_0 \overline{D}_0$ ,  $V_0^* B_0 U_0 = I$
- setze  $\hat{U}_l = W_l U_{l-1}$ ,  $\hat{V}_l = \widehat{W}_l V_{l-1}$ ,  $\hat{D}_l = D_{l-1}$

3. Nachglättung:  $\hat{U}_l \rightarrow U_l$ ,  $\hat{V}_l \rightarrow V_l$ ,  $\hat{D}_l \rightarrow D_l$

Dabei enthalten die  $q$ -spaltigen Matrizen  $U_l$  jeweils die gesuchten Koeffizienten der rechten Eigenvektoren und die  $q$ -spaltigen Matrizen  $V_l$  entsprechend die der zugehörigen linken Eigenvektoren. Die korrespondierenden Matrizen  $D_l$  sind Diagonalmatrizen mit den gesuchten  $q$  Eigenwerten in der Diagonalen. Im Gegensatz zu dem in Algorithmus 6 gegebenen hat dieser Mehrgitter-Zyklus die Berechnung der Eigenvektoren zu den  $q$  Eigenwerten mit kleinsten Realteilen zum Ziel. Auf die dabei möglicherweise auftretenden Schwierigkeiten sind wir bereits in Bemerkung 12 in Abschnitt 2.6 eingegangen.

Eine Übersicht über die in den letzten beiden Abschnitten entwickelten Mehrgitter-Methoden zur Lösung von Eigenwertproblemen ist in Abbildung 10 gegeben, wobei die

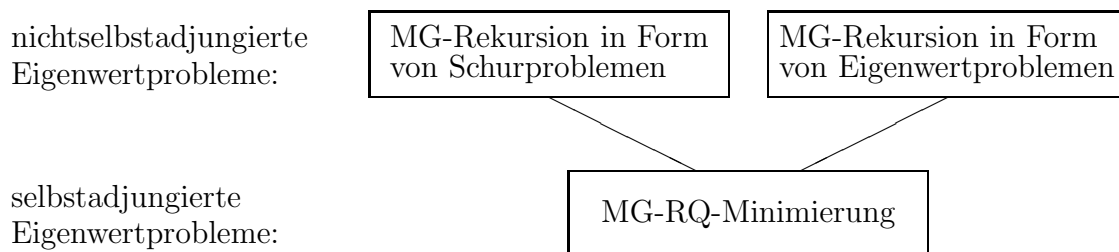


Abbildung 10: Mehrgitter-Projektionsmethoden zur Lösung von Eigenwertproblemen

Kästchen denen in Abbildung 6 auf Seite 37 für Krylovraum-Methoden entsprechen. Im selbstadjungierten Fall gehen sowohl das auf orthogonalen Projektionen beruhende Mehrgitter-Verfahren (Rekursion in Form von Schurproblemen, Algorithmen 5-7) als auch die auf „schiefen“ Projektionen basierende Mehrgitter-Methode (Rekursion in Form von Eigenwertproblemen, Algorithmus 8) in die im vorigen Abschnitt dargestellte Mehrgitter-Minimierung (Algorithmen 2-4) über. Insbesondere kann also das durch die Algorithmen 5-7 beschriebene Mehrgitter-Verfahren zur Lösung des allgemeinen Eigenwertproblems (selbstadjungierter und nichtselbstadjungierter Fall) genutzt werden. Im Vergleich zu der in Abschnitt 3.1 vorgestellten Mehrgitter-Methode von HACKBUSCH sind dabei zum einen die Eigenwertnäherungen in jedem Glättungs- und Grobgitter-Korrekturschritt zusätzliche Unbekannte, die automatisch bestimmt werden, und zum anderen werden keine Projektionen bezüglich (approximativer) Eigenlösungen größerer Gitter benötigt. Im speziellen selbstadjungierten Fall verfügt das hier entwickelte Mehrgitter-Verfahren im Gegensatz zu HACKBUSCHS Methode zusätzlich über die wichtige Eigenschaft der Monotonie (siehe dazu den vorherigen Abschnitt).