

Kapitel 4

Mehrgitterverfahren

Nachdem wir im vorherigen Kapitel ausführlich die *Diskretisierung* elliptischer partieller Differentialgleichungen betrachtet haben, wenden wir uns nun Löseraspekten zu. Es zeigt sich, dass insbesondere für die linearen Gleichungssysteme, die aus der Diskretisierung elliptischer Randwertprobleme entstehen, sogenannte *Mehrgitterverfahren* optimal sind: Sie bieten als einzige bekannte Verfahrensklasse das Potential asymptotischer Optimalität, d.h. eine von der Gitterweite h unabhängige Konvergenzgeschwindigkeit. Das ist äquivalent dazu, dass pro Unbekannte nur eine konstante Anzahl an Operationen durchgeführt wird: Wir werden zeigen, dass für Randwertaufgaben der Bauart unserer Modellprobleme insgesamt nur $O(n \log \varepsilon)$ arithmetische Operationen nötig sind zum Erreichen einer gewünschten Genauigkeit von ε und n Unbekannten, und bei der sogenannten vollständigen Approximation (engl. full approximation scheme) sogar nur $O(n)$. Es gibt allerdings nicht *das Mehrgitterverfahren*, stattdessen sind problemabhängige „Bausteine“ erforderlich. Dies ist aber letztendlich ein Vorteil: Aus dem Grundprinzip von Mehrgitterverfahren, d.h. aus dem zugrundeliegenden hierarchischen Zugang über geschachtelte Räume, lassen sich für große Klassen weiterer Probleme jenseits elliptischer Randwertaufgaben viele Ideen gewinnen.

Literaturempfehlungen Unsere Darstellung folgt keinem bestimmten Lehrbuch, sondern stellt eine wilde Mischung der wichtigsten Aspekte dar. Für weitergehende Details und alternative Einführungen in die Mehrgitter-Methodik verweisen wir auf Lehrbücher von Trottenberg et al. [75] (sehr anschaulich, allerdings sparsam bei präzisen theoretischen Aussagen und Beweisen) und Hackbusch [41] (historisch betrachtet die Standardreferenz, maximal formal korrekt und umfangreich, man muss allerdings Hackbusch-Notation mögen). Besonders empfohlen wird auch das „Tutorium“ von Briggs [17] aufgrund seines anschaulichen Zugangs, das uns als Grundlage für Kapitel 4.2 dient, sowie ein Übersichtswerk von Hackbusch [43]. Wir raten explizit ab vom Lehrbuch von Wesseling [81], obwohl es die didaktisch beste Einführung bietet: In der dem Dozenten vorliegenden Auflage ist es zu fehlerbehaftet.

4.1 Einführung

Aus dem bisherigen Numerik-Studium sollte bekannt sein, dass das asymptotische Konvergenzverhalten aller bisher betrachteten Verfahren zur Lösung großer dünnbesetzter linearer Gleichungssysteme von der Konditionszahl der Koeffizientenmatrix (bei Finiten Elementen: Steifigkeitsmatrix) und damit von der Gitterweite h abhängt, vergleiche beispielsweise die NLA Göttinger [31, Kap. 7] und die Numerik 2 Göttinger [33, Kap. 2] für den Vorlesungszyklus des Dozenten. Bei elliptischen Problemen und Finiten Differenzen oder Finiten Elementen gilt zudem wegen des Zusammenhangs zwischen Gitterweite und Konditionszahl: Je feiner die dem zu lösenden Gleichungssystem zugrundeliegende Diskretisierung, desto mehr Iterationen werden zur Konvergenz benötigt. Dieses Verhalten ist sowohl aus theoretischer als auch aus praktischer Sicht unbefriedigend, da keines der bisher betrachteten Verfahren algorithmisch

optimal und methodisch auf beliebig große Systeme skalierbar ist: Einerseits haben wir einen unvermeidbaren Mehraufwand bei einer Gitterverfeinerung um einen Faktor 2^d mehr Unbekannte bei Vierecken und 4^d bei Dreiecken, reguläre Verfeinerung in \mathbb{R}^d vorausgesetzt. Jede einzelne Berechnung einer Vektor-Vektor Addition, Matrix-Vektor Multiplikation (im dünnbesetzten Fall) und auch jede Norm und jedes Skalarprodukt wird um diesen Faktor teurer. Andererseits, und das ist der kritische Punkt, erfordern unsere bisherigen Techniken immer zwei oder gar vier Mal so viele Iterationen bis zum Erreichen derselben Genauigkeit. Der erste Aspekt kann (potentiell) durch erhöhten Ressourceneinsatz wie Parallellisierung kompensiert werden, der zweite Aspekt ist mathematischer. In Tabelle 4.1 übersetzen wir übliche Darstellung in Form von Konvergenzraten in arithmetische Operationen bis zum Erreichen einer Genauigkeit von ε , für unser Modellproblem in 2D, um den zweiten Aspekt zu verdeutlichen.

Iterationsverfahren	Konvergenzrate	# Operationen
Jacobi-Verfahren	$O(1 - h^2)$	$O(n^2 \log \varepsilon)$
Gauß-Seidel-Verfahren	$O(1 - h^2)$	$O(n^2 \log \varepsilon)$
SOR-Verfahren mit optimalem Relaxationsparameter	$O(1 - h)$	$O(n^{3/2} \log \varepsilon)$
Konjugierte Gradienten	$O(1 - h)$	$O(n^{3/2} \log \varepsilon)$
Mehrgitterverfahren	$c < 1$	$O(n \log \varepsilon)$
Full Multigrid	$c < 1$	$O(n)$

Tabelle 4.1: Modellproblem: Konvergenzraten und benötigte Operationen bis zum Erreichen einer Genauigkeit von ε . c ist eine von h unabhängige Konstante.

Mehrgitterverfahren bieten hingegen eine von h unabhängige Konvergenzgeschwindigkeit und somit eine konstante Anzahl an benötigten arithmetischen Operationen *pro Unbekannter* zur Berechnung einer Lösung. Außerdem sind die Konstanten, die in der asymptotischen O -Notation versteckt sind, typischerweise sehr klein. Wie immer in der (angewandten) Mathematik zahlen wir für diesen Vorteil allerdings einen gewissen Preis: Es gibt nicht *das* Mehrgitterverfahren, vielmehr ist es so, dass „Mehrgitter“ eine ganze Klasse von Verfahren bezeichnet, denen ein zentrales Konstruktionsprinzip gemeinsam ist, die aber stark problemspezifische Komponenten beinhalten. Insbesondere kann eine konkrete Zusammensetzung von Komponenten aus dem in diesem Kapitel entwickelten „Baukasten“ für eine Problemklasse optimal funktionieren, für andere Problemklassen jedoch nicht.

4.1.1 Historisches

Mehrgittermethoden wurden historisch zunächst für diskretisierte elliptische partielle Differentialgleichungen entwickelt. Die *Glättungseigenschaft* elementarer Iterationsmethoden ist seit 1935 bekannt [70–72]. Eine unserer Mehrgitterideen aus Kapitel 4.2.6, nämlich die Erzeugung möglichst optimaler Startlösungen, wurde ähnlich früh betrachtet, beispielsweise im Kontext von Newton-Iterationen für nichtlineare Probleme. In der Literatur werden die Arbeiten von Fedorenko [25, 26] und Bakhvalov [8] aus den Jahren 1962–1966 allgemein als die „ersten“ Mehrgitter-Veröffentlichungen angesehen, da sie erstmals für elliptische Modell-Randwert-Probleme h -unabhängige Konvergenz gezeigt haben. In den 1970er Jahren entwickelten Brandt [13, 14, 15] und Hackbusch [37, 38, 39, 40] wesentliche Teile dessen, was wir in diesem Teil der Vorlesung betrachten und was als die klassische Mehrgittertheorie angesehen wird.

4.1.2 Übersicht

Wir gönnen uns in diesem Teil der Vorlesung den Luxus einer ausführlichen und (hoffentlich maximal) anschaulichen Motivation: In Kapitel 4.2 betrachten wir für das einfachstmögliche aller Modellprobleme die allen Mehrgitterverfahren zugrundeliegenden Prinzipien sehr ausführlich mit einer Mischung aus

theoretischer Analyse und numerischen Experimenten. Dies liefert eine informelle und gleichzeitig intuitiv verständliche Vorstellung, wie (und wann!) Mehrgitter-Ansätze funktionieren, und welche Ideen allen Mehrgitterverfahren gemeinsam sind. Dazu verwenden wir explizit nur „Bordmittel“, und nutzen zudem Finite Differenzen und die starke Formulierung eines Randwertproblems: Mehrgitterverfahren basieren zentral auf geeignet geschachtelten Räumen, und weil Finite Differenzen Approximationen im \mathbb{R}^n anstelle von Sobolevräumen leben, ist die Schachtelung trivial klar. Dieser kurze Ausflug zurück in die klassische Welt erhöht so hoffentlich die Anschauung, und wir trennen zentrale Ideen von Technik.

In Kapitel 4.3 konstruieren wir dann den Mehrgitterzyklus, also eine Iteration des Mehrgitterverfahrens. Wir beschränken uns dabei auf den Galerkin-Fall, d.h. wir verwenden die gleichen Sobolev-Räume als Ansatz- und Testräume. Dies dient aber nur der vereinfachten Darstellung, und ist nicht nötig für das Funktionieren von Mehrgitterverfahren. Konkret wiederholen wir zuerst einige elementare Iterationsverfahren, um dann den Mehrgitterzyklus in variationeller Form herzuleiten. Wichtig ist hierbei, dass das Konstruktionsprinzip (fast) genau so funktioniert in einem rein algebraischen Kontext, also beispielsweise bei der Methode der Finiten Differenzen, oder auch bei vollassemblierten Galerkin-Gleichungssystemen zur Bestimmung der Koeffizienten einer Finite Elemente Approximation.

In Kapitel 4.3.3 konstruieren wir dann sogenannte *full multigrid* Verfahren, d.h. Mehrgittermethoden, die auf optimalen Startlösungen basieren. Die Konvergenztheorie sowie die Aufwandsabschätzungen folgen abschließend in Kapitel 4.4.

Mehrgitter-Ideen spielen auch eine zentrale Rolle bei sogenannten *Schwarz-Gebietszerlegungsverfahren*: Für die Lösung großer Probleme auf Supercomputern wird das Gebiet dabei aufgeteilt in Teilgebiete, die einzelnen Prozessoren, Prozessorkernen oder allgemein Recheneinheiten zugeordnet werden. Dadurch entsteht neben der klassischen h -Abhängigkeit der Konvergenz (Feingitterweite) eine Abhängigkeit von der Makrozerlegung, also letztendlich von der Anzahl der Teilgebiete für festes h . Mit einem Mehrgitterartigen Ansatz kann diese sogenannte H -Abhängigkeit eliminiert werden. Dazu verweisen wir auf die Lehrbücher von Quarteroni und Valli [59], Smith et al. [69], Toselli und Widlund [74] und eine noch zu entwerfende Vorlesung des Dozenten.

4.2 Motivation der Mehrgitter-Ideen

In der Literatur gibt es gefühlt unendlich viele Motivationen der beiden zentralen Grundprinzipien der Mehrgitter-Idee. Alle dem Verfasser bekannten Einführungen haben jedoch gemeinsam, dass sie auf „abgespeckten“ Versionen der für die Mehrgittertheorie nötigen Analysetechniken basieren. Ein von Briggs [17] etablierter – und in diesem Skript genutzter – alternativer Zugang geht orthogonal dazu vor: Wir verwenden eine Mischung aus motivierenden numerischen Experimenten und präziser theoretischer Analyse der durch die Experimente gewonnenen Hypothesen. So hoffen wir, den Anschauungsgrad zu maximieren.

4.2.1 Ein einfaches Modellproblem

Mehrgittermethoden wurden ursprünglich entwickelt für elliptische Randwertprobleme mit, nach der Diskretisierung, symmetrisch positiv definiten Koeffizientenmatrizen. Eine Einführung in Mehrgitterverfahren anhand eines solchen, möglichst einfachen, Modellproblems ist daher naheliegend. Wir betrachten in diesem Unterkapitel das Poissonproblem auf dem Einheitsintervall,

$$-u''(x) = f(x) \quad 0 < x < 1 \quad (4.1)$$

und schreiben Dirichlet-Randwerte $u(0) = u(1) = 0$ vor. Zur Diskretisierung verwenden wir die einfachstmögliche Technik in unserem Arsenal, nämlich Finite Differenzen. Dazu zerlegen wir das Intervall

in n äquidistante Teilintervalle mit den Gitterpunkten $x_j = jh$ für $j = 0, \dots, n$ und der Gitterweite $h = 1/n$. Dieses Gitter bezeichnen wir mit Ω_h , vergleiche auch Abbildung 4.1.

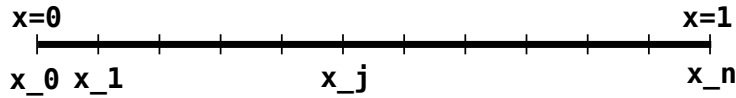


Abbildung 4.1: Definition des Gitters Ω_h

Zur besseren Unterscheidbarkeit bezeichnen wir in diesem Kapitel den Vektor der Auswertungen der exakten Lösung in den Gitterpunkten mit $u = (u(x_1), \dots, u(x_{n-1}))^T = (u_1, \dots, u_{n-1})^T \in \mathbb{R}^{n-1}$, und approximative Lösungen, die wir durch verschiedene noch zu spezifizierende Verfahren erhalten, mit $v = (v_1, \dots, v_{n-1})^T \in \mathbb{R}^{n-1}$. Die Dirichlet-Werte sind ja keine Unbekannten, also gilt $v_0 = u_0 = u(x_0) = u(0) = 0 = u(1) = u(x_n) = u_n = v_n$. In jedem der $n - 1$ inneren Gitterpunkte ersetzen wir nun wie üblich die kontinuierliche zweite Ableitung durch eine zentrale Finite Differenz, und unser diskretes Problem lautet:

$$\frac{-v_{j-1} + 2v_j - v_{j+1}}{h^2} = f(x_j) \quad 1 \leq j \leq n - 1$$

Mit dem Vektor der Auswertungen der rechten Seite in den Gitterpunkten, $f = (f(x_1), \dots, f(x_{n-1}))^T =: (f_1, \dots, f_{n-1})^T$, ergibt sich insgesamt das lineare Gleichungssystem

$$\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ v_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{n-1} \end{pmatrix}$$

beziehungsweise in kompakter Schreibweise $Av = f$. Die Koeffizientenmatrix ist symmetrisch, tridiagonal und positiv definit, vergleiche beispielsweise die NLA.

4.2.2 Elementare Relaxationsverfahren

Wir wiederholen kurz einige Erkenntnisse und Begrifflichkeiten für elementare Relaxationsverfahren.

Fehler und Residuen Wir betrachten ein lineares Gleichungssystem der Form $Av = f$ mit der approximativen Lösung v . Die exakte Lösung unseres Problems, beispielsweise des 1D-Modellproblems aus dem vorherigen Abschnitt, ist u . Klar ist: Wir kennen u nicht, sonst müssten wir das Problem ja nicht lösen. Das erste Maß, wie gut v die exakte Lösung u approximiert, ist der (*algebraische*) *Fehler*:

$$e = u - v$$

Wir haben diese Definition des Fehlers bereits in Kapitel 3.2.4 genutzt, um eine Möglichkeit zu konstruieren, den Diskretisierungsfehler experimentell zu quantifizieren durch die Vorgabe einer rechten Seite, die zu einem linearen Gleichungssystem mit bekannter exakter Lösung führt. Die Größe des Fehlers können wir wegen der Normäquivalenz im Endlichdimensionalen in einer beliebigen Norm auf \mathbb{R}^{n-1} messen, beispielsweise in der euklidischen Norm oder in der Maximumsnorm. Da wir allerdings die exakte Lösung im Allgemeinen nicht kennen, kennen wir selbstverständlich den Fehler auch nicht. Wir können aber einfach berechnen, wie gut unsere approximative Lösung v das Gleichungssystem erfüllt. Das ist gerade die Definition des *Residuums*:

$$r = f - Av$$

Wir legen fest, dass wir für Residuum und Fehler dieselbe Norm verwenden wollen. Klar ist eine Konsequenz aus der Eindeutigkeit der Lösung: Wenn $r = 0$, muss $e = 0$ sein und umgekehrt. Wenn wir zur Norm übergehen, gilt allerdings dummerweise nicht, dass eine kleine Norm von r eine kleine Norm von e impliziert. Eine Lösung mit kleinem Fehler muss nicht notwendigerweise ein Residuum in derselben Größenordnung haben. Das liegt daran, dass bis auf die Maximumsnorm Normen auf \mathbb{R}^{n-1} lokal große Abweichungen nicht ausschließen, und wir den Fehler nicht kennen, sondern nur das Residuum.

Wenn wir nun das Ausgangsproblem schreiben als $Au = f$ und die Definition des Residuums umstellen zu $Av = f - r$, können wir die zweite Gleichung von der ersten subtrahieren und erhalten einen fundamental wichtigen Zusammenhang:

$$Ae = r$$

Diese *Residuums Gleichung* besagt, dass der Fehler gerade dem linearen Gleichungssystem genügt, das wir mit der Koeffizientenmatrix A und dem Residuum r als rechter Seite erhalten. Die Residuums Gleichung wird eine zentrale Rolle in Mehrgitterverfahren spielen, wir überlegen uns hier schon einmal informell wie dies funktionieren kann: Ausgehend von einer Approximation v können wir das Residuum $r = f - Av$ einfach berechnen. Zur Verbesserung der Approximation lösen wir dann die Residuums Gleichung nach e und erhalten mit $v + e$ eine bessere Approximation der exakten Lösung, beziehungsweise in exakter Arithmetik direkt die exakte Lösung.

Das Jacobi-Verfahren Wir gehen zurück zu unserem Modellproblem

$$\begin{aligned} -u_{j-1} + 2u_j - u_{j+1} &= h^2 f_j & 1 \leq j \leq n-1 \\ u_0 &= u_n = 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

und betrachten zunächst das Jacobi-Verfahren. Es arbeitet so, dass die j -te Gleichung des Systems (4.2) nach u_j beziehungsweise mit unserer Unterscheidung zwischen u und v nach v_j gelöst wird, Iterationsindizes kennzeichnen wir weiterhin in hochgestellten Klammern:

$$v_j^{(p+1)} = \frac{1}{2} \left(v_{j-1}^{(p)} + v_{j+1}^{(p)} + h^2 f_j \right) \quad 1 \leq j \leq n-1$$

Mit der Zerlegung $A = D - L - U$ in den Diagonal-, den unteren und den oberen Dreiecksteil, und der Integration des Faktors h^2 in den Vektor f , erhalten wir durch

$$\begin{aligned} (D - L - U)u &= f \\ Du &= (L + U)u + f \\ u &= D^{-1}(L + U)u + D^{-1}f \end{aligned}$$

die *Iterationsmatrix* des Jacobi-Verfahrens als $P_J := D^{-1}(L + U)$ und somit die Matrixschreibweise des Jacobi-Verfahrens:

$$v^{(p+1)} = P_J v^{(p)} + D^{-1}f$$

Das gedämpfte Jacobi-Verfahren Im Mehrgitterverfahren werden wir nie mit dem Jacobi-Verfahren arbeiten, sondern mit seiner gedämpften Form – dies wird später in diesem Abschnitt klar. Dazu berechnen wir wie zuvor

$$v_j^* = \frac{1}{2} \left(v_{j+1}^{(p)} + v_{j-1}^{(p)} + h^2 f_j \right) \quad 1 \leq j \leq n-1$$

aber verwenden v_j^* nur als Zwischenwert, um die neue Iterierte als gewichtete Summe aus der alten Iterierten und diesem Zwischenwert zu definieren:

$$v_j^{(p+1)} = (1 - \omega)v_j^{(p)} + \omega v_j^* = v_j^{(p)} + \omega(v_j^* - v_j^{(p)}) \quad 1 \leq j \leq n-1$$

Hierbei ist $\omega \in \mathbb{R}$ ein beliebiger Dämpfungsparameter, für $\omega = 1$ erhalten wir das ungedämpfte Jacobi-Verfahren. In Matrixform lautet die Iterationsvorschrift:

$$v^{(p+1)} = ((1 - \omega)I + \omega P_J) v^{(p)} + \omega D^{-1} f$$

Wir lesen die Iterationsmatrix $P_\omega = (1 - \omega)I + \omega P_J$ ab. Als Fingerübung rechne man nach, dass sich die gedämpfte Jacobi-Iteration auch schreiben lässt als

$$v^{(p+1)} = v^{(p)} + \omega D^{-1} r^{(p)}.$$

Diese Form als Defektkorrektur-Iteration kennen wir bereits für das ungedämpfte Verfahren. Sie besagt, dass die aktualisierte Approximation nichts anderes ist als die alte Approximation kombiniert mit einer geeigneten Gewichtung des Residuums – man beachte den Zusammenhang zum Residuenproblem.

4.2.3 Experimentelle Analyse des Jacobi-Verfahrens

Wir überlegen uns nun, wie wir die Analyse vereinfachen können. Wenn wir uns auf homogene Probleme $Au = 0$ beschränken, decken wir immer noch die gesamte Theorie ab, wenn wir gleichzeitig alle möglichen Startlösungen verwenden anstelle aller möglichen rechten Seiten.¹ Die exakte Lösung unseres Problems ist trivialerweise $u = 0$, was bedeutet, dass der Fehler gerade $-v$ ist. Diese „Logikumkehrung“ ist also ausgesprochen praktisch. Unser einfachstmögliches Modellproblem hat also die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} -u_{j-1} + 2u_j - u_{j+1} &= 0 & 1 \leq j \leq n-1 \\ u_0 = u_n &= 0 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Bisher haben wir dieses Problem relativ „agnostisch“ gelöst, für einen beispielsweise CG-artigen Löser ergeben sich die erwarteten und theoretisch untermauerten asymptotischen Konvergenzraten, vergleiche die Numerik 2 des Dozenten Göddeke [33, Kap 2]. Nun wollen wir, exemplarisch anhand des (un-) gedämpften Jacobi-Verfahrens, den Konvergenzverlauf sehr viel präziser analysieren, und insbesondere versuchen zu verstehen, was genau für die langsame Konvergenz verantwortlich ist. Dazu beginnen wir mit einer Serie von numerischen Experimenten.

Auf dem Weg zum Mehrgitterverfahren erweist es sich als zielgerichtet, als Startlösungen spezielle Überlagerungen von Sinusschwingungen zu verwenden, und zwar die sogenannten *Fourier-Modi*:

$$v_j^{(0)} = \sin\left(\frac{jk\pi}{n}\right) \quad 0 \leq j \leq n, \quad 1 \leq k \leq n-1$$

j ist hierbei der Index im Startvektor (d.h. der Index eines Gitterpunkts), und k wird als *Wellennummer* (wave number) bezeichnet. k entspricht der Anzahl von halben Sinus-Durchschwingungen, aus denen v zusammengesetzt ist. Zur Vereinfachung der Schreibweise verwenden wir v_k als Bezeichner für den Vektor (die Startlösung), der komplett mit einer festen Wellennummer k assoziiert ist. Abbildung 4.2 zeigt beispielhaft die Startlösungen v_1 , v_3 und v_6 , wir sehen, dass kleine Werte von k zu langwelligen (glatten) und hohe Werte zu hochfrequenten (oszillierenden) Sinusschwingungen führen. Präzise sind die Fourier-Modi gerade die Eigenfunktionen des diskreten Laplace-Operators für unser Modellproblem. Dies ist

¹Es hilft, sich dies tatsächlich für unser Modellproblem einmal explizit zu überlegen. Dazu erinnere man sich an frühere Numerik-Vorlesungen, in denen Konvergenzaussagen für iterative Verfahren immer den Satz „Dann konvergiert XYZ für jede rechte Seite.“ beinhaltet haben.

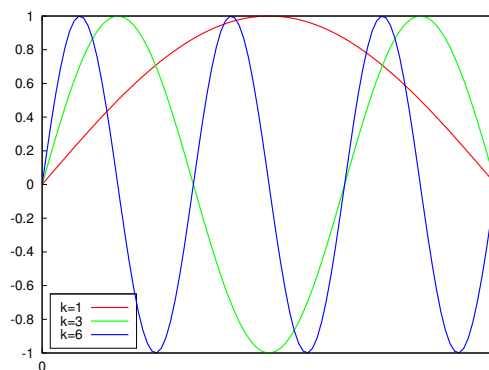


Abbildung 4.2: Fourier-Modi für $k = 1, 3, 6$ auf dem Einheitsintervall. Der k -te Modus besteht gerade aus $k/2$ vollen Sinusschwingungen.

durch eine längliche Rechnung komplikationsfrei zu überprüfen, weil wir gleich noch die Eigenwerte angeben.²

In unserem ersten numerischen Experiment verwenden wir nun die ungedämpften und gedämpften Jacobi-Iterationen, um das vereinfachte Modellproblem (4.3) für die oben eingeführten Startvektoren v_1 , v_3 und v_6 zu lösen. Wir führen jeweils genau 100 Iterationen durch, und stellen die Maximumsnorm des Fehlers (der gerade $-v$ ist) über der Iterationszahl in Abbildung 4.3 graphisch dar.

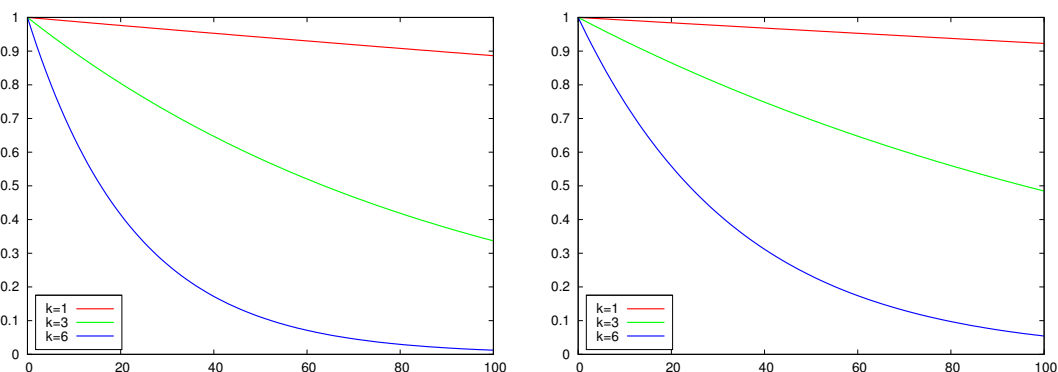


Abbildung 4.3: Maximumsnorm des Fehlers abhängig von der Iterationszahl, Startlösungen v_1 , v_3 und v_6 , $n = 64$. Links: Jacobi-Verfahren ($\omega = 1$), rechts: Dämpfung mit $\omega = 2/3$.

Uns interessiert zunächst nur das qualitative Verhalten. Wir sehen, dass die Dämpfung keinen großen Einfluss auf die Verkleinerung der Fehlernorm hat, in allen Experimenten liegt eine monotone Reduktion vor. Wir stellen allerdings fest, dass die Fehlernorm durch das Jacobi-Iterationsverfahren um so schneller reduziert wird, je größer die Wellennummer ist, d.h. je oszillierender die Startlösung ist. Abbildung 4.4 (links) zeigt das Ergebnis dieses Experiments (für den gedämpften Löser) noch einmal, mit einer logarithmischen Skalierung der y -Achse. Die geometrische Reduktion der Fehlernorm in jeder Iteration ist klar ersichtlich, was einen Zusammenhang der Form

$$\|e^{(p)}\|_{\infty} = c_k^p \|e^{(0)}\|_{\infty}$$

mit einer von der Wellennummer k abhängigen Konstante c_k nahelegt.

²Unter <http://www.cs.cornell.edu/~bindel/class/cs6210-f12/notes/lec32.pdf> steht, wie man die Eigenpaare tatsächlich ausrechnet.

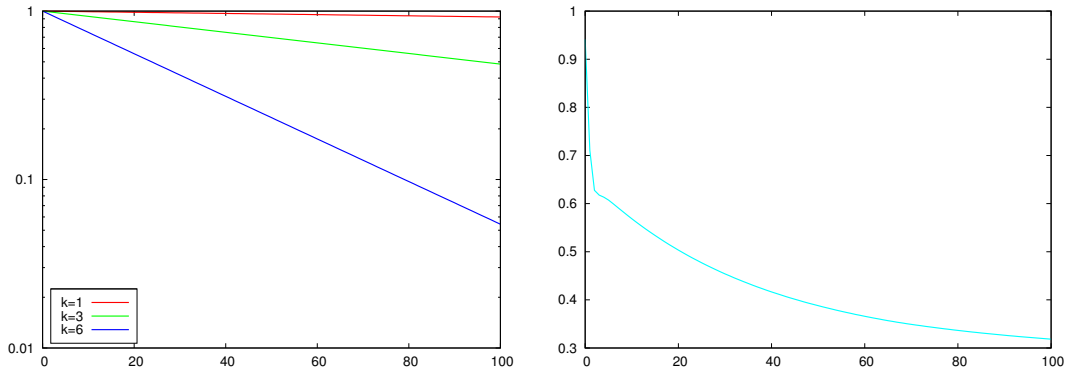


Abbildung 4.4: Links: Daten aus Abbildung 4.3 (rechts), mit logarithmischer Skalierung der y -Achse. Rechts: gleiche Konfiguration, Startlösung als Überlagerung von $\frac{1}{3}(v_1 + v_6 + v_{32})$.

Bevor wir uns der präzisen theoretischen Untersuchung unserer Experimente zuwenden, führen wir noch einen weiteren Versuch durch: In der Praxis wird eine Startlösung üblicherweise nicht aus nur einem Fourier-Modus bestehen, sondern aus der Überlagerung mehrerer Komponenten. Insbesondere wird die Lösung bei inhomogener rechter Seite und Startlösung Null eine Überlagerung der Eigenfunktionen sein, wenn wir unsere Argumentation temporär wieder umdrehen. Abbildung 4.4 (rechts) zeigt den Verlauf der Fehlernorm bei Verwendung des gedämpften Jacobi-Verfahrens und sonst unveränderter Konfiguration, allerdings mit der Startlösung $\frac{1}{3}(v_1 + v_6 + v_{32})$, also aus einer Überlagerung einer niedrig-, einer mittel- und einer hochfrequenten Komponente. Wir beobachten, dass der Fehler in den ersten ca. 5 Iterationen sehr schnell reduziert wird und danach die Konvergenzgeschwindigkeit dramatisch einbricht. Unsere Experimente legen den Verdacht nahe, dass das Verhalten in den ersten Iterationen gerade der Eliminierung des hochfrequenten Fehleranteils entspricht, und die langsame weitere Konvergenz von den niedrigfrequenten Fehleranteilen verursacht wird. Wenn wir ähnliche Experimente für andere einfache Iterationsverfahren wie zum Beispiel das Gauß-Seidel Verfahren durchführen, können wir das qualitativ gleiche Verhalten beobachten.

4.2.4 Theoretische Analyse des Jacobi-Verfahrens

Nun widmen wir uns der theoretischen Untermauerung und Erweiterung dieser experimentell gewonnenen Erkenntnisse beziehungsweise „Verdachtsmomente“. Beide betrachteten Iterationsverfahren (und auch viele weitere wie beispielsweise das Gauß-Seidel Verfahren) können geschrieben werden als sukzessive Approximation (vergleiche den Banachschen Fixpunktsatz aus der NLA [31, Kap. 7.2])

$$v^{(p)} = Pv^{(p-1)} + g$$

mit einer Iterationsmatrix P (wie P_J oder P_ω) und einem verfahrensabhängigen Vektor g , der u.a. die rechte Seite beinhaltet. Klar ist, dass das Verfahren die exakte Lösung u nicht ändert wenn es konvergiert, d.h. wir erhalten die folgende Fixpunktform, vergleiche wieder die NLA:

$$u = Pu + g$$

Subtraktion dieser beiden Gleichungen liefert die folgende Darstellung des Fehlers,

$$e^{(p)} = Pe^{(p-1)},$$

beziehungsweise nach p Iterationen in Abhängigkeit vom Startfehler:

$$e^{(p)} = P^p e^{(0)}$$

Somit ist klar, warum P manchmal als *Iterationsmatrix* und manchmal als *Fehlerfortpflanzungsmatrix* bezeichnet wird. Wir gehen zur Norm (mit einer induzierten, verträglichen Matrixnorm) über und erhalten nach elementaren Umformungen die folgende Abschätzung des Fehlers

$$\|e^{(p)}\| \leq \|P\|^p \|e^{(0)}\|$$

und daraus die aus der NLA Göttsche [31, Kap. 7.2] bekannte Konvergenzbedingung $\|P\| < 1$. Dies ist gerade der weiter oben postulierte geometrische Zusammenhang zwischen Fehlerreduktion und Iterationszahl. Unsere numerischen Experimente zeigen aber, dass der reine Fokus auf die Konvergenzgeschwindigkeit dem tatsächlichen Verhalten nicht gerecht wird. Deshalb nutzen wir den Spektralradius $\varrho(P) = \max_j |\lambda_j(P)|$ mit dem j -ten Eigenwert $\lambda_j(P)$ von P . In der NLA wird gezeigt, dass für die sukzessive Approximation gilt:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} P^p = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \varrho(P) < 1$$

In unserem Zusammenhang folgt hieraus insbesondere, dass die Iterationsvorschrift, die durch die Iterationsmatrix P definiert wird, unter der Bedingung $\varrho(P) < 1$ für alle Startlösungen konvergiert. Wir nennen $\varrho(P)$ auch den *asymptotischen Konvergenzfaktor*. Er hat viele nützliche Interpretationen, insbesondere entspricht er grob dem schlechtest-möglichen Faktor, um den der Fehler reduziert wird in einer Iteration unseres Verfahrens. Wenn p die kleinste natürliche Zahl ist, die der Bedingung

$$\frac{\|e^{(p)}\|}{\|e^{(0)}\|} \leq 10^{-z}$$

genügt, so genügt p auch $(\varrho(P))^p \leq 10^{-z}$, und wir können nach p auflösen, um die Anzahl an Iterationen zu bestimmen, die zur Reduzierung des Fehlers um z Dezimalstellen benötigt werden:

$$p \geq -\frac{z}{\log_{10}(\varrho(P))}$$

Der Ausdruck $-\log_{10}(\varrho(P))$ wird auch als *Konvergenzrate* bezeichnet, sein Kehrwert entspricht der zur Reduzierung des Fehlers um eine Dezimalstelle benötigten Anzahl an Iterationen.

Spektralradius des gedämpften Jacobi-Verfahrens Wir berechnen nun den Spektralradius des gedämpften Jacobi-Verfahrens, wenn wir es auf unser eindimensionales Modellproblem anwenden. Wie man sich einfach überlegt, gilt für die Eigenwerte von P_ω und die von A der Zusammenhang:

$$\lambda(P_\omega) = 1 - \frac{\omega}{2} \lambda(A)$$

Die Eigenwerte von A und die von P_ω sind nun gerade (siehe oben):

$$\lambda_k(A) = 4 \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) \quad \lambda_k(P_\omega) = 1 - 2\omega \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) \quad 1 \leq k \leq n-1$$

A und P_ω haben die gleichen Eigenvektoren (nachrechnen!), sie lauten mit der Notation $(w_k)_j$ für die j -te Komponente des Eigenvektors zum k -ten Eigenwert:

$$(w_k)_j = \sin\left(\frac{jk\pi}{n}\right) \quad 1 \leq k \leq n-1 \quad 0 \leq j \leq n$$

Wir halten fest, dass die Eigenvektoren von A (und damit die von P_ω) gerade die Fourier-Modi sind, die wir eben bereits betrachtet haben. Das vereinfacht nun die Analyse gewaltig. Als Korollar erhalten wir, dass die gedämpfte Jacobi-Iteration also für $0 < \omega \leq 1$ konvergiert, da dann $|\lambda_k(P_\omega)| < 1$ und somit $|\lambda_k^p(P_\omega)| < 1$.

Eigenvektor-Expansionen des Fehlers Die bisher erarbeiteten Zusammenhänge können wir nun kombinieren, um unsere experimentellen Beobachtungen theoretisch zu unterfüttern, da die Eigenvektoren unseres diskreten Operators A eng mit den Eigenfunktionen des kontinuierlichen Modellproblems zusammenhängen. Insbesondere können wir beliebige Vektoren darstellen als (Linear-) Kombination von Eigenvektoren, die ja eine Basis bilden. Wenn wir dies tun für den initialen Fehler $e^{(0)}$, erhalten wir mit geeigneten Konstanten $c_k \in \mathbb{R}$ seine Expansion (Kombination) aus Eigenvektoren von A :

$$e^{(0)} = \sum_{k=1}^{n-1} c_k w_k$$

Wir haben bereits gezeigt, dass sich der Fehler nach p Iterationen des gedämpften Jacobi-Verfahrens ergibt zu $e^{(p)} = P_\omega^p e^{(0)}$, und wenn wir beide Ausdrücke kombinieren und dabei ausnutzen, dass die Eigenvektoren von A und P_ω gleich sind, erhalten wir insgesamt:

$$e^{(p)} = \sum_{k=1}^{n-1} c_k P_\omega^p w_k = \sum_{k=1}^{n-1} c_k (\lambda_k(P_\omega))^p w_k \quad (4.4)$$

Diese Eigenvektor-Expansion des Fehlers bedeutet nichts anderes, als dass nach p Iterationen des gedämpften Jacobi-Verfahrens der k -te Fourier-Modus des Fehlers um einen Faktor proportional zur p -ten Potenz des k -ten Eigenwerts der Iterationsmatrix P_ω reduziert worden ist. Außerdem lesen wir ab, dass das Jacobi-Verfahren (im Gegensatz zu anderen Verfahren) keine Modi vermischt, wenn wir es auf einen Modus anwenden, ändert sich maximal die Amplitude dieses Modus, nicht jedoch die der anderen. Zur Verdeutlichung betrachten wir die Fourier-Modi unseres diskreten Modellproblems A auf einem Gitter mit $n = 12$, also mit einer Gitterweite von $h = 1/12$. Abbildung 4.5 visualisiert sie als Amplitude über die Gitterpunkte j , wobei zur besseren Anschauung linear zwischen den Amplituden interpoliert wird.

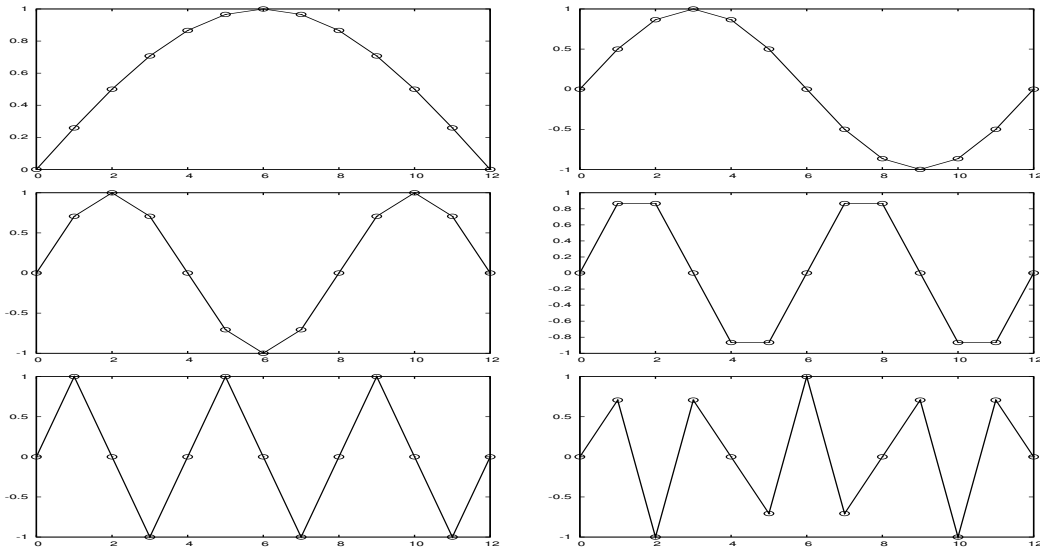


Abbildung 4.5: Fourier-Modi von A auf einem Gitter mit $h = 1/12$. Obere Reihe: $k = 1, 2$, mittlere Reihe $k = 3, 4$, untere Reihe: $k = 6, 9$.

Wellenlängen unterschiedlicher Fourier-Modi Wir beobachten, dass der k -te Modus aus $k/2$ vollständigen Sinuswellen besteht, dies ist äquivalent zu einer Wellenlänge von $2/k$ (die Länge des Intervalls ist 1). Zielführender ist es jedoch, die Wellenlängen in Abhängigkeit von der Gitterweite h anzugeben: Beispielsweise hat der Modus $k = n/2$ eine Wellenlänge von $4h$ (Abbildung 4.5 links unten), der Modus

$k = n - 1$ eine Wellenlänge von fast $2h$, und der Modus $k = 1$ eine Wellenlänge von 2. Modi mit Wellenzahl größer n (d.h. Wellenlängen kleiner als $2h$) können nicht auf dem Gitter repräsentiert werden. In der Tat ist es so, dass eine Schwingung mit Wellenlänge kleiner $2h$ auf dem Gitter nicht unterscheidbar ist von einer anderen Schwingung, dies wird vielleicht eine Übungsaufgabe. Man bezeichnet dieses Phänomen als *Aliasing*.

Im Folgenden interessieren uns primär qualitative Aussagen über die verschiedenen Fourier-Modi. Wir bezeichnen die Modi in der unteren Hälfte des Spektrums, d.h. für $1 \leq k < n/2$, als *niederfrequent* beziehungsweise *glatt*. Modi in der oberen Hälfte des Spektrums, d.h. $n/2 \leq k \leq n - 1$, heißen *hochfrequent*, *oszillierend* oder *rau*.

Dämpfung verschiedener Fehlerfrequenzen Ausgangspunkt unserer nächsten Überlegungen sind die Eigenwerte der Iterationsmatrix des gedämpften Jacobi-Verfahrens,

$$\lambda_k(P_\omega) = 1 - 2\omega \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) \quad 1 \leq k \leq n - 1$$

beziehungsweise die hergeleitete Beziehung (4.4). Bereits festgestellt haben wir, dass hiermit aus $0 < \omega \leq 1$ gerade $|\lambda_k(P_\omega)| < 1$ und damit Konvergenz folgt. Die spannende Frage ist nun, welcher Wert von ω den Fehlerfortpflanzungsfaktor $|\lambda_k(P_\omega)|$ für verschiedene $1 \leq k \leq n - 1$ möglichst klein und damit optimal werden lässt. Zur Inspiration verwenden wir wieder eine kleine Visualisierung, in Abbildung 4.6 stellen wir die Eigenwerte von P_ω als Funktion über k für vier verschiedene Werte von ω dar.

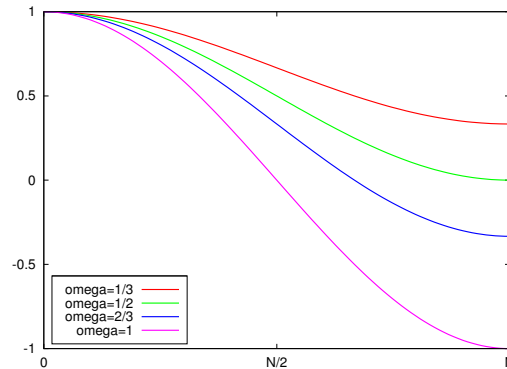


Abbildung 4.6: Eigenwerte von P_ω für $\omega = 1/3, 1/2, 2/3, 1$ über dem Intervall $0 \leq k \leq n$. Man beachte, dass k auf diesem Intervall nur diskrete ganzzahlige Werte annimmt, die kontinuierliche Darstellung dient nur der Verdeutlichung.

In der Abbildung fällt zunächst auf, dass für alle $0 < \omega \leq 1$ die glatten Fehlerkomponenten (kleine k) nicht reduziert werden. Dies können wir auch exakt begründen, indem wir den ersten Eigenwert für hinreichend kleine Gitterweite h abschätzen. Da für kleine $|x|$ gerade $\sin(x) \approx x$ gilt, erhalten wir:

$$\lambda_1 = 1 - 2\omega \sin^2\left(\frac{\pi}{2n}\right) = 1 - 2\omega \sin^2\left(\frac{\pi h}{2}\right) \approx 1 - \frac{\omega \pi^2 h^2}{2} = 1 - O(\omega h^2)$$

Unsere aus der Abbildung gewonnene Intuition ist bestätigt: λ_1 , der mit dem glattesten Fourier-Modus assoziierte Eigenwert, liegt immer nahe an Eins. Konsequenterweise kann das gedämpfte Jacobi-Verfahren für keinen Wert von ω die glatten Fehlerkomponenten reduzieren. Ironischerweise liegt λ_1 sogar um so näher an der Eins, je feiner die Gitterweite h ist: Jeder Versuch, die Genauigkeit der Lösung zu verbessern durch Verfeinerung der Diskretisierung, wird nur die Konvergenz der glatten Fehlerkomponenten verschlechtern, dies ist gerade genau die h^2 -abhängige Konvergenz des Jacobi-Verfahrens.

In unseren numerischen Experimenten in Abbildungen 4.3 und 4.4 haben wir bereits gesehen, dass glatte Fehlerkomponenten für die langsame Konvergenz verantwortlich sind. Nun haben wir sogar noch mehr – und zudem präzise – gezeigt: Das gedämpfte Jacobi-Verfahren kann für glatte Fehlerkomponenten nicht gut funktionieren. Nachdem wir uns damit abgefunden haben, schwächen wir unsere Forderung nach dem optimalen Wert von ω ab und sind nur noch interessiert an der bestmöglichen Dämpfung der *oszillierenden Komponenten*, d.h. von denen mit $n/2 \leq k \leq n-1$. Dies ist dann erfüllt, wenn

$$\lambda_{\frac{n}{2}}(P_\omega) = -\lambda_n(P_\omega)$$

gilt. Dieses „Optimierungsproblem“ hat die Lösung $\omega = 2/3$, wie man mit Monotonieargumenten leicht nachrechnet. Eine weitere kurze Rechnung (Einsetzen, Ausnutzen der Monotonie) liefert, dass für $\omega = 2/3$ gerade $|\lambda_k| \leq 1/3$ für alle $n/2 \leq k \leq n-1$ gilt: Die oszillierenden Komponenten im Fehler werden also in jeder Iteration *mindestens* um den Faktor $1/3$ reduziert. Bemerkenswerterweise ist dieser Faktor *unabhängig von der Gitterweite h* !

Diese Dämpfungsrate für die rauen Fehlerkomponenten ist eine wichtige Eigenschaft aller einfachen Iterationsverfahren (später: Glättungsverfahren) im Mehrgitteralgorithmus, und wird auch als *Glättungsfaktor* (engl. *smoothing factor*) bezeichnet: Mehrgitterverfahren gewinnen einen großen Teil ihrer Stärke daraus, dass die Glättungsfaktoren solcher Verfahren nicht nur klein, sondern auch von der Gitterweite h unabhängig sind.

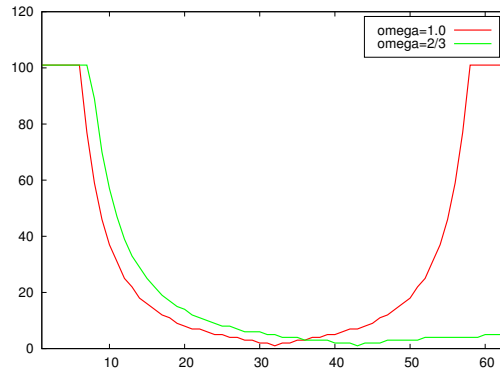


Abbildung 4.7: Iterationszahl des ungedämpften und optimal gedämpften Jacobi-Verfahrens bis zu Fehlerreduktion um zwei Stellen, abhängig von Startlösungen als k -te Fourier-Modi.

Experimentelle Verdeutlichung Wir führen einige weitere numerische Experimente durch, um diese gewonnenen präzisen Resultate zu verdeutlichen. Dazu betrachten wir weiterhin unser eindimensionales Modellproblem $Au = 0$ auf einem Gitter mit $n = 64$, und wenden das gedämpfte Jacobi-Verfahren an. Als Startlösung nehmen wir jeweils die einzelnen Fourier-Modi mit Wellenzahlen $1 \leq k \leq n-1$, die gleichzeitig die initialen Fehler sind. Abbildung 4.7 zeigt die benötigte Iterationszahl bis zur Reduzierung des Startfehlers (nicht etwa des Startresiduums) um zwei Stellen, für jedes dieser 63 Probleme. Zur besseren Darstellung haben wir die maximale Anzahl zulässiger Iterationen auf 100 beschränkt.

Ohne Dämpfung des Jacobi-Verfahrens (rote Kurve in Abbildung 4.7, $\omega = 1$) beobachten wir eine sehr langsame Reduzierung des Fehlers, sowohl für die (sehr) nieder- als auch für die (sehr) hochfrequenten Komponenten. Lediglich für die Komponenten in der Mitte des Spektrums ist die Fehlerreduktion akzeptabel. Dieses Verhalten entspricht den Eigenwertkurven aus Abbildung 4.6. Wenn wir allerdings eine Dämpfung mit $\omega = 2/3$ einführen (grüne Kurve in Abbildung 4.7), beobachten wir ein vollständig anderes Verhalten: Die glatten Fehlerkomponenten werden immer noch sehr langsam (sogar langsamer,

was keine Überraschung ist) reduziert, während die rauen Fehlerkomponenten (die obere Hälfte des Spektrums) sehr effizient behandelt werden. Auch diese Beobachtung ist konsistent mit den Eigenwertdarstellungen, insbesondere da wir den Wert $\omega = 2/3$ gerade als optimale (selektive) Dämpfung für die obere Hälfte des Spektrums hergeleitet haben.

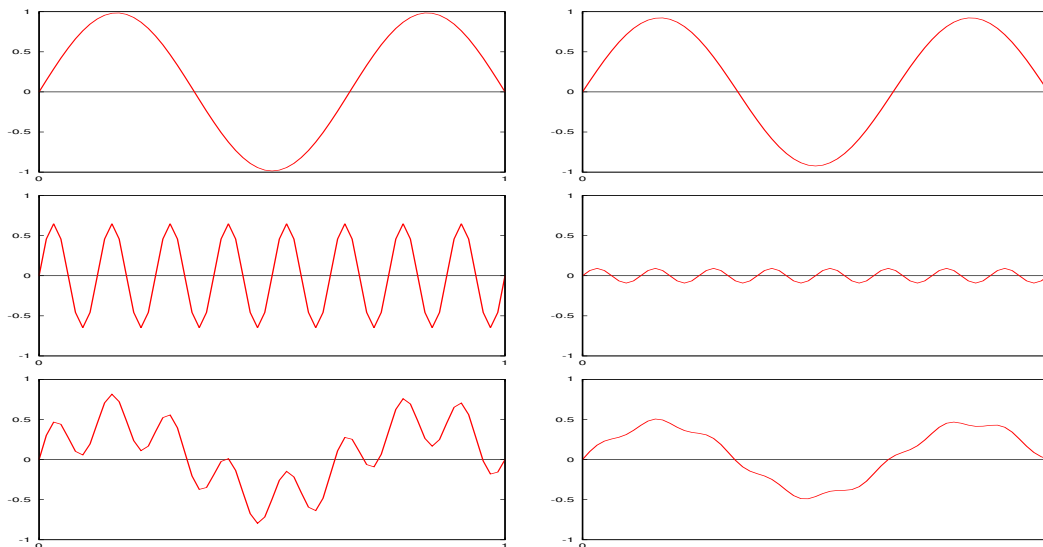


Abbildung 4.8: Berechnete Approximationslösungen des Problems $Av = 0$ nach einer (links) und zehn (rechts) Iterationen, für die Startlösungen w_3 (oben), w_{16} (Mitte) und $0.5(w_3 + w_{16})$ (unten). Die exakte Lösung ist in allen Fällen 0.

Abbildung 4.8 bietet einen anderen Blickwinkel auf unsere Resultate zum Dämpfungsverhalten. Dargestellt ist die berechnete Approximationslösung unseres Modellproblems jeweils nach einer und nach zehn Iterationen des mit $\omega = 2/3$ gedämpften Jacobi-Verfahrens, man erinnere sich, dass die exakte Lösung des Problems gerade die Null ist. Die oberen beiden Abbildungen verwenden als Startlösung den glatten Fourier-Modus w_3 , dieser langwellige Fehler wird nur sehr langsam reduziert. In der Mitte sehen wir das Verhalten bei einem oszillierenden Modus (Wellenzahl 16), die Fehlerreduktion ist deutlich stärker. Die unteren beiden Abbildungen illustrieren die Selektivität des gedämpften Jacobi-Verfahrens, als Startlösung wird hier das Mittel aus den beiden vorherigen Startlösungen verwendet. Nach 10 Iterationen ist der hochfrequente Anteil im Fehler beinahe vollständig verschwunden, während die niederfrequente Komponente kaum beeinflusst wurde. In allen drei Tests sehen wir zudem, dass das gedämpfte Jacobi-Verfahren Modi erhält, beispielsweise wird der glatte Modus nie in einen rauerer transformiert.

Andere Iterationsverfahren Für andere elementare Iterationsverfahren lässt sich eine ähnliche experimentelle und theoretische Analyse durchführen. Im Detail ist sie technisch aufwändiger, beispielsweise fallen beim Gauß-Seidel-Verfahren die Eigenvektoren der Iterationsmatrix nicht mit denen der Modellmatrix zusammen. Das Phänomen, dass all diese Verfahren für „typische“ Eingabedaten zunächst sehr schnell konvergieren und dann praktisch stagnieren, lässt sich für alle diese Verfahren qualitativ identisch und quantitativ vergleichbar beobachten. Durch den Übergang zu speziellen Eingabedaten konnten wir hoch- und niederfrequente Fehlerkomponenten für das Verhalten als Ursache identifizieren, und dies auch theoretisch untermauern. Ähnliche Analysen lassen sich auch für andere, weniger triviale Modellprobleme, und in höheren Dimensionen durchführen.

Fazit Insgesamt erhalten wir das folgende erste Resultat zur Motivation von Mehrgitter-Verfahren:

Die meisten einfachen elementaren iterativen Lösungsverfahren (vorkonditionierte Richardson-Verfahren) können glatte Fehlerkomponenten nur sehr langsam und bei feiner werdender Gitterweite zusätzlich immer langsamer reduzieren. Oszillierende Fehlerkomponenten hingegen werden schnell und h -unabhängig reduziert beziehungsweise gedämpft.

Diese Beobachtung werden wir später als *Glättungseigenschaft* definieren, sie ist offenbar Problem-, Löser- und Diskretisierungsabhängig.

4.2.5 Fehlerkomponenten auf verschieden feinen Gittern

Unsere bisherige Analyse zeigt, dass elementare Iterationsverfahren sehr gute Konvergenzeigenschaften in der oberen, oszillierenden Hälfte des Fehlerspektrums aufweisen. In der Literatur werden solche Verfahren oft als *Relaxationsverfahren* bezeichnet, wenn klar ist, dass sie sich auf den Fehler und nicht auf andere Quantitäten beziehen. Unsere Beobachtungen werden insbesondere durch unser letztes Experiment (Abbildung 4.8 unten) deutlich. Die Frage ist nun, wie wir „die andere Hälfte“, d.h. die glatten Fehlerkomponenten behandeln. Für diese konnten wir ja zeigen, dass sie grundsätzlich nicht effizient reduziert werden können.

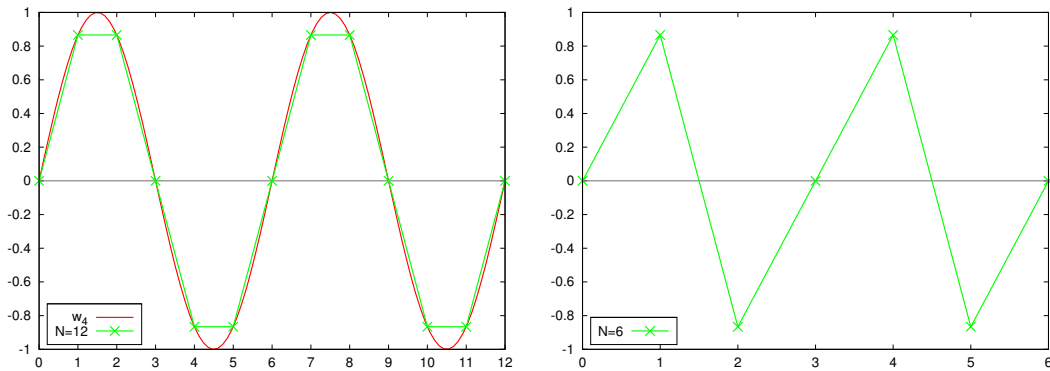


Abbildung 4.9: Repräsentation des Fourier-Modus zur Wellennummer $k = 4$ (rote Kurve) auf einem Gitter $\Omega_{h=1/12}$ (links) und $\Omega_{h=1/6}$ (rechts).

Ein kreatives Experiment Die Konvergenzgeschwindigkeit $1 - O(h^2)$ unserer Basisverfahren ist offenbar um so besser, je größer h ist. Andersherum formuliert: Je größer unsere Diskretisierung, desto weniger langsam wird der Fehler reduziert. Deshalb ist die Idee nicht zu weit hergeholt, sich einfach einmal anzusehen, wie der *verbleibende* glatte Fehler auf einem gröberen Gitter aussieht. Wir führen dazu ein weiteres Experiment durch. Für den Fall $n = 12$ und unser übliches Modellproblem nehmen wir an, dass wir bereits so viele Iterationen beispielsweise des gedämpften Jacobi-Verfahrens durchgeführt haben, dass nur noch glatte Fehlerkomponenten vorhanden sind. Konkret sei idealisierterweise nur noch der Fourier-Modus w_4 übrig geblieben.

Abbildung 4.9 (links) zeigt diese Ausgangssituation. Wenn wir uns nun diesen Fehler, d.h. genau diesen Modus, hernehmen und auf ein halb so feines (doppelt so grobes) Gitter projizieren, ergibt sich die Situation wie in Abbildung 4.9 (rechts). Auf dem groben Gitter Ω_{2h} hat die Ausgangsschwingung immer noch eine Wellenzahl von $k = 4$, wir sehen gemäß unserer Definition $k/2 = 2$ volle Sinus-Schwingungen. Die spannende Beobachtung ist: Diese auf Ω_h glatte Komponente erscheint auf Ω_{2h} deutlich stärker oszillierend im Bezug auf h , d.h. auf durchlaufende Gitterpunkte beziehungsweise Wellenlänge. Das ist genau das Prinzip der zweiten Mehrgitter-Grundidee: Glatte Komponenten auf einem feinen Gitter Ω_h sind oszillierend auf einem gröberen Gitter Ω_{2h} .

Theoretische Präzisierung Zunächst halten wir fest, dass die Gitterpunkte im groben Gitter Ω_{2h} die gerade-nummerierten Gitterpunkte des feineren Gitters Ω_h sind. Wir schauen uns den k -ten Modus auf dem Feingitter an, und werten diese Gitterfunktion nur an den gerade-nummerierten Gitterpunkten aus. Unter der Voraussetzung dass $1 \leq k < n/2$, d.h. im glatten Teil des Spektrums, können wir geschickt umstellen:

$$(w_k^h)_{2j} = \sin\left(\frac{2jk\pi}{n}\right) = \sin\left(\frac{jk\pi}{n/2}\right) = (w_k^{2h})_j \quad 1 \leq k < \frac{n_h}{2}, \quad 0 \leq j \leq \frac{n_h}{2}$$

Die Gleichheit in der Mitte ist hierbei trivial, links und rechts haben wir lediglich Definitionen eingesetzt. Das Bemerkenswerte an dieser eigentlich einfachen Gleichung ist, dass sie unsere experimentelle Intuition bestätigt: Der k -te Modus auf dem Gitter Ω_h wird zum k -ten Modus auf dem Gitter Ω_{2h} . Wir betrachten nur glatte Modi auf dem Feingitter, und diese werden auf dem Grobgitter rauer. In einer möglichen Übungsaufgabe soll nachgerechnet werden, dass der Modus zur Wellenzahl $k = n/2$ beim Übergang von Ω_h zu Ω_{2h} zum Nullvektor wird, und es soll begründet werden, was dies konkret bedeutet.

Aliasing Es stellt sich die berechtigte Frage, was mit den Feingitter-Modi für $k > n/2$ passiert. Man kann zeigen (Übungsaufgabe?), dass dann aufgrund von bereits genannten Alias-Effekten der k -te Modus auf dem Gitter Ω_h gerade der $(n - k)$ -te Modus auf dem Gitter Ω_{2h} wird: Oszillierende Modi auf dem Feingitter werden also (fälschlicherweise) repräsentiert durch relativ glatte Modi auf dem gröberen Gitter. Im Rückblick auf unser motivierendes Experiment zu Beginn dieses Abschnitts ist dies aber kein Problem, denn wir gehen ja davon aus, dass wir oszillierende Komponenten bereits „weggeglättet“ haben.

4.2.6 Zwei verschiedene Mehrgitter-Ideen

Durch diese Beobachtungen und Analysen bestärkt, liegt die Vorgehensweise nahe, in irgendeiner schlauen Form zwischen Fein- und Grobgitter-Problem zu wechseln, sobald die Konvergenz der elementaren Relaxationsverfahren stagniert: Die Stagnation entspricht gerade dem Ende der Reduktion der hochfrequenten Fehler. Genau die verbleibenden Fehler sind aber nicht mehr glatt (niederfrequent), sondern wiederum rau (hochfrequent) aus der Perspektive eines gröberen Gitters. Dort können wir sie rekursiv effizient eliminieren. Vollkommen unklar ist allerdings, wie wir Fehler zwischen Gittern transferieren, und insbesondere wie wir „geglättete“ (d.h. von rauen Komponenten befreite) Fehler *nutzen* können, um die Konvergenz des eigentlich zu lösenden Feingitterproblems zu verbessern.

Erste Idee Die erste Idee, um die Vorteile von Grobgittern mit der Glättungseigenschaft zu kombinieren, ist im Prinzip eine Strategie, um gute Startlösungen für das eigentlich zu lösende Feingitterproblem zu generieren. Nach unseren Vorbereitungen ist klar, dass das Feingitterproblem schnell konvergieren sollte, wenn seine Startlösung nur aus oszillierenden Komponenten besteht. Wir wissen, dass glatte Komponenten auf dem Feingitter gerade oszillierende Komponenten auf dem Grobgitter sind, daher liegt folgende Strategie nahe:

Relaxiere $Au = f$ auf einem sehr groben Gitter.

⋮

Verwende das Ergebnis des nächstgrößeren Gitters als Startlösung und relaxiere $Au = f$ auf Ω_{4h} .

Verwende das Ergebnis von Ω_{4h} als Startlösung und relaxiere $Au = f$ auf Ω_{2h} .

Verwende das Ergebnis von Ω_{2h} als Startlösung und relaxiere $Au = f$ auf Ω_h , um eine Approximation der Lösung des zu lösenden Problems zu erhalten.

Wir werden diese Strategie später auch als *geschachtelte Iteration* (*nested iteration*, *full multigrid*) bezeichnen. Wesentliche Fragen sind allerdings noch ungeklärt. Was bedeutet es beispielsweise, das Problem auf einem groben Gitter zu relaxieren, insbesondere wenn unser Ausgangsproblem nur auf dem Feingitter gegeben ist? Diese Problematik ist zweigeteilt, zum einen müssen wir uns überlegen, wie wir Lösungen und rechte Seiten von gröberen auf feine Gitter übertragen, und zum anderen ist vollkommen unklar, wie wir den diskreten Operator A auf gröberen Gittern überhaupt definieren können, insbesondere wenn er komplexer ist als für unser eindimensionales Modellproblem. Die zweite wesentliche Frage ist, ob dieses Verfahren überhaupt sicherstellen kann, dass auf dem Feingitter nur noch oszillierende Fehlerkomponenten existieren: Ist dies nicht der Fall, so haben wir nichts gewonnen, da die immer noch vorhandenen glatten Komponenten die Konvergenz stagnieren lassen.

Zweite Idee Für die zweite Strategie gehen wir zurück zur Residuums Gleichung aus Kapitel 4.2.2. Die Residuums Gleichung enthält gerade den Fehler als Unbekannte, und das zentrale Fazit unserer Überlegungen ist, dass die glatten Komponenten des Fehlers Probleme bereiten. Wenn v eine Approximation der exakten Lösung u ist, so erfüllt der Fehler $e = u - v$ gerade

$$Ae = r = f - Av$$

und die Vermutung liegt nahe, dass wir direkt auf dem Fehler relaxieren können (und so seine oszillierenden Komponenten eliminieren können), wenn wir nicht die Ausgangsgleichung $Au = f$ in elementaren Iterationsverfahren wie dem gedämpften Jacobi-Verfahren lösen, sondern die Residuums Gleichung. Außerdem können wir uns mit ein wenig elementarer Rechnung überlegen, dass die Relaxierung auf der Ausgangsgleichung $Au = f$ mit einer beliebigen Startlösung v äquivalent ist zur Relaxierung auf der Residuums Gleichung mit der speziellen Startlösung $e = 0$, das ist letztlich nicht viel mehr als die Definition des Residuums. Pseudo-algorithmisch übersetzen sich diese Beobachtungen in die folgende Strategie, die wir später präzise als *Grobitterkorrektur* (*coarse grid correction*) bezeichnen werden:

Relaxiere $Au = f$ auf Ω_h zur Bestimmung einer Approximation v^h .

Berechne das Residuum $r = f - Av^h$.

Relaxiere die Residuums Gleichung $Ae = r$ auf Ω_{2h} mit der Startlösung $e = 0$, um eine Approximation des Fehlers e^{2h} zu bestimmen.

Korrigiere die Approximation v^h auf Ω_h mit der Approximation e^{2h} des Fehlers auf Ω_{2h} , d.h. berechne $v^h \rightarrow v^h + e^{2h}$.

Diese Strategie erscheint sehr vielversprechend, insbesondere da sie alle unsere Beobachtungen zur Glättung des *Fehlers* integriert durch die Verwendung der Residuums Gleichung: Nach der Glättung auf dem Ausgangsproblem enthält der Fehler nur noch glatte Komponenten. Diese sind auf dem groben Gitter oszillierend, und über die Residuums Gleichung glätten wir genau diese Fehler dort. Allerdings sind in diesen Proto-Algorithmus immer noch alle Fragen offen die auch schon in der ersten Strategie offen waren: Wie transferieren wir Residuen und Fehlerkorrekturen zwischen den Gittern, und wie definieren wir den Operator auf dem Grobgitter?

Zusammenfassung Wir haben in diesem Kapitel durch eine Kombination von numerischen Experimenten und theoretischen Analysen zwei zentrale Erkenntnisse gewonnen, die wir abschließend kompakt zusammenfassen. Noch formulieren wir diese Erkenntnisse prosaisch.

Die erste Beobachtung werden wir später als *Glättungseigenschaft* präzise definieren:

Die meisten einfachen elementaren iterativen Lösungsverfahren (vorkonditionierte Richardson-Verfahren) können glatte Fehlerkomponenten in diskreten elliptischen Modellproblemen nur sehr langsam und bei feiner werdender Gitterweite zusätzlich immer langsamer reduzieren. Oszillierende Fehlerkomponenten hingegen werden schnell und h -unabhängig reduziert beziehungsweise gedämpft.

Wichtig ist, dass die Glättungseigenschaft immer separat „für eine Iterationsvorschrift angewendet auf ein konkretes Problem“ zu verstehen ist. Die zweite Beobachtung beinhaltet das Konzept gröberer Gitter:

Fehlerkomponenten, die auf einem Feingitter glatt erscheinen, sind auf einem gröberen Gitter deutlich oszillierender.

Wir beginnen nach dieser ausführlichen und spannenden Motivation zu verstehen, wie und warum *Mehrgitter*-Verfahren funktionieren werden. Wenn wir so lange auf dem Feingitterproblem relaxieren, bis nur noch glatte Fehlerkomponenten übrig sind, bietet es sich an, diese mit Hilfe der Residuums Gleichung auf das Grobgitter zu übertragen, da sie hier oszillierender erscheinen und deshalb wiederum gut geglättet werden können. Diese Idee kann dann rekursiv fortgesetzt werden, und im vorherigen Abschnitt haben wir zwei mögliche Strategien skizziert. In den folgenden Kapiteln widmen wir uns nun der präzisen Formulierung der Mehrgitterideen, dem Ausbau der noch fehlenden Details, und insbesondere einer rigorosen Konvergenzanalyse.

4.3 Der Mehrgitter-Zyklus

Man kann Mehrgitter-Verfahren auf verschiedene Arten beschreiben. Typisch für die Literatur ist der rein algebraische Zugang ausgehend von einem linearen Gleichungssystem $Ax = b$. Wie in der Motivation im letzten Unterkapitel angedeutet, muss jedoch auch in diesem Zugang spezielles Wissen über die Diskretisierung und das zugrundeliegende Problem eingebracht werden, einerseits in die Definition der notwendigen Größen auf dem Grobgitter, und andererseits in die Gittertransferoperatoren. Während dieser Zugang für Finite Differenzen in gewisser Weise natürlich ist, werden zentrale Aspekte der Finite Elemente Methode etwas unterschlagen, wenn direkt assemblierte Steifigkeitsmatrizen und Koeffizientenvektoren verwendet werden.

In dieser Vorlesung verfolgen wir deshalb einen etwas ungewöhnlichen Weg im Vergleich zur gängigen Literatur, und mischen die variationelle und die algebraische Sichtweise, um so speziell *Finite-Elemente-Mehrgitter Methoden* zu konstruieren und gleichzeitig die Übertragbarkeit auf andere Diskretisierungstechniken nicht zu verlieren. Dieses Kapitel ist teilweise lose inspiriert durch ein Vorlesungsskript von Rannacher [60].

4.3.1 Erinnerung: Elementare Iterationsverfahren

Wir rufen kurz essentiellen Stoff aus der NLA [31, Kap. 7] zurück ins Gedächtnis, und insbesondere den zugehörigen „Operatorsprech“: Bei *Splittingverfahren* wird eine Koeffizientenmatrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ additiv in $A = M - N$ mit einer regulären Teilmatrix M zerlegt. Für die Anwendung des Banachschen Fixpunktsatzes wird eine Iterationsvorschrift Φ durch

$$\Phi(x) := Tx + c \quad \text{mit} \quad T := M^{-1}N \quad \text{und} \quad c := M^{-1}b$$

definiert, und die folgende wichtige Äquivalenz bewiesen:

$$x^* \text{ löst } Ax = b \Leftrightarrow x^* \text{ ist Fixpunkt von } \Phi$$