

RUPRECHT-KARLS-UNIVERSITÄT HEIDELBERG
INTERDISZIPLINÄRES ZENTRUM FÜR WISSENSCHAFTLICHES RECHNEN
2016

Das Newton-Verfahren zur Berechnung variationeller Eigenwertprobleme

Masterarbeit Mathematik
eingereicht von
Philipp Siehr

Betreuer:
Prof. Dr. Guido Kanschat

Heidelberg, März 2016

Zusammenfassung

Die Zustände eines physikalischen oder chemischen Systems können über Eigenwerte und Eigenfunktionen beschrieben werden. Daher sind Eigenwertaufgaben ein wesentlicher Bestandteil der Quantenmechanik. Üblicherweise wird eine Kombination der QR -Iteration mit einem KRYLOV-Unterraum-Verfahren zur Lösung dieser Probleme verwendet.

Diese Arbeit basiert auf dem Einsatz des NEWTON-Verfahrens als Löser für variationelle Eigenwertprobleme. Zunächst wird das Eigenwertproblem als Minimierungsaufgabe mit Nebenbedingungen gestellt, anschließend wird auf kontinuierlicher Ebene das NEWTON-Verfahren angewandt und abschließend mit finiten Elementen diskretisiert.

Die Probleme, die bei der Untersuchung dieser mathematischen Methode entstehen, und die Diskussion der Lösungsstrategien bilden den Leitfaden dieser Arbeit. Daher wird ein einfaches Modellproblem basierend auf finiten Differenzen eingeführt.

Mit diesem Modellproblem werden erste numerische Rechnungen durchgeführt. Die Resultate zeigen, dass einige Verbesserungen notwendig sind, um ein Verfahren zu generieren, welches robust und zuverlässig gegen das kleinste Eigenwert-Eigenvektor-Paar konvergiert.

Mit der zweidimensionalen POISSON-Gleichung wird ein weiteres Modellproblem für finite Elemente eingeführt. Die numerischen Berechnungen zeigen für den kleinsten Eigenwert und den zugehörigen Eigenvektor optimale Ergebnisse.

Schließlich wird in Kapitel 3 die Berechnung von zwei Eigenwerten anhand des finite Differenzen Modellproblems untersucht. Die ursprüngliche Formulierung zeigt dabei einige Schwächen, sodass eine Modifizierung der Problemstellung eingeführt wird. Mit dieser Modifizierung ist die Berechnung von zwei Eigenwerten theoretisch möglich, aber nicht anwendbar. Die Konvergenz ist abhängig von der gewählten Startkonfiguration und von starken Hilfsmitteln, wie beispielsweise zusätzlicher Dämpfung. Nichtsdestotrotz kann die Konvergenz gegen die gewünschten Eigenwerte nicht garantiert werden.

Durch die gewonnenen Erfahrungen werden zwei Methoden zur Berechnung mehrerer Eigenwerte vorgestellt.

Die numerische Umsetzung verwendet das Software-Paket `Amandus`, das auf der finiten Elemente Bibliothek `deal.II` aufbaut.

Abstract

The states of a physical or chemical problem can be expressed with eigenvalues and eigenfunctions, therefore eigenvalue problems are an essential aspect of quantum mechanics. Usually, a combination of the QR algorithm and a KRYLOV subspace method are used to solve these problems.

This thesis is based on the usage of NEWTON's method as a solver for variational eigenvalue problems. First, the eigenvalue problem is formulated as a constrained optimization problem, then the NEWTON's method is applied on the continuous level and finally the discretization is done with finite elements.

The problems that occur while studying this mathematical method and the discussion of their solutions are the central theme of this thesis. Therefore a simple model problem based on finite differences is introduced.

The first numerical calculations are done for the smallest eigenvalue and the corresponding eigenfunction. Results show that improvements have to be performed to produce a method, based on NEWTON's iteration, converging robust and reliable to the smallest pair of eigenvalue and eigenfunction.

A second example is introduced with the two-dimensional POISSON's equation, which is discretized using finite elements. Numerical computations show optimal results for both the smallest eigenvalue and the smallest eigenfunction.

In chapter 3 the computation of two eigenvalues is studied, based on the first model problem using finite differences. It becomes apparent that the original formulation of the optimization problem has some weaknesses, hence a modification is introduced. This modification makes the computation of two eigenvalues theoretically possible, but not applicable. The convergence depends on the starting configuration and some heavy tools, such as strong damping. Nevertheless convergence cannot be assured.

Based on this experience, two methods for obtaining robust computation of several eigenvalues are proposed.

The implementation is based on **Amandus**, an experimentation suite built on the finite element library **deal.II**.

Danksagung

Ich möchte mich bei meinem Betreuer Prof. Dr. Guido Kanschat bedanken, der diese Arbeit ermöglicht hat. Durch seine Betrachtungsweise von Eigenwertproblemen ist die Grundlage zu dieser Arbeit entstanden. Mit professioneller Betreuung, vielen Ideen und Ratschlägen unterstützte er mich während meiner Arbeit am Interdisziplinäres Zentrum für wissenschaftliches Rechnen.

Ich danke den Mitgliedern der Arbeitsgruppe Mathematical Methods of Simulation, für anregende Diskussionen und eine angenehme Arbeitsatmosphäre.

Ebenso bedanke ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden, die mich während des gesamten Studiums unterstützt haben.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Einführung	1
1.2	Klassische Eigenwertberechnung	2
1.3	Charakterisierung des Spektrums von H	5
1.4	Aspekte der Implementierung	8
1.5	GMRES	9
2	Das 1-Eigenwert-Problem	11
2.1	Herleitung	11
2.1.1	Kontinuierliches Minimierungsproblem	11
2.1.2	Diskretisierung mit finiten Elementen	13
2.2	Modellproblem I: Finite-Differenzen-Methode für die 1D-LAPLACE-Gleichung	15
2.2.1	Unterschiede zur Finite-Elemente-Methode	17
2.3	Modellproblem I: Numerische Ergebnisse	17
2.3.1	Vorkonditionierung	19
2.3.2	Einfluss der Startwerte	22
2.3.2.1	Normierung des Startvektors	22
2.3.2.2	Einfluss des Startwertes λ_1^0	24
2.4	Modellproblem II: Finite-Elemente-Methode für die 2D-LAPLACE-Gleichung	26
2.4.1	Diskretisierung und Implementierung	26
2.4.2	Numerische Ergebnisse	27
3	Das k-Eigenwert-Problem	29
3.1	Herleitung	29
3.1.1	Beispiel: Diskretisierung für das 3-Eigenwert-Problem	31
3.1.2	Das NEWTON-Verfahren	33
3.2	Modellproblem I: Numerische Ergebnisse I	33
3.3	Modifizierung von $\nabla\mathcal{L}(U, \Lambda, M)$	37
3.3.1	Modifizierung für das k -Eigenwert-Problem	39

3.4	Modellproblem I: Numerische Ergebnisse II	40
3.4.1	Gedämpftes NEWTON-Verfahren als Strategie zur Bestimmung von Startwerten	42
4	Zusammenfassung, Schlussfolgerung und Ausblick	51
4.1	1-Eigenwert-Problem	51
4.2	k -Eigenwert-Problem	52

1 Einleitung

1.1 Einführung

Eigenwertprobleme bilden einen festen Bestandteil der Quantenmechanik. Um diese beschreiben zu können benötigen wir zunächst Begriffe aus der Funktionalanalysis. Die anschließende physikalische Einführung richtet sich nach [9].

Definition 1.1 (Klassisches Eigenwertproblem)

Es sei $H : V \rightarrow V$ ein selbstadjungierter Differentialoperator auf einem Hilbertraum V über dem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Das klassische Eigenwertproblem in starker Formulierung sucht Lösungen $(u, \lambda) \in V \setminus \{0\} \times \mathbb{R}$ von

$$H[u] = \lambda u. \tag{1.1}$$

Dabei bezeichnet man λ als Eigenwert und u als Eigenfunktion.

Die Eigenschaft *selbstadjungiert* bedeutet für beliebige $v_1, v_2 \in V$ ist

$$(Hv_1, v_2)_V = (v_1, Hv_2)_V.$$

Als selbstadjungierter Operator besitzt H reelle Eigenwerte und ein vollständiges Orthonormalsystem aus Eigenfunktionen. In der Quantenmechanik werden Eigenfunktionen als Eigenzustände bezeichnet, Eigenwerte entsprechen Messwerten. Sofern alle Eigenwerte und Eigenfunktionen bekannt sind, lässt sich die Anwendung des Operators über die Eigenzustände beschreiben:

$$H[v] = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \lambda_i u_i, \tag{1.2}$$

wobei $v = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i u_i$.

Beispiel 1.2 (Wasserstoffatom in 3D, nach [17])

Der HAMILTON-Operator der SCHRÖDINGER-Gleichung für das Elektron des Wasserstoffatoms lautet:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V. \tag{1.3}$$

Dabei ist $V[\mathbf{x}] = -\frac{e^2}{\|\mathbf{x}\|}$ das COULOMB-Potential, \hbar das reduzierte PLANCKsche Wirkungsquantum, e die Ladung des Elektrons und m_e die Masse des Elektrons.

Der Messwert ist dabei die Gesamtenergie des Systems. Daher beschreiben die Eigenwerte die Energieniveaus. Aus den Eigenzuständen lassen sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten (Orbitale) des Elektrons durch (u_k, u_k) bestimmen. Die exakten Formeln können bei Bedarf in [17, Kapitel 1.3] nachgeschlagen werden.

Das Wasserstoffatom ist neben dem harmonischen Oszillator ein typisches Beispiel der Quantenmechanik. Sie bilden Ausnahmen, denn bei beiden Problemen lassen sich die Eigenzustände analytisch und in geschlossener Form bestimmen. Die meisten anderen quantenmechanischen Probleme benötigen numerische Hilfsmittel.

1.2 Klassische Eigenwertberechnung

Das klassische Verfahren der Eigenwertberechnung verläuft in der Anwendung nach dem folgenden Schema.

Schritt 1: Diskretisiere H und erhalte eine Matrix $\mathbf{A}_H \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Schritt 2: Reduziere das System auf eine Matrix $\mathbf{H}_m \in \mathbb{R}^{m \times m}$, mit $m \ll n$.

Schritt 3: Bestimme die Eigenwerte von \mathbf{H}_m .

Schritt 1: Diskretisierung

Für die Diskretisierung eines Differentialoperators existieren viele Methoden. In Abschnitt 2.1.2 wird die Finite-Elemente-Methode betrachtet. Ein weiteres Modellproblem dieser Arbeit basiert auf finiten Differenzen, siehe Abschnitt 2.2.

Eine Schwierigkeit der Diskretisierung tritt auf, sofern H ein nicht-linearer Differentialoperator ist. Dann muss vor der Diskretisierung eine Linearisierung des kontinuierlichen Problems erstellt werden.

Das NEWTON-Verfahren als Löser für nicht-lineare Aufgaben bietet sich daher als Verfahren der Wahl an. Durch die Anwendung des NEWTON-Verfahrens wird die Analyse des kontinuierlichen Problems vereinfacht, da in jedem Schritt ein lineares Problem zu diskretisieren ist.

Die Anwendung von Schritt 2 ist optional und bietet Vorteile, auf welche im Anschluss an den folgenden Schritt 3 eingegangen wird.

Schritt 3: Eigenwertberechnung

Dieser Abschnitt richtet sich nach [20]. Für die Berechnung von einem oder mehreren Eigenwerten gibt es unterschiedliche Methoden. Der betragsmäßig größte Eigenwert ergibt sich mit der Potenzmethode nach VON MISES.

Definition 1.3 (Potenzmethode nach VON MISES)

Es seien λ_i die Eigenwerte von \mathbf{A}_H mit zugehörigen Eigenvektoren \mathbf{u}_i , und \mathbf{x}^0 ein gewählter Startvektor. Unter den folgenden Voraussetzungen

- $|\lambda_n| > |\lambda_{n-1}| \geq |\lambda_{n-2}| \geq \dots \geq |\lambda_1|$
- $\alpha_n \neq 0$ mit $\mathbf{x}^0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{u}_i$

konvergiert die Iteration mit einem beliebigen Index $k \in \{1, \dots, n\}$ gegen den größten Eigenwert.

$$\begin{aligned} 1) \quad & \tilde{\mathbf{x}}^i = \mathbf{A}_H \mathbf{x}^{i-1}, \\ 2) \quad & \mathbf{x}^i = \frac{\tilde{\mathbf{x}}^i}{\|\tilde{\mathbf{x}}^i\|}, \\ 3) \quad & \lambda_n^i = \frac{(\tilde{\mathbf{x}}^i)_k}{(\mathbf{x}^{i-1})_k}. \end{aligned}$$

Die Berechnung des kleinsten Eigenwertes erfolgt mit der Anwendung auf \mathbf{A}_H^{-1} , was dem Lösen eines Gleichungssystems in jedem Schritt entspricht. Zur Steigerung der Konvergenzgeschwindigkeit gegen den kleinsten Eigenwert wird die Iteration mit Shift verwendet. Dabei wird in jedem Schritt das Gleichungssystem mit der Matrix $(\mathbf{A}_H - \lambda_n^i \mathbf{I})^{-1}$ gelöst.

Bemerkung 1.4 (Notation)

In allen Kapiteln wird mit

$$(v, w) := \int_{\Omega} v(x)w(x)dx$$

das L^2 -Skalarprodukt bezeichnet. Die entsprechende Norm ist $\|v\| = \sqrt{(v, v)}$. Sofern Vektoren $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ eingesetzt werden handelt es sich um das l^2 -Skalarprodukt:

$$(\mathbf{v}, \mathbf{w}) := \sum_{i=1}^n v_i w_i.$$

Die Berechnung von mehreren Eigenwerten erfolgt über die QR -Iteration.

Definition 1.5 (QR -Iteration)

Mit der Definition $\mathbf{A}^0 := \mathbf{A}_H$ lautet die QR -Iteration:

$$\begin{aligned} \text{Berechne die } QR\text{-Zerlegung} \quad \mathbf{A}^i &= \mathbf{Q}\mathbf{R}, \\ \text{Setze} \quad \mathbf{A}^{i+1} &= \mathbf{R}\mathbf{Q}. \end{aligned}$$

Sofern alle Eigenwerte separiert sind, das heißt: $|\lambda_n| > |\lambda_{n-1}| > \dots > |\lambda_1|$, gilt:

$$\{a_{11}^i, \dots, a_{nn}^i\} \rightarrow \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}, \quad i \rightarrow \infty.$$

Die QR -Zerlegung kann beispielsweise mit der textscHouseholder-Spiegelung oder der GIVENS-Rotation berechnet werden. Die Berechnung der QR -Zerlegung ist mit großem Rechenaufwand verbunden. Nach [20] werden $\frac{2}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ arithmetische Operationen benötigt.

Die beiden vorgestellten Verfahren berechnen entweder einen Eigenwert oder alle Eigenwerte eines gegebenen Problems. Für die Probleme der Quantenmechanik ist man an den k kleinsten bzw. größten Eigenwerten interessiert. Dafür ist k (heuristisch) so gewählt, dass der Operator durch Gleichung (1.2) hinreichend gut beschrieben wird. Dies ist neben der Reduktion des Rechenaufwands ein wichtiger Grund für den optionalen Schritt 2.

Schritt 2: Reduktion

Die Idee der Modellreduktion besteht darin die Systemmatrix \mathbf{A}_H durch eine wesentlich kleinere Matrix \mathbf{H}_m zu ersetzen, für die gilt:

$$\lambda_i(\mathbf{H}_m) \approx \lambda_i(\mathbf{A}_H),$$

für $i = 1, \dots, k < m$.

Eine große Klasse von Verfahren, die diese Eigenschaften erfüllt, basiert auf der Projektion in KRYLOV-Unterräumen:

$$\mathcal{K}_m(\mathbf{v}, \mathbf{A}_H) = \{\mathbf{A}_H^i \mathbf{v}, i = 0, \dots, m - 1\}, \tag{1.4}$$

mit einem gegebenen Startvektor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$. Beispiele für diese Verfahren sind das ARNOLDI-Verfahren für beliebige Matrizen, der LANCZOS-Algorithmus für symmetrische Matrizen, oder die in der Quantenchemie beliebten DAVIDSON- bzw. JACOBI-DAVIDSON-Verfahren. Die letzteren Verfahren basieren dabei auf KRYLOV-Räumen der Form $\mathcal{K}_m(\mathbf{v}, \mathbf{A}_H - \tilde{\lambda}\mathbf{I})$, mit einer Eigenwertapproximation $\tilde{\lambda}$.

Bei allen Verfahren wird eine projizierte Lösung im Raum \mathcal{K}_m gesucht. Dabei wird eine Matrix \mathbf{H}_m in oberer HESSENBERG-Gestalt aufgebaut:

$$\mathbf{H}_m = \begin{pmatrix} h_{1,1} & & & * \\ h_{2,1} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \end{pmatrix}$$

Für diese Matrizen beträgt der Aufwand der QR -Zerlegung nur noch $2m^2 + \mathcal{O}(m)$ arithmetische Operationen, nach [20]. Dieser Wert kann nicht direkt mit den $\mathcal{O}(n^3)$ Operationen der QR -Iteration auf \mathbf{A}_H verglichen werden, da auch der Aufwand der Projektionsverfahren beachtet werden muss.

Alle in diesem Abschnitt aufgeführten KRYLOV-Unterraum-Verfahren sind in [16] im Detail beschrieben.

1.3 Charakterisierung des Spektrums von H

In diesem Abschnitt wird der Grundstein für das k -Eigenwert-Problem (siehe Definition 3.1) gelegt. Das Ziel dieses Abschnittes ist eine Beschreibung der Eigenwerte und Eigenfunktionen von H . Dabei folgen wir CIARLETs Weg in [5]. Eine weitere Einführung über quadratische Formen findet sich in [19].

Das Eigenwertproblem in starker Formulierung aus Definition 1.1 lautet in variationeller Form: Finde $(u, \lambda) \in V \setminus \{0\} \times \mathbb{R}$, sodass

$$a(u, v) = \lambda(u, v), \quad \forall v \in V. \quad (1.5)$$

Dabei ist $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ die zu H zugehörige Bilinearform $a(u, v) := (H[u], v)_V$. Diese ist symmetrisch, da H selbstadjungiert ist. Abhängig von der Ordnung des Differentialoperators H ist entweder $V = H^1(\Omega)$ oder $V = H^2(\Omega)$. Zunächst betrachten wir eine abgeänderte variationelle Formulierung:

$$a(u, v) = (f, v), \quad \forall v \in V, \quad (1.6)$$

mit $f \in L^2(\Omega)$. Diese Problemstellung ist eine wohlbekannte in der Numerik partieller Differentialgleichungen. Mit dieser lässt sich der folgende Satz formulieren, der auf dem Lemma von LAX-MILGRAM nach [13] und [5] basiert.

Satz 1.6 (Existenz und Eindeutigkeit)

Sei V ein Hilbertraum, $f \in L^2(\Omega)$ und $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige und elliptische Bilinearform, das heißt:

- $a(v, w) \leq M \|v\|_V \|w\|_V, \forall v, w \in V.$
- $\exists \alpha > 0, \forall v \in V : a(v, v) \geq \alpha \|v\|_V^2.$

Dann existiert eine eindeutige Lösung $u \in V$ von

$$a(u, v) = (f, v), \quad \forall v \in V,$$

die stetig von den Daten abhängt:

$$\|u\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|f\|.$$

Nachdem die Frage der grundsätzlichen Lösbarkeit von (1.6) gegeben ist, müssen wir einige weitere Schritte durchführen, denn für Eigenwertprobleme ist die rechte Seite gegeben durch $f = \lambda u$. Hierfür betrachten wir den Lösungsoperator

$$G : L^2(\Omega) \rightarrow V, \\ f \mapsto u,$$

wobei u die Lösung von (1.6) ist. Ziel ist es nun mit Aussagen über die Eigenwerte μ von G Rückschlüsse auf die Eigenwerte von $a(\cdot, \cdot)$ zu ziehen. Zunächst ist diese Abbildung beschränkt, denn es gilt mit der HÖLDER-Ungleichung

$$\alpha \|u\|_V^2 \leq a(u, u) = (f, u) \leq \|f\| \|u\| \leq \|f\| \|u\|_V,$$

und somit

$$\|G[f]\|_V = \|u\|_V \leq \alpha^{-1} \|f\|.$$

Die Einbettung $\text{Id} : V \hookrightarrow L^2(\Omega)$ ist kompakt auf dem beschränkten Gebiet Ω (siehe [13]). Da die Komposition eines beschränkten Operators mit einem kompakten Operator ebenfalls kompakt ist, ist $\tilde{G} := G \circ \text{Id}$ mit

$$\tilde{G} : V \rightarrow V, \\ f \mapsto u,$$

ebenfalls kompakt. Diese Abbildung ist wohldefiniert, denn $f = \lambda u \in V$. Des Weiteren gilt

$$u = \tilde{G}[f] = \tilde{G}[\lambda u] = \lambda \tilde{G}[u], \tag{1.7}$$

falls $a(u, u) = \lambda(u, u)$, sodass die Eigenwerte von \tilde{G} den inversen Eigenwerten von H entsprechen.

Wir betrachten nun den Hilbertraum $(V, a(\cdot, \cdot))$. Der Eigenwertsatz nach RIESZ

und SCHAUDER (siehe [1]) für den symmetrischen kompakten Operator \tilde{G} besagt, dass die Eigenwerte reellwertig und positiv sind. Außerdem besitzen die Eigenwerte den einzigen möglichen Häufungspunkt bei 0.

Dies bedeutet, dass die Eigenwerte von H eine *wachsende* Folge von strikt positiven Eigenwerten bilden:

$$0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \quad (1.8)$$

die den einzigen möglichen Häufungspunkt ∞ besitzen.

Für die vorangegangene Anwendung des Satzes nach RIESZ und SCHAUDER fehlt der Nachweis der Symmetrie von \tilde{G} :

$$a(\tilde{G}u, v) = (u, v) = (v, u) = a(\tilde{G}v, u) = a(u, \tilde{G}v).$$

Der erste Schritt folgt aus der Beziehung

$$(\lambda u, v) = a(u, v) = a(\lambda \tilde{G}[u], v),$$

den \tilde{G} ist nach Definition der Lösungsoperator. Eine weitere Aussage des Satzes von RIESZ und SCHAUDER ist, dass die zugehörigen Eigenfunktionen \tilde{u}_k von \tilde{G} ein vollständiges Orthogonalsystem von $(V, a(\cdot, \cdot))$ bilden. Für die Eigenfunktionen u_k von H bedeutet dies:

$$a(u_k, u_l) = \lambda_k \delta_{kl},$$

und mit dem variationellen Eigenwertproblem (1.5) folgt, dass sie ebenso ein vollständiges *Orthonormalsystem* von $(L^2(\Omega), (\cdot, \cdot))$ bilden:

$$(u_k, u_l) = \delta_{kl} = \begin{cases} 1 & k = l \\ 0 & k \neq l \end{cases}.$$

Um die Charakterisierung der Eigenwerte abzuschließen wird nun das folgende Hilfsmittel definiert.

Definition 1.7 (RAYLEIGH-Quotient)

Für ein beliebiges $v \in V$ ist der RAYLEIGH-Quotient definiert durch:

$$R(v) = \frac{a(v, v)}{(v, v)}. \quad (1.9)$$

Mit dem RAYLEIGH-Quotienten lautet die erste Charakterisierung der Eigenwerte von H wie folgt.

Satz 1.8 (Charakterisierung I: Min-Theorem, nach [5])

Für die Eigenwerte von H gilt:

- $\lambda_1 = \inf_{v \in V} R(v) = R(u_1)$.
- $\lambda_k = \inf_{v \in V} \{R(v), \text{ mit } (v, u_l) = 0 \text{ für } 1 \leq l \leq k-1\} = R(u_k)$.

Dieser Satz motiviert ein numerisches Verfahren, welches konsekutiv die Eigenwerte berechnet. Generell möchten wir in dieser Arbeit die k kleinsten Eigenwerte gleichzeitig bestimmen. Auf das konsekutive Verfahren wird in Kapitel 4 kurz eingegangen. Für die gleichzeitige Bestimmung der Eigenwerte gibt das Min-Max-Theorem eine Grundlage.

Satz 1.9 (Charakterisierung II: Min-Max-Theorem, nach [19])

Mit der Bezeichnung V_k als k -dimensionaler Unterraum von V gilt für die Eigenwerte von H :

$$\lambda_k = \inf_{V_k \subset V} \max_{v \in V_k} R(v).$$

Aufbauend auf dieses Theorem wird in Kapitel 2 das 1-Eigenwert-Problem und in Kapitel 3 das k -Eigenwert-Problem als Minimierungsaufgabe gestellt.

1.4 Aspekte der Implementierung

In diesem Abschnitt wird kurz auf die verwendete Software für die Implementierung des NEWTON-Verfahrens, sowie die Problematik von Eigenwert-Problemen eingegangen.

Der Grundpfeiler für die Implementierung bildet die finite Elemente Bibliothek `deal.II` [3]. Diese Bibliothek erstellt unter anderem das Gitter, auf dem der Differentialoperator diskretisiert wird und enthält den verwendeten GMRES-Löser (siehe Definition 1.10).

Auf `deal.II` baut das Softwarepaket `Amandus` von Guido Kanschat [7] auf. `Amandus` ist ein sehr gutes Werkzeug um die Verwendung von `deal.II` zu vereinfachen. Es übernimmt viele Schritte, wie beispielsweise die effiziente Assemblierung von Matrizen.

Die größte Problematik beider Softwarepakete ist, dass die Struktur der eingebauten Algorithmen, wie beispielsweise das NEWTON-Verfahren, auf feste Vektor- und Matrixgrößen angewiesen sind. Diese Größen stammen von der Anzahl Freiheitsgrade auf dem zugrunde liegenden Gitter, siehe Abschnitt 2.4.

Bei Eigenwertproblemen sind Lösungspaare der Form $(\mathbf{u}, \lambda) \in \mathbb{R}^{n+1}$ gesucht. Dieser eine zusätzliche Freiheitsgrad ist nicht einfach zu implementieren. Gelöst wurde dies über eine Klasse, die das Aufbauen und Invertieren der Systemmatrix übernimmt. Zum Beispiel lautet die Systemmatrix des 1-Eigenwert-Problems nach Abschnitt 2.1.2:

$$\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{A} - 2\lambda\mathbf{M} & -2\mathbf{M}\mathbf{u} \\ -2\mathbf{u}^\top \mathbf{M} & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{M} werden von `Amandus` beziehungsweise `deal.II` erstellt. Das Zusammensetzen in Form eines „Rezeptes“ wird mit Hilfe der `deal.II` Klasse `LinearOperator` von Matthias Maier, Mauro Bardelloni, Luca Heltai [8] übernommen. Hierbei werden die Systemmatrix nicht explizit aufgebaut.

1.5 GMRES

In jedem Schritt der NEWTON-Iteration (siehe Definition 2.4) wird ein Gleichungssystem der Form $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ gelöst. Da die Systemmatrix nicht positiv definit ist und mit der Modifizierung in Abschnitt 3.3 auch unsymmetrisch ist, wird der folgende GMRES-Löser verwendet.

Definition 1.10 (GMRES für $\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{b}$, nach [15])

Ausgehend von einem gewählten Startwert \mathbf{u}_0 berechnet das GMRES-Verfahren zunächst eine Matrix $\mathbf{H}_m \in \mathbb{R}^{(m+1) \times m}$. Und löst anschließend eine Minimierungsaufgabe um $\mathbf{y}_m \approx \mathbf{u}$ zu bestimmen.

Berechne

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_0 &= \mathbf{A}\mathbf{u}_0 \\ \beta &= \|\mathbf{r}_0\| \\ \mathbf{v}_1 &= \frac{\mathbf{r}_0}{\beta} \end{aligned}$$

Für $j = 1, 2, \dots, m_{\max}$

$$\tilde{\mathbf{w}}_j = \mathbf{A}\mathbf{v}_j$$

Für $i = 1, 2, \dots, j$

$$h_{ij} = (\tilde{\mathbf{w}}_j, \mathbf{v}_i)$$

$$\mathbf{w}_j = \tilde{\mathbf{w}}_j - h_{ij}\mathbf{v}_i$$

$$h_{j+1,j} = \|\mathbf{w}_j\|$$

Falls $h_{j+1,j} = 0$ oder $j = m_{\max}$

$$m = j$$

$$\mathbf{y}_m = \arg \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m} \|\beta \mathbf{e}_1 - \mathbf{H}_m \mathbf{y}\| \quad \Rightarrow \text{STOP}$$

Sonst

$$\mathbf{v}_{j+1} = \frac{\mathbf{w}_j}{h_{j+1,j}}$$

Der Parameter m_{\max} muss nicht gewählt werden.

Da das GMRES-Verfahren bei jedem Schritt einen neuen orthogonalen Basisvektor erzeugt entstehen zwei Probleme. Die Orthogonalisierung ist nicht numerisch stabil und die Systemgröße von \mathbf{H}_m im Optimierungsproblem wächst an. Daher wird das folgende GMRES-Verfahren mit Neustart verwendet.

Definition 1.11 (GMRES mit Neustart, nach [15])

Nach der Wahl eines Startwertes \mathbf{y}_0^i lautet das GMRES-Verfahren mit Neustart:

Iteriere für $i = 1, \dots, i_{\max}$

Setze $\mathbf{u}_0 = \mathbf{y}_0^i$
Berechne \mathbf{y}_m^i mit dem GMRES-Verfahren,

Die genaue Konfiguration des GMRES-Verfahrens wird in den Abschnitten der numerischen Testrechnungen beschrieben.

2 Das 1-Eigenwert-Problem

In diesem Kapitel wird die Bestimmung des kleinsten Eigenwertes mit dem NEWTON-Verfahren untersucht. Sowohl in der Theorie als auch in der Implementierung ist die Bestimmung eines Eigenwertes wesentlich einfacher als die Berechnung mehrerer Eigenwerte. Die verwendeten Techniken sind dabei nahezu identisch, sodass im nachfolgenden Kapitel zum k -Eigenwert-Problem auf diese zurückgegriffen wird. Dementsprechend ist die Gesamtheit dieses Kapitels ausführlich dargestellt.

2.1 Herleitung

2.1.1 Kontinuierliches Minimierungsproblem

In diesem Abschnitt wird das Eigenwert-Problem als Minimierungsproblem gestellt und einige Hilfsmittel für die Anwendung des NEWTON-Verfahren bereitgestellt. Ausgehend von Satz 1.9 wird das 1-Eigenwert-Problem wie folgt definiert.

Definition 2.1 (1-Eigenwert-Problem)

Sei V ein geeigneter Funktionenraum und $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine symmetrische, positiv definite Bilinearform. Die Minimierungsaufgabe zur Bestimmung des kleinsten Eigenwertes lautet.

Finde $u^* \in V$, sodass:

$$u^* = \arg \min_{u \in V} a(u, u) \quad (2.1a)$$

unter der Nebenbedingung $0 = (u, u) - 1. \quad (2.1b)$

Der Funktionenraum V ist abhängig vom zugrunde liegenden Differentialoperator. So ist beispielsweise für den LAPLACE-Operator $-\Delta u$, in einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, die Bilinearform gegeben durch $a(u, u) = (\nabla u, \nabla u)$. Die hierfür geforderte Regularität an u ist durch den SOBOLEV-Raum $V = H^1(\Omega)$ erfüllt.

Ausgehend von der Minimierungsaufgabe ist es das Ziel das Minimum der LAGRANGE-Funktion

$$\mathcal{L}(u, \lambda) = a(u, u) - \lambda[(u, u) - 1], \quad (2.2)$$

mit dem LAGRANGE-Multiplikator $\lambda \in \mathbb{R}$, zu finden. Die notwendige Bedingung eines Minimums (u^*, λ^*) ist $\nabla \mathcal{L}(u^*, \lambda^*)[v, \mu] = 0$ für beliebige Testfunktionen $(v, \mu) \in V \times \mathbb{R}$.

Auf dieses Nullstellenproblem wird im Anschluss an die Diskretisierung im nachfolgenden Abschnitt das NEWTON-Verfahren angewandt. Hierfür werden die ersten und zweiten Ableitungen benötigt.

Lemma 2.2 (Gradient)

Der Gradient der LAGRANGE-Funktion (2.2) ist gegeben durch

$$\nabla \mathcal{L}(u, \lambda)[\delta u, \delta \lambda] = \begin{pmatrix} 2a(u, \delta u) - 2\lambda(u, \delta u) \\ -\delta \lambda[(u, u) - 1] \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Beweis. Für die Berechnung der Ableitungen verwenden wir die folgende Definition der GÂTEAUX-Ableitung für eine Abbildung $F : D \subset X \rightarrow \mathbb{R}$. Dabei ist X ein normierter Raum und D offen.

$$\delta_F(x_0)[h] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F(x_0 + \varepsilon \delta x) - F(x_0)}{\varepsilon} = \left. \frac{dF(x_0 + \varepsilon \delta x)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \quad (2.4)$$

Für die Ableitung nach u in Richtung δu ergibt sich:

$$\begin{aligned} \delta_{\mathcal{L}}(u, \lambda)[\delta u] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{a(u + \varepsilon \delta u, u + \varepsilon \delta u) - \lambda(u + \varepsilon \delta u, u + \varepsilon \delta u) \\ &\quad - a(u, u) + \lambda(u, u)\} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{2a(u, \varepsilon \delta u) + a(\varepsilon \delta u, \varepsilon \delta u) - 2\lambda(u, \varepsilon \delta u) - \lambda(\varepsilon \delta u, \varepsilon \delta u)\} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \{2a(u, \delta u) + \varepsilon a(\delta u, \delta u) - 2\lambda(u, \delta u) - \lambda \varepsilon (\delta u, \delta u)\} \\ &= 2a(u, \delta u) - 2\lambda(u, \delta u). \end{aligned}$$

Für die Ableitung nach λ in Richtung $\delta \lambda$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \delta_{\mathcal{L}}(u, \lambda)[\delta \lambda] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{a(u, u) - (\lambda + \varepsilon \delta \lambda)[(u, u) - 1] - a(u, u) + \lambda[(u, u) - 1]\} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{-\varepsilon \delta \lambda[(u, u) - 1]\} \\ &= -\delta \lambda[(u, u) - 1]. \end{aligned}$$

□

Lemma 2.3 (HESSE-Matrix)

Die HESSE-Matrix der LAGRANGE-Funktion lautet:

$$\nabla^2 \mathcal{L}(u, \lambda)[v, \mu][\delta u, \delta \lambda] = \begin{pmatrix} 2a(\delta u, v) - 2\lambda(\delta u, v) & -2(u, v)\delta \lambda \\ -2(\delta u, u)\mu & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Beweis. Der Beweis erfolgt analog zum Beweis von Lemma 2.2 unter Anwendung von (2.4). Der Gradient der LAGRANGE-Funktion mit beliebiger Testfunktion $(v, \mu) \in V \times \mathbb{R}$ lautet:

$$\nabla \mathcal{L}(u, \lambda)[v, \mu] = \begin{pmatrix} 2a(u, v) - 2\lambda(u, v) \\ -\mu[(u, u) - 1] \end{pmatrix}.$$

Nun werden beide Komponenten des Gradienten nach u mit Richtung δu und nach λ mit Richtung $\delta \lambda$ differenziert.

$$\begin{aligned} \delta_{\nabla \mathcal{L}_1}[u, \lambda](v, \mu)[\delta u] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{2a(u + \varepsilon \delta u, v) - 2\lambda(u + \varepsilon \delta u, v) - 2a(u, v) + 2\lambda(u, v)\} \\ &= 2a(\delta u, v) - 2\lambda(\delta u, v). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{\nabla \mathcal{L}_2}[u, \lambda](v, \mu)[\delta u] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{-\mu[(u + \varepsilon \delta u, u + \varepsilon \delta u) - 1] + \mu[(u, u) - 1]\} \\ &= -2\mu(\delta u, u). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{\nabla \mathcal{L}_1}[u, \lambda](v, \mu)[\delta \lambda] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{2a(u, v) - 2(\lambda + \varepsilon \delta \lambda)(u, v) - 2a(u, v) + 2\lambda(u, v)\} \\ &= -2\delta \lambda(u, v). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{\nabla \mathcal{L}_2}[u, \lambda](v, \mu)[\delta \lambda] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{-\mu[(u, u) - 1] + \mu[(u, u) - 1]\} \\ &= 0. \end{aligned}$$

□

2.1.2 Diskretisierung mit finiten Elementen

In diesem Abschnitt wird das NEWTON-Verfahren in der Weise formuliert wie es auf dem Rechner durchführbar ist: Mit Matrizen und Vektoren von endlicher Dimension.

Für die Diskretisierung des kontinuierlichen Gradienten und der HESSE-Matrix wird $V_h \subset V$, ein endlichdimensionaler Unterraum mit Basis $\{v^i, i = 1, \dots, n\}$,

gewählt. Das generelle Vorgehen bei Variationsproblemen mit finiten Elementen ist die Beschreibung der Problemstellung auf dieser Basis. So lautet die Formulierung für den Gradienten nach Lemma 2.2 zunächst

$$\nabla \mathcal{L}(u_h, \lambda_h)[v, \mu] = \begin{pmatrix} 2a(u_h, v) - 2\lambda(u_h, v) \\ -\mu[(u_h, u_h) - 1] \end{pmatrix} = 0, \quad \forall (v, \mu) \in V_h \times \mathbb{R}. \quad (2.6)$$

mit der äquivalenten Formulierung in den Basisfunktionen

$$\nabla \mathcal{L}(u_h, \lambda_h)[v^i, 1] = \begin{pmatrix} 2a(u_h, v^i) - 2\lambda(u_h, v^i) \\ -[(u_h, u_h) - 1] \end{pmatrix} = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.7)$$

Für den Raum V_h wurde bereits $\{v^i, i = 1, \dots, n\}$ als Basis gewählt. Das Verschwinden von μ liegt in der offensichtliche Wahl von $\{1\}$ als Basis von \mathbb{R} .

In der gewählten Basis lässt sich die Eigenfunktion darstellen als

$$u_h = \sum_{j=1}^n u_h^j v^j.$$

Hierbei sind u_h^j skalare Koeffizienten und v^j Testfunktionen. Die n Gleichungen des diskreten Gradienten (2.7) sind äquivalent zu folgender vektorwertigen Identität

$$\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{A}\mathbf{u} - 2\lambda\mathbf{M}\mathbf{u} \\ -(\mathbf{u}^\top \mathbf{M}\mathbf{u} - 1) \end{pmatrix} = 0, \quad (2.8)$$

mit Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{M} , sowie dem Koeffizientenvektor \mathbf{u} :

$$\mathbf{A} = (a(v^j, v^i))_{i,j=1}^n, \quad \mathbf{M} = ((v^j, v^i))_{i,j=1}^n, \quad \mathbf{u} = (u_h^j)_{j=1}^n = ((u_h, v^j))_{j=1}^n.$$

Auf analogem Weg ergibt sich aus der HESSE-Matrix des unendlich dimensionalen Raumes V aus Lemma 2.3 die diskrete HESSE-Matrix:

$$\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{A} - 2\lambda\mathbf{M} & -2\mathbf{M}\mathbf{u} \\ -2\mathbf{u}^\top \mathbf{M} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Mit diesen beiden diskreten Ableitungen lässt sich nun das NEWTON-Verfahren formulieren.

Definition 2.4 (NEWTON-Verfahren für das 1-Eigenwert-Problem)
 Wähle einen geeigneten Startvektor $\mathbf{u}^0 \in \mathbb{R}^n$ und einen Startwert $\lambda^0 \in \mathbb{R}$.

Sofern $\|\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}^t, \lambda^t)\| > Tol,$

Löse $\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}^t, \lambda^t)[\delta \mathbf{u}, \delta \lambda] = -\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}^t, \lambda^t),$

Berechne $\mathbf{u}^{t+1} = \mathbf{u}^t + \delta \mathbf{u},$

Berechne $\lambda^{t+1} = \lambda^t + \delta \lambda.$

Bemerkung 2.5

Die Wahl geeigneter Startwerte ist für die Konvergenz des NEWTON-Verfahrens entscheidend. Da jedes Eigenwert-Eigenvektor-Paar ein Sattelpunkt der Minimierungsaufgabe ist, wird der Algorithmus bei schlechter Wahl gegen ein beliebiges Paar konvergieren. Dieses Verhalten wird sich in den numerischen Ergebnissen widerspiegeln.

Sofern bekannt ist, dass die Eigenwerte von $a(\cdot, \cdot)$ positiv sind eignet sich $\lambda^0 = 0$ als Startwert. Dies ist beispielsweise beim LAPLACE-Operator gegeben.

2.2 Modellproblem I: Finite-Differenzen-Methode für die 1D-LAPLACE-Gleichung

Das Ziel dieses Abschnittes ist ein Modellproblem einzuführen, das für die ersten Testrechnungen des NEWTON-Verfahrens geeignet ist. Da sich auch bei einfachen Problemstellungen schon eine Vielzahl von Schwierigkeiten ergeben wird im 1. Modellproblem auf finite Elemente verzichtet. Berechnungen mit finiten Elementen sind in Abschnitt 2.4 aufgeführt.

Es wird nun die Finite-Differenzen-Methode mit einer einfachen partiellen Differentialgleichung eingeführt. Die daraus entstehende Systemmatrix ist sehr ähnlich zu Finite-Elemente-Matrizen. Sie ist unter anderem symmetrisch, positiv definit und eine dünnbesetzte Bandmatrix.

Durch die Verwendung von finiten Differenzen ergeben sich kleine Unterschiede in der Herleitung des NEWTON-Verfahrens. Auf diese Unterschiede wird abschließend eingegangen.

Wir beginnen mit der starken Formulierung des ersten Randwertproblems des

LAPLACE-Operators. Finde $u \in C^2(\Omega)$, sodass

$$u''(x) = f(x), \quad x \in \Omega \quad (2.10a)$$

$$u(0) = 0, \quad (2.10b)$$

$$u(1) = 0, \quad (2.10c)$$

auf dem Einheitsintervall $\Omega = [0, 1] \subset \mathbb{R}$.

Um dieses Problem zu Lösen wird Ω in $n+1$ äquidistante Intervalle $\Omega_i = [x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, n$ unterteilt. Die $n+2$ Punkte gegeben durch $x_i = ih$ (für $i = 0, \dots, n+1$) mit $h = 1/(n+1)$ werden als Stützstellen bezeichnet.

In den inneren Stützstellen wird die zweite Ableitung aus (2.10) mit dem zentralen Differenzenquotienten zweiter Ordnung approximiert.

$$h^{-2} \cdot [-u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1}] = f(x_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Hier wurde die Notation u_i für die Approximation $u_i \approx u(x_i)$ verwendet. Diese n Gleichungen sind äquivalent zu dem linearen Gleichungssystem

$$\mathbf{A}_n \mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (2.11)$$

mit der Systemmatrix $\mathbf{A}_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$, dem approximierenden Lösungsvektor $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ und der rechten Seite $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$:

$$\mathbf{A}_n = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = (f(x_i))_{i=1}^n, \quad \mathbf{u} = (u_i)_{i=1}^n.$$

In der ersten und letzten Zeile wurden die Randwerte $u_0 = u_{n+1} = 0$ einbezogen. Für diese Matrix sind die exakten Eigenwerte und Eigenfunktionen bekannt.

Lemma 2.6 (Eigenwerte und Eigenvektoren)

Für beliebiges $n \in \mathbb{N}$ sind die Eigenwerte und Eigenvektoren der 1D-Finite-Differenzen-Matrix der LAPLACE-Gleichung gegeben durch

$$\lambda_l = \frac{2}{h^2} - \frac{2}{h^2} \cos(lh\pi) \quad l = 1, \dots, n \quad (2.12)$$

$$\mathbf{u}_l = (\sin(ilh\pi))_{i=1, \dots, n} \quad l = 1, \dots, n. \quad (2.13)$$

Dieses Lemma folgt aus den Werten des 5-Punkte-Sterns in [4, Kapitel 6].

2.2.1 Unterschiede zur Finite-Elemente-Methode

Im Gegensatz zu Abschnitt 2.1.2 basiert die Theorie nun nicht auf dem variationalen Ansatz aus Definition 2.1. In der Herleitung wurden die Ableitungen für das NEWTON-Verfahren auf kontinuierlicher Ebene bestimmt. Und anschließend mit finiten Elementen diskretisiert.

Analog kann auch bei gegebener Matrix \mathbf{A} das endlichdimensionale Minimierungsproblem

$$\mathbf{u}^* = \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{u}^\top \mathbf{A} \mathbf{u}, \quad (2.14a)$$

$$\text{unter der Nebenbedingung} \quad 0 = \mathbf{u}^\top \mathbf{u} - 1, \quad (2.14b)$$

betrachtet werden. Die Herleitung unterscheidet sich im Wesentlichen in der Verwendung des l^2 -Skalarprodukts für Vektoren, an Stelle des L^2 -Skalarprodukts für Funktionen. Eine ausführliche Herleitung findet sich in den Vortragsfolien [18] von H. Schwetlick, oder im Artikel [10] von G. Peters and J.H. Wilkinson.

Durch die Verwendung der Finite-Elemente-Methode ergeben sich aus allen Termen der Form (u, v) bei Diskretisierung Massematrizen. Diese entfallen bei Verwendung von finiten Differenzen. Im nachfolgenden Beispiel wird dieser Umstand durch Identitätsmatrizen $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ verdeutlicht.

Beispiel 2.7 (Finite Differenzen)

Für das 1-Eigenwert-Problem ist das lineare Gleichungssystem im NEWTON-Verfahren nun gegeben durch

$$\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda) \begin{pmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \delta \lambda \end{pmatrix} = -\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda),$$

mit der Matrix $\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda) \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$ und dem Vektor $\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda) \in \mathbb{R}^{n+1}$, wobei:

$$\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{A} - 2\lambda \mathbf{I} & -2\mathbf{u} \mathbf{I} \\ -2\mathbf{u}^\top \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{A} \mathbf{u} - 2\lambda \mathbf{I} \mathbf{u} \\ -(\mathbf{u}^\top \mathbf{u} - 1) \end{pmatrix}.$$

2.3 Modellproblem I: Numerische Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die numerischen Ergebnisse des 1-Eigenwert-Problems dokumentiert und diskutiert. Da sich diese Arbeit mit einem neuen Verfahren beschäftigt wird insbesondere Wert auf die Verständlichkeit der auftretenden Probleme gelegt. Der rote Faden dieses Abschnitts basiert auf diesen Problemen und die dadurch motivierten Lösungsstrategien.

Notation: Im gesamten folgenden Abschnitt bezeichnet t immer den Iterationsindex für das NEWTON-Verfahren. In Anlehnung an das k -Eigenwert-Problem wird das kleinste exakte Eigenwert-Eigenvektor-Paar mit (λ_1^*, u_1^*) bezeichnet.

NEWTON-Verfahren: Das Abbruchkriterium für das NEWTON-Verfahren ist gegeben durch eine Toleranz von 10^{-10} des Residuums $\|\nabla\mathcal{L}(\mathbf{u}_1^t, \lambda_1^t)\|$ oder durch eine maximale Anzahl von 50 Schritten.

Startwerte: Da das NEWTON-Verfahren den kleinsten Eigenwert berechnen soll bietet sich $\lambda_1^0 = 0$ als Startwert an. Der Startvektor wird auf $\mathbf{u}_1^0 = (1)_{i=1}^n$ gesetzt, wobei n die Größe der Systemmatrix ist.

GMRES: In jedem NEWTON-Schritt muss ein lineares Gleichungssystem gelöst werden. Dafür wird das GMRES-Verfahren mit Neustart verwendet (siehe Definition 1.11). Der Neustart wird nach $m_{\max} = 100$ Schritten durchgeführt. Der Reduktionsfaktor bestimmt den Wert um welchen der GMRES-Löser das Anfangsresiduum reduzieren muss. Wird dies nach 10 Neustarten nicht erreicht, so bricht das Verfahren ab. Es werden also maximal 1000 GMRES-Schritte durchgeführt. Als Reduktionsfaktor ist 10^{-4} gesetzt.

Ergebnisse: In den nachfolgenden Ergebnissen wird neben dem Residuum auch der Fehler im kleinsten Eigenwert $|\lambda_1^t - \lambda_1^*|$ betrachtet. Der exakte Referenzwert λ_1^* ist durch Lemma 2.6 gegeben.

In Abbildung 2.1 sind die Ergebnisse der ersten Berechnungen dargestellt. Im kleinsten Fall $n = 20$ löst das NEWTON-Verfahren die Aufgabe sehr gut. Die gewünschte Lösung wird fast auf Maschinengenauigkeit approximiert. Auch die quadratische Konvergenz ist deutlich im Fehler des Eigenwertes und im Residuum erkennbar. Doch bereits ab einer Systemgröße von $n = 100$ ergeben sich die ersten Probleme. Bis zum 6. Schritt konvergiert das Verfahren gut, aber dann kann der GMRES-Löser das Problem nicht mehr lösen.

Für Matrizen größer als 1000 versagt der GMRES-Löser bereits in der ersten NEWTON-Iteration. Der Grund für den Abbruch liegt in der schlechten Konditionierung der Systemmatrix

$$\nabla^2\mathcal{L}(\mathbf{u}_1^t, \lambda_1^t) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{A} - 2\lambda_1^t\mathbf{I} & -2\mathbf{u}_1^t \\ -2(\mathbf{u}_1^t)^T & 0 \end{pmatrix}.$$

Bereits zu Beginn sind die Systemmatrizen „schlecht“ konditioniert, denn für die Teilmatrix \mathbf{A} gilt $\kappa(\mathbf{A}) = \mathcal{O}(h^2)$. Im Laufe der NEWTON Iteration verschlechtert sich die Konditionierung der Systemmatrix deutlich, da λ_1^t gegen einen Eigenwert konvergiert. Dies hat zur Folge, dass ein Eigenwert von $\tilde{\mathbf{A}} = 2\mathbf{A} - \lambda_1^t\mathbf{I}$ nahe bei 0 liegt und somit $\tilde{\mathbf{A}}$ numerisch singulär ist.

Im nachfolgenden Abschnitt wird diese Problematik mit Hilfe von Vorkonditionierung gelöst.

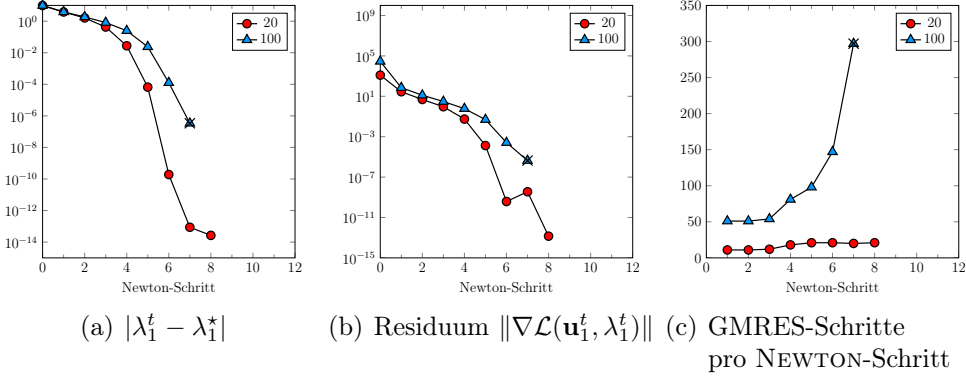


Abbildung 2.1: Einfluss der Matrixgröße auf das Lösungsverhalten. Das \times markiert den letzten Schritt in dem der GMRES-Löser das System lösen konnte.

2.3.1 Vorkonditionierung

Im vorherigen Abschnitt hat sich die schlechte Konditionierung der Systemmatrix gezeigt. Die Idee der *Vorkonditionierung* ist ein lineares Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ durch Multiplikation mit einer Matrix \mathbf{P}^{-1} derart zu verändern, dass

$$\kappa(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}) \ll \kappa(\mathbf{A}),$$

mit der Konditionszahl $\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|$ bezüglich einer beliebigen Norm $\|\cdot\|$. Ist ein solches \mathbf{P}^{-1} gefunden kann das besser konditionierte Problem $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{Ax} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}$ gelöst werden. Die Gestalt der Systemmatrix

$$\nabla\mathcal{L}(\mathbf{u}_1^t, \lambda_1^t) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{A} - 2\lambda_1^t\mathbf{I} & -2\mathbf{u}_1^t \\ -2(\mathbf{u}_1^t)^T & 0 \end{pmatrix},$$

motiviert die Wahl der Vorkonditionierung

$$\mathbf{P}_0^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

In Abbildung 2.2 sind die Ergebnisse mit dieser Vorkonditionierung dargestellt. Dabei wurde die Inverse \mathbf{P}^{-1} mit Hilfe von UMFPAK [6] berechnet.

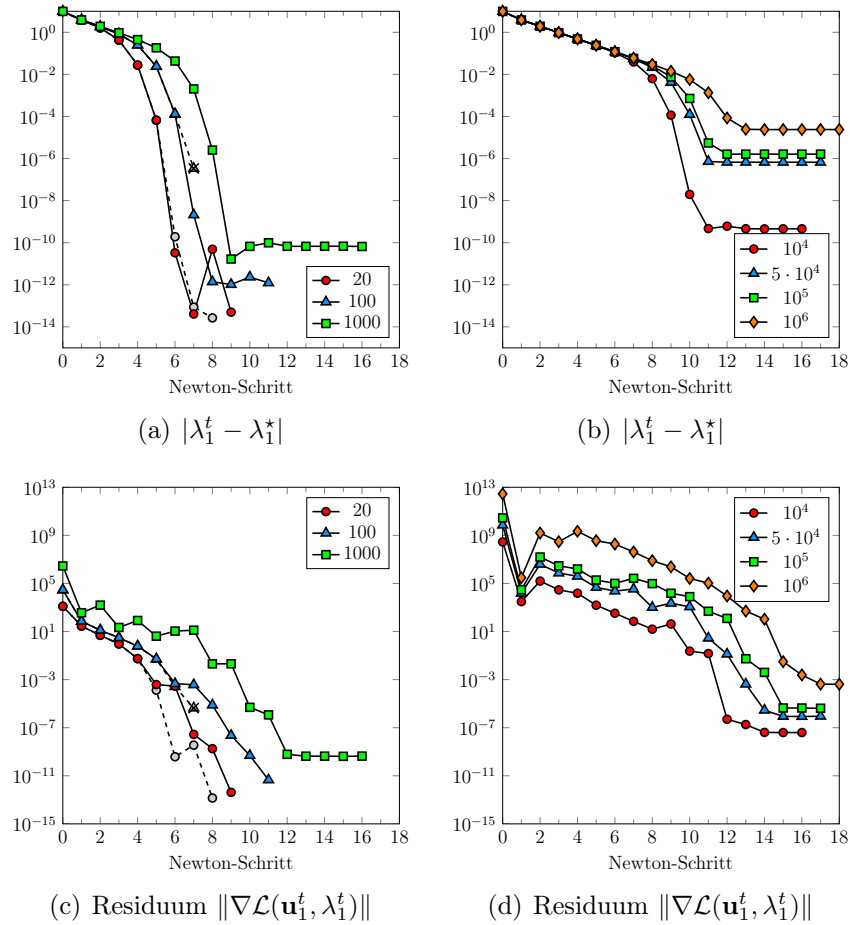


Abbildung 2.2: Einfluss der Matrixgröße bei vorkonditioniertem Löser. Die grauen Vergleichskurven sind die Ergebnisse ohne Vorkonditionierung aus Abbildung 2.1.

Mit dieser Vorkonditionierung ist das Lösen bis zu einer Systemgröße von 10^6 problemlos möglich. Diese Größe ist nur durch den Arbeitsspeicher (8 GB) des verwendeten Computers beschränkt. Bei steigender Systemgröße verliert der Grenzwert an Genauigkeit. Dies ist zu erwarten, da mit steigender Matrixgröße die Konditionszahl (von \mathbf{A}) mit $\mathcal{O}(n^2)$ wächst.

Unerwartet ist der Genauigkeitsverlust von $n = 10^5$ im Vergleich zu $n = 10^4$ von 4 Dezimalstellen. Hier sind 2 Dezimalstellen erwartet.

In Tabelle 2.1 sind die benötigten GMRES-Iterationen in jedem NEWTON-Schritt aufgelistet. Im Vergleich zu Abbildung 2.1(c) ist der Einfluss der Vorkonditionierung sehr deutlich. Ein sehr positives Ergebnis ist, dass das GMRES-Verfahren unabhängig von der Matrixgröße in wenigen Schritten konvergiert.

Tabelle 2.1: Einfluss der Matrixgröße auf die benötigten GMRES-Schritte

NEWTON	$n = 20$	$n = 10^2$	$n = 10^3$	$n = 10^4$	$n = 10^5$	$n = 10^6$
1	2	2	2	2	2	2
2	4	5	4	4	4	4
3	4	3	4	3	3	3
4	4	3	3	3	3	2
5	4	3	3	3	3	3
6	3	4	3	3	3	3
7	5	4	3	3	2	3
8	3	4	4	3	2	3
9	5	5	4	3	3	3
10		4	5	4	3	3
11		6	4	4	4	3
12			5	6	4	3
13			6	6	5	4
14				6	4	4
15					6	6
16						6

Bemerkung 2.8

Durch die Struktur von $\nabla\mathcal{L}(\mathbf{u}_1^t, \lambda_1^t)$ motiviert wurde ein weiterer Vorkonditionierer getestet. Die Idee ist, dass in jedem ν -ten NEWTON-Schritt der Vorkonditionierer neu aufgebaut wird. Hierbei wird die aktuelle Approximation λ_1^t verwendet.

$$\mathbf{P}_\nu^{-1} = \begin{pmatrix} (\mathbf{A} - \lambda_1^t \mathbf{I})^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Dieser Vorkonditionierer hat sich als sehr schlecht erwiesen, obwohl er ursprünglich als besserer Vorkonditionierer gedacht war. Im Vergleich zu \mathbf{P}_0^{-1} verlief die Konvergenz im Allgemeinen langsamer und mit geringerer Genauigkeit im Residuum. Der Verlust in der Genauigkeit ist abhängig von der Matrixgröße und lag bei $n = 1000$ bereits bei 2 Dezimalstellen.

Die verwendete Methode der Vorkonditionierung heißt genauer Vorkonditionierung von *links*. Eine andere Art der Vorkonditionierung für das lineare System $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ arbeitet wie folgt:

- i) $\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{y} = \mathbf{b}$
- ii) $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{y} = \mathbf{x}$

Diese Methode heißt Vorkonditionierung von *rechts*. Sie hat lediglich zu einer geringfügig besseren Genauigkeit der Ergebnisse geführt. Daher wird sie in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt.

2.3.2 Einfluss der Startwerte

In den folgenden Abschnitten wird die Auswirkung von Änderungen in den Startwerten untersucht. Dabei ist das Verhalten bei normierten Startvektoren und bei geänderten Starteigenwerten interessant.

2.3.2.1 Normierung des Startvektors

Das Ziel des Algorithmus ist es nicht nur eine gute Approximation des kleinsten Eigenwertes zu bestimmen, sondern außerdem den zugehörigen normierten Eigenvektor zu erzeugen. Daher ist es naheliegend den Startvektor zu normieren.

In Abbildung 2.3 ist der Vergleich mit den Daten aus Abbildung 2.2 dargestellt. Der Fehler im Eigenwert konvergiert in 5 NEWTON-Iterationen gegen den kleinsten Eigenwert. Das Residuum benötigt durchschnittlich 4 weitere Iterationen. Dies ist

eine deutliche Verbesserung zu den Berechnungen mit unnormierten Startvektoren. Die Genauigkeit der Ergebnisse verändert sich durch die Normierung nicht.

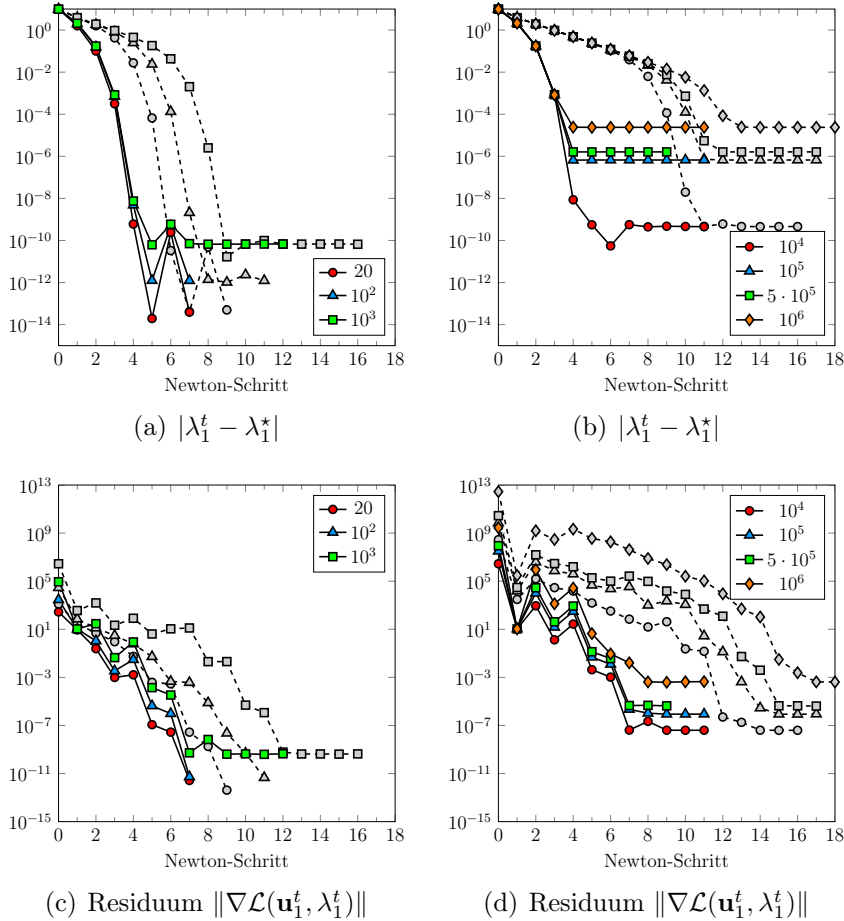


Abbildung 2.3: Einfluss der Normierung des Startvektors \mathbf{u}_1^0 bei wachsender Matrixgröße. In grau sind die Kurven ohne Normierung aus Abbildung 2.2 dargestellt.

In Tabelle 2.2 sind die Differenzwerte der benötigten GMRES-Schritte zu Tabelle 2.1 aufgelistet. Es zeigt sich, dass in jeder NEWTON-Iteration mehr GMRES-Schritte notwendig sind. Dieser Mehraufwand gleicht sich durch die geringere Anzahl der NEWTON-Iterationen aus. Offenbar empfiehlt es sich bei größeren Matrizen die Startwerte zu normieren, da das NEWTON-Verfahren zu immer früheren Iterationen terminiert.

Tabelle 2.2: Differenz der Anzahl benötigter GMRES-Iterationen im Vergleich zur Berechnung mit unnormierten Startvektoren aus Tabelle 2.1. Dabei markiert (★) den letzten Iterationsschritt bei normierten Startvektoren.

NEWTON	$n = 20$	$n = 10^2$	$n = 10^3$	$n = 10^4$	$n = 10^5$	$n = 10^6$
1	0	0	0	0	0	0
2	1	0	1	1	1	1
3	1	2	1	2	2	2
4	0	1	1	1	1	2
5	1	2	2	2	2	2
6	1	1	2	2	2	3
7	0★	2★	3	3	4	2
8	-3	-4	1	2	4	3★
9	-5	-5	1	2	3★	-3
10		-4	1	2	-3	-3
11		-6	2	2★	-4	-3
12			1★	-6	-4	-3
13			-6	-6	-5	-4
14				-6	-4	-4
15					-6	-6
16						-6
Σ	-4	-11	10	1	-7	-20

Bemerkung 2.9

Nach den Erkenntnissen aus diesem Abschnitt ist die Normierung der Startwerte eine gute Idee. Im nachfolgenden Kapitel zum k -Eigenwert-Problem wird sich jedoch zeigen, dass die Normierung der Startwerte zu einem wesentlich schlechteren Ergebnis führen kann. Insbesondere konvergiert das Verfahren häufig gegen falsche Eigenwerte.

2.3.2.2 Einfluss des Startwertes λ_1^0

Die naheliegende nächste Frage beschäftigt sich mit dem Einfluss des Startwertes λ_1^0 auf die Konvergenz.

In Abbildung 2.4 wird ersichtlich, dass bei Wahl von λ_1^0 in einem Bereich um den kleinsten Eigenwert, die Konvergenz gesichert ist. Selbst bei der Wahl $\lambda_1^0 = \lambda_2^*$ mit

einer Genauigkeit von 10^{-10} konvergiert das Verfahren robust gegen den kleinsten Eigenwert.

Wird der Startwert allerdings wesentlich größer gewählt, so konvergiert das NEWTON-Verfahren gegen einen Sattelpunkt, also ein anderes Eigenwert-Eigenvektor-Paar. In der Abbildung ist das Beispiel $\lambda_1^0 = 85$ mit Konvergenz gegen λ_3^* zu sehen.

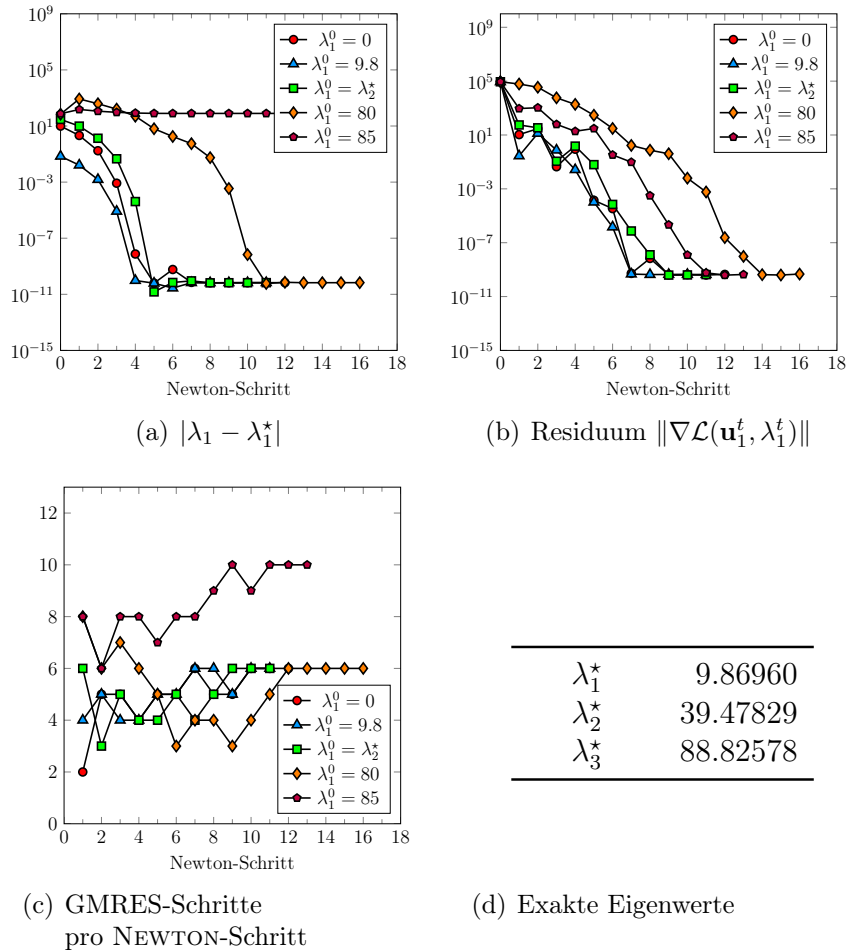


Abbildung 2.4: Einfluss des Startwertes λ_1^0 auf das Ergebnis bei fester Matrixgröße $n = 1000$ und normiertem Startvektor. Im Fall $\lambda_1^0 = \lambda_2^*$ ist der Startwert auf 10 Dezimalstellen genau gewählt worden.

Bemerkung 2.10

Die Beobachtungen aus diesem Abschnitt sind wesentlich für die Erforschung des k -Eigenwert-Problems. Wichtig ist, dass der Startwert in einem relativ kleinen Umfeld des kleinsten Eigenwertes liegen muss. Auch scheint der zweite Eigenwert „abstoßend“ auf das NEWTON-Verfahren zu wirken, obwohl jedes Eigenwert-Eigenvektor-Paar ein Sattelpunkt des Minimierungsproblems darstellt.

Das Verfahren konvergiert ebenso sehr gut für beliebig negative Starteigenwerte. Dies wurde für Werte bis -10^6 getestet.

2.4 Modellproblem II: Finite-Elemente-Methode für die 2D-LAPLACE-Gleichung

In diesem Abschnitt wird ein weiteres Modellproblem basierend auf finiten Elementen untersucht. Dabei sind Stil und Notation der Theorie geprägt von [14]. Die starke Formulierung des LAPLACE-Problems in zwei Raumdimensionen lautet: Finde $u \in C^2(\Omega)$, sodass

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega, \end{aligned}$$

mit $\Omega = [0, 1]^2 \subset \mathbb{R}^2$. Für das 1-Eigenwert-Problem ergibt sich durch partielle Integration die Bilinearform:

$$\begin{aligned} a(\cdot, \cdot) &: V \times V \rightarrow \mathbb{R} \\ (u, v) &\mapsto (\nabla u, \nabla v) \end{aligned}$$

auf dem Raum $V = H_0^1(\Omega)$.

2.4.1 Diskretisierung und Implementierung

In Abschnitt 2.1.2 wurde bereits die allgemeine Diskretisierung mit finiten Elementen durchgeführt. Das fehlende Detail ist die konkrete Wahl des endlichdimensionalen Unterraums $V_h \subset V$ und seiner Basis $\{v^i, i = 1, \dots, n\}$.

Zunächst wird Ω in eine Triangulierung $\Omega_h = \{T_i, i = 1, \dots, n_h\}$ bestehend aus äquidistanten Quadraten T_i unterteilt, siehe Abbildung 2.5(a). Dabei bezeichnet h die Kantenlänge der Quadrate.

Auf diesem Gitter werden die stückweisen Polynomräume wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \mathbb{Q}^r &= \text{span}\{x^i y^j, 0 \leq i, j \leq r\}, \\ V_h^{(r)} &= \{v \in C(\bar{\Omega}), v|_T \in \mathbb{Q}^r \forall T \in \Omega_h\}. \end{aligned}$$

Die nachfolgenden numerischen Berechnungen sind mit *bi-linearen* ($r = 1$), *bi-quadratischen* ($r = 2$) und *bi-kubischen* ($r = 3$) finiten Elementen durchgeführt. Diese drei Ansätze besitzen die Eigenschaft *konform* zu sein. Dies bedeutet $V_h^{(r)} \subset V$. Im Zuge der numerischen Tests wird ebenso überprüft, wie sich die Berechnung des kleinsten Eigenwertes bei *nicht-konformen* Elementen verhält. Das RANNACHER-TUREK-Element

$$\mathbb{Q}^{1,rot} = \text{span}\{1, x, y, x^2 - y^2\}$$

$$V_h^{1,rot} = \{v \in L^2(\bar{\Omega}), v|_T \in \mathbb{Q}^{rot} \forall T \in \Omega_h\}$$

bietet diese Eigenschaft. Es entsteht durch Rotation von $V_h^{(1)}$ um $\frac{\Pi}{4}$ und besitzt die Freiheitsgrade auf den Kantenmitten (siehe Abbildung 2.5).

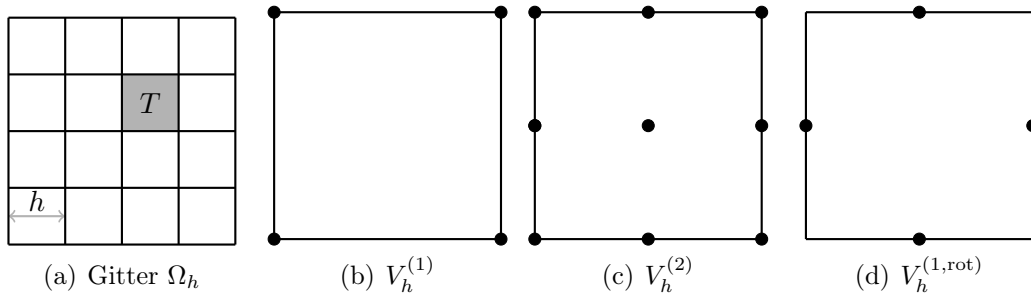


Abbildung 2.5: Visualisierung der Triangulierung nach zweimaliger Verfeinerung und der Lage der Freiheitsgrade verschiedener Finite-Elemente-Ansätze auf einer Zelle.

2.4.2 Numerische Ergebnisse

Für die numerischen Testrechnungen wird die gleiche Konfiguration des Modellproblems I aus Abschnitt 2.3 verwendet. Da sich die Vorkonditionierung aus Abschnitt 2.3.1 als unerlässlich erwiesen hat, wird diese ebenso eingesetzt.

Die Ergebnisse der Berechnungen des 1-Eigenwert-Problems sind in Abbildung 2.6 dargestellt. Die gute Konvergenz des NEWTON-Verfahrens zeigt sich auch bei diesem Modellproblem. Bei allen verwendeten Ansätzen konvergiert das Verfahren gegen den kleinsten Eigenwert. Dabei hängt die Approximationsgenauigkeit wie erwartet von der Diskretisierungsgenauigkeit ab. Insbesondere liegt die Konvergenzordnung aller Ansätze beim erwarteten Wert.

Tabelle 2.3: Vergleichswerte nach 6 Gitterverfeinerungen. Dies entspricht einem Gitter mit 4096 Zellen.

	Freiheitsgrade	$ \lambda_1^T - \lambda_1^\Delta $
$V_h^{(1)}$	4225	$3.96 \cdot 10^{-3}$
$V_h^{(2)}$	16641	$1.53 \cdot 10^{-7}$
$V_h^{(3)}$	37249	$2.35 \cdot 10^{-11}$
$V_h^{(1,rot)}$	8320	$2.38 \cdot 10^{-2}$

Überraschend ist die Beobachtung, dass die Residuen $\|\nabla\mathcal{L}(\mathbf{u}_1^T, \lambda_1^T)\|$ auf jedem Gitter unter dem Abbruchkriterium von 10^{-10} liegt. Aber die Änderung im Eigenwertfehler in den 2 bis 4 letzten Iterationen stagniert. Dies steht im Gegensatz zu den Beobachtungen des Modellproblems I (siehe Abbildung 2.2). Dort stand der Fehler in den Eigenwerten in Relation zu den Residuen. Dieses Verhalten ist bisher nicht nachvollziehbar.

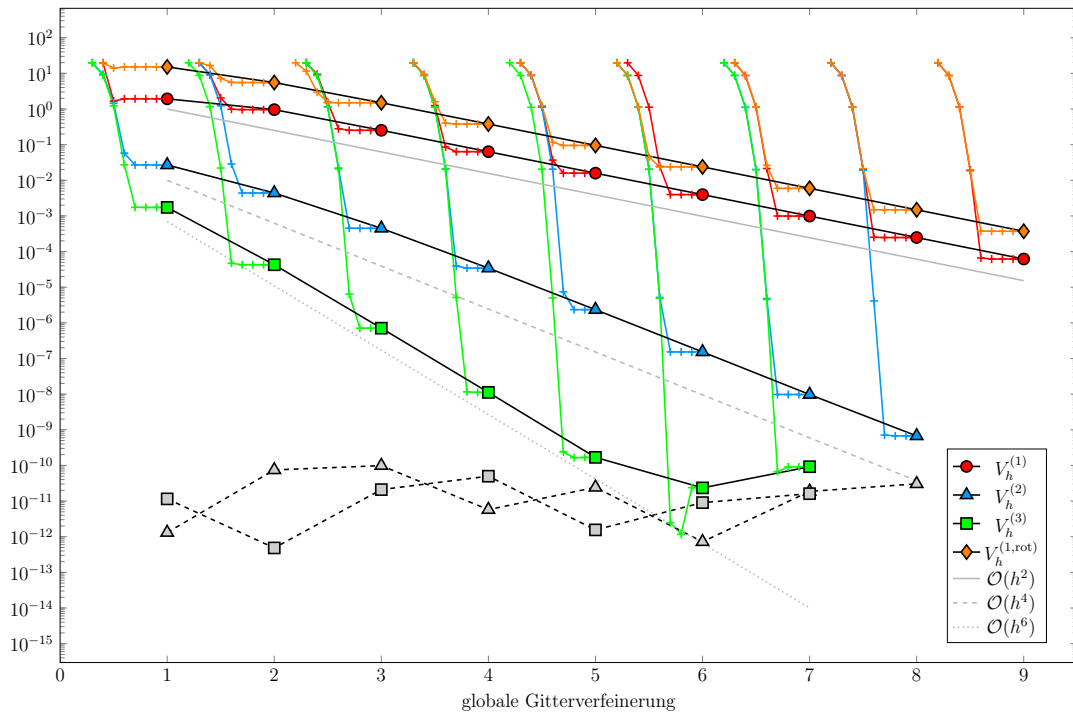


Abbildung 2.6: Darstellung des Fehlers $|\lambda_1^T - \lambda_1^\Delta|$ in der letzten NEWTON-Iteration gegenüber dem kleinsten Eigenwert des kontinuierlichen Operators. Mit grauen Markierungen sind die Residuen $\|\nabla\mathcal{L}(\mathbf{u}_1^T, \lambda_1^T)\|$ für $V_h^{(2)}$ und $V_h^{(3)}$ dargestellt.

3 Das k -Eigenwert-Problem

In diesem Kapitel wird zunächst das k -Eigenwert-Problem hergeleitet. Dabei werden die Details aus Abschnitt 2.1 vorausgesetzt. Anschließend werden numerische Untersuchungen durchgeführt. Wir werden feststellen, dass die Bestimmung von k Eigenwerten wesentlich schwieriger ist, als die Bestimmung von einem Eigenwert.

3.1 Herleitung

Analog zu Definition 2.1 und verbunden mit Satz 1.9 lautet die Minimierungsaufgabe des k -Eigenwert-Problems wie folgt.

Definition 3.1 (k -Eigenwert-Problem)

Sei $a(\cdot, \cdot)$ eine symmetrische, positiv definite Bilinearform. Dann ist das Minimierungsproblem für die k kleinsten Eigenwerten gegeben durch:

Finde $U := \{u_i\}_{i=1}^k \in V^k$, mit einem geeigneten Funktionenraum V , sodass

$$U^* = \arg \min_{U \in V^k} \sum_{i=1}^k a(u_i, u_i) \quad (3.1a)$$

unter den Nebenbedingungen

$$(u_i, u_i) = 1, \quad \forall i = 1, \dots, k \quad (3.1b)$$

$$(u_i, u_j) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, k-1, j = i+1, \dots, k. \quad (3.1c)$$

Ausgehend von diesem Minimierungsproblem mit Nebenbedingungen lautet die LAGRANGE-Funktion wie folgt:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(U, \Lambda, M) &= \sum_{i=1}^k a(u_i, u_i) \\ &\quad - \sum_{i=1}^k \lambda_i ((u_i, u_i) - 1) \\ &\quad - \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k \mu_{ij} (u_i, u_j), \end{aligned}$$

mit $U = (u_1, \dots, u_k)$, und LAGRANGE-Parametern $\Lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ und $M = (\mu_{12}, \dots, \mu_{1k}, \mu_{23}, \dots, \mu_{2k}, \dots, \mu_{k-1,k})$. Für die Anwendung des NEWTON-Verfahrens werden Gradient und HESSE-Matrix benötigt. Die Herleitung der folgenden Hilfssätze erfolgt analog zum 1-Eigenwert-Problem. Jedoch ist sie sehr unübersichtlich und nicht zielführend. Daher wird an dieser Stelle auf die Ausführung verzichtet.

Lemma 3.2 (Gradient)

Die ersten Variationsableitungen der LAGRANGE-Funktion des k -Eigenwert-Problems sind gegeben durch:

- Für $u_i \in U$:

$$\nabla_{u_i} \mathcal{L}(U, \Lambda, M)[\delta u_i] = 2a(u_i, \delta u_i) - 2\lambda_i(u_i, \delta u_i) - m_i(\delta u_i),$$
mit $m_i(u) := \sum_{j=1}^{i-1} \mu_{ji}(u, u_j) + \sum_{j=i+1}^k \mu_{ij}(u, u_j)$.
- Für $\lambda_i \in \Lambda$:

$$\nabla_{\lambda_i} \mathcal{L}(U, \Lambda, M)[\delta \lambda_i] = -\delta \lambda_i ((u_i, u_i) - 1).$$
- Für $\mu_{ij} \in M$:

$$\nabla_{\mu_{ij}} \mathcal{L}(U, \Lambda, M)[\delta \mu_{ij}] = -\delta \mu_{ij}(u_i, u_j).$$

Lemma 3.3 (HESSE-Matrix)

Die HESSE-Matrix der LAGRANGE-Funktion ist von folgender Blockgestalt:

$$\nabla^2 \mathcal{L} = \begin{pmatrix} \nabla^2 \mathcal{L}_{uu} & \nabla^2 \mathcal{L}_{u\lambda} & \nabla^2 \mathcal{L}_{u\mu} \\ \nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda u} & \nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda\lambda} & \nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda\mu} \\ \nabla^2 \mathcal{L}_{\mu u} & \nabla^2 \mathcal{L}_{\mu\lambda} & \nabla^2 \mathcal{L}_{\mu\mu} \end{pmatrix}.$$

Als Notation wird $\nabla^2 \mathcal{L}_{xy}$ für die Matrix der Ableitungen von $\nabla_x \mathcal{L}(U, \Lambda, M)$ nach y verwendet. Im Detail sind die Einträge gegeben durch

- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{uu})_{il} = \delta_{\nabla_{u_i} \mathcal{L}}[\delta u_l] = \begin{cases} -\mu_{li}(\delta u_l, v_i), & l < i \\ 2a(\delta u_i, v_i) - 2\lambda_i(\delta u_i, v_i), & l = i \\ -\mu_{il}(\delta u_l, v_i), & l > i \end{cases}$
- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{u\lambda})_{il} = \delta_{\nabla_{u_i} \mathcal{L}}[\delta \lambda_l] = \begin{cases} -2\delta \lambda_i(u_i, v_i), & l = i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$

$$\circ (\nabla^2 \mathcal{L}_{u\mu})_{i(lm)} = \delta_{\nabla_{u_i} \mathcal{L}}[\delta \mu_{lm}] = \begin{cases} -\delta \mu_{lm}(v_i, u_j), & l = i \text{ und } m \neq i \\ -\delta \mu_{ml}(v_i, u_j), & l \neq i \text{ und } m = i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Wobei $_{i(lm)}$ den zu μ_{lm} gehörigen Eintrag in der i -ten Zeile bezeichnet.

$$\circ (\nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda u})_{il} = \delta_{\nabla_{\lambda_i} \mathcal{L}}[\delta u_l] = \begin{cases} -2(\delta u_i, u_i) \hat{\lambda}_i, & l = i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\circ (\nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda\lambda})_{il} = \delta_{\nabla_{\lambda_i} \mathcal{L}}[\delta \lambda_l] = 0$$

$$\circ (\nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda\mu}) = 0$$

$$\circ (\nabla^2 \mathcal{L}_{\mu u})_{(lm)j} = \delta_{\nabla_{\mu_{lm}} \mathcal{L}}[\delta u_j] = \begin{cases} -(v_i, \delta u_j) \hat{\mu}_{lm}, & j = l \\ -(v_i, \delta u_j) \hat{\mu}_{lm}, & j = m \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\circ (\nabla^2 \mathcal{L}_{\mu\lambda})_{(lm)j} = \delta_{\nabla_{\mu_{lm}} \mathcal{L}}[\delta \lambda_j] = 0$$

$$\circ (\nabla^2 \mathcal{L}_{\mu\mu}) = 0$$

Es bezeichnet v_i wie in Lemma 2.3 die eingesetzte Testfunktion zu u_i . Mit $\hat{\lambda}_i$ und $\hat{\mu}_{lm}$ wird die Testfunktion für die LAGRANGE-Parameter bezeichnet.

3.1.1 Beispiel: Diskretisierung für das 3-Eigenwert-Problem

In diesem Abschnitt werden beispielhaft der Gradient und die HESSE-Matrix des 3-Eigenwert-Problems diskretisiert. Die Struktur der HESSE-Matrix und die Einträge der LAGRANGE-Parameter λ_i und μ_{ij} sind bei dieser Größe ersichtlich. Die anschließenden numerischen Untersuchungen werden mit dem einfacheren 2-Eigenwert-Problem durchgeführt, da sich bereits für diese Aufgabe wesentliche numerische Problemfälle ergeben.

Wir gehen analog zu Abschnitt 2.1.2 vor. Unter der Annahme, dass für alle drei Eigenvektoren die gleiche Finite-Elemente-Diskretisierung verwendet wird, sei $V_h \subset V$ ein endlichdimensionaler Unterraum mit Basis $\{v^i, i = 1, \dots, n\}$.

In dieser Basis lassen sich nun die Eigenfunktionen ausdrücken durch

$$u_i = \sum_{j=1}^n u_i^j v^j, \quad \text{für } i = 1, 2, 3,$$

mit skalaren Koeffizienten $u_i^j \in \mathbb{R}$. Nach Einsetzen dieser Darstellung in den kontinuierlichen Gradienten aus Lemma 3.2 und Testen mit den einzelnen Basisfunk-

tionen ergibt sich der diskrete Gradient

$$\nabla \mathcal{L}(\mathbf{U}, \Lambda, M) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{A}\mathbf{u}_1 - 2\lambda_1\mathbf{M}\mathbf{u}_1 - \mu_{12}\mathbf{M}\mathbf{u}_2 - \mu_{13}\mathbf{M}\mathbf{u}_3 \\ 2\mathbf{A}\mathbf{u}_2 - 2\lambda_2\mathbf{M}\mathbf{u}_2 - \mu_{12}\mathbf{M}\mathbf{u}_1 - \mu_{23}\mathbf{M}\mathbf{u}_3 \\ 2\mathbf{A}\mathbf{u}_3 - 2\lambda_3\mathbf{M}\mathbf{u}_3 - \mu_{13}\mathbf{M}\mathbf{u}_1 - \mu_{23}\mathbf{M}\mathbf{u}_2 \\ \hline -(\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M}\mathbf{u}_1 - 1) \\ -(\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M}\mathbf{u}_2 - 1) \\ -(\mathbf{u}_3^\top \mathbf{M}\mathbf{u}_3 - 1) \\ \hline -\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M}\mathbf{u}_2 \\ -\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M}\mathbf{u}_3 \\ -\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M}\mathbf{u}_3 \end{pmatrix}$$

Mit der Systemmatrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und der Massematrix $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, sowie den Koeffizientenvektoren \mathbf{u}_i :

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= (a(v^j, v^i))_{i,j=1}^n, & \mathbf{M}_h &= ((v^j, v^i))_{i,j=1}^n, \\ \mathbf{U} &= [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3], & \mathbf{u}_i &= ((u_i, v^j))_{j=1}^n \\ \Lambda &= [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3], & M &= [\mu_{12}, \mu_{13}, \mu_{23}]. \end{aligned}$$

Ebenso ergibt sich mit der kontinuierlichen HESSE-Matrix aus Lemma 3.3 die diskrete HESSE-Matrix in Blockform:

$$\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{U}, \Lambda, M) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{uu} & \mathbf{A}_{u\lambda} & \mathbf{A}_{u\mu} \\ \mathbf{A}_{\lambda u} & \mathbf{A}_{\lambda\lambda} & \mathbf{A}_{\lambda\mu} \\ \mathbf{A}_{\mu u} & \mathbf{A}_{\mu\lambda} & \mathbf{A}_{\mu\mu} \end{pmatrix}$$

und explizit:

$$\nabla^2 \mathcal{L} = \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 2\mathbf{A} - 2\lambda_1\mathbf{M} & -\mu_{12}\mathbf{M} & -\mu_{13}\mathbf{M} & -2\mathbf{M}\mathbf{u}_1 & 0 & 0 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_2 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_3 & 0 \\ -\mu_{12}\mathbf{M} & 2\mathbf{A} - 2\lambda_2\mathbf{M} & -\mu_{23}\mathbf{M} & 0 & -2\mathbf{M}\mathbf{u}_2 & 0 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_1 & 0 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_3 \\ -\mu_{13}\mathbf{M} & -\mu_{23}\mathbf{M} & 2\mathbf{A} - 2\lambda_3\mathbf{M} & 0 & 0 & -2\mathbf{M}\mathbf{u}_3 & 0 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_1 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_2 \\ \hline -2\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2\mathbf{u}_3^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M} & -\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\mathbf{u}_3^\top \mathbf{M} & 0 & -\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mathbf{u}_3^\top \mathbf{M} & -\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

3.1.2 Das NEWTON-Verfahren

In den bisherigen Abschnitten wurden alle Hilfsmittel zur Formulierung des folgenden Verfahrens eingeführt.

Definition 3.4 (NEWTON-Verfahren für das k -Eigenwert-Problem)
 Wähle k geeignete Startvektoren $\mathbf{u}_i^0 \in \mathbb{R}^n$, Startwerte $\lambda_i^0 \in \mathbb{R}$ und $\mu_{ij} \in \mathbb{R}$.

Sofern $\|\nabla \mathcal{L}(\mathbf{U}, \Lambda, M)\| > Tol$,

Löse	$\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{U}^t, \Lambda^t, M^t)[\delta \mathbf{U}, \delta \Lambda, \delta M] = -\nabla \mathcal{L}(\mathbf{U}^t, \Lambda^t, M^t)$,
Berechne	$\mathbf{u}_i^{t+1} = \mathbf{u}_i^t + \delta \mathbf{u}_i$,
Berechne	$\lambda_i^{t+1} = \lambda_i^t + \delta \lambda_i$.
Berechne	$\mu_{ij}^{t+1} = \mu_{ij}^t + \delta \mu_{ij}$.

3.2 Modellproblem I: Numerische Ergebnisse I

In diesem Abschnitt wird das 2-Eigenwert-Problem untersucht. Bereits für die Berechnung von nur 2 Eigenwerten werden sich sehr viele Probleme ergeben. Daher wird auch hier das einfache Modellproblem I aus Abschnitt 2.2 eingesetzt.

Vorkonditionierung: In Abschnitt 2.3 hat sich gezeigt, dass ein Vorkonditionierer unverzichtbar ist. Daher wird bei allen Berechnungen in diesem Abschnitt der Vorkonditionierer aus (2.15) in der auf 2 Eigenwerte verallgemeinerten Form verwendet.

$$\mathbf{P}_0^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} & & & 0 \\ & \mathbf{A}^{-1} & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}n \\ \}1 \\ \}1 \\ \}1 \end{matrix} \quad (3.2)$$

NEWTON-Verfahren: Das Abbruchkriterium für das NEWTON-Verfahren ist gegeben durch eine Toleranz von 10^{-10} des Residuums $\|\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}_1^t, \lambda_1^t)\|$ oder durch eine maximale Anzahl von 50 Schritten.

Startwerte: ○ Da das NEWTON-Verfahren die kleinsten Eigenwerte berechnen soll bietet sich erneut die Wahl $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$ an. Zusätzlich wird das Konvergenzverhalten bei unterschiedlichen Startwerten $\lambda_1^0 = 2$, $\lambda_2^0 = 5$ untersucht.

- Die letzten drei Zeilen von $\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{U}, \Lambda, M)$ lauten (vgl. Abschnitt 3.1.1):

$$\left(\begin{array}{cc|ccc} -2\mathbf{u}_1^\top & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -2\mathbf{u}_2^\top & 0 & \dots & 0 \\ -2\mathbf{u}_2^\top & -2\mathbf{u}_1^\top & 0 & \dots & 0 \end{array} \right)$$

Daher müssen die Startwerte für die Eigenvektoren des NEWTON-Verfahrens linear unabhängig gewählt werden. Für die nachfolgenden Berechnungen gilt $\mathbf{u}_i^0 = (1 + 2 \cdot \delta_{ij})_{j=1}^n$, für $i = 1, 2$.

- Bisher ist keine Interpretation des LAGRANGE-Parameters μ_{12} bekannt, daher wird $\mu_{12} = 0$ verwendet.

GMRES: In jedem NEWTON-Schritt muss ein lineares Gleichungssystem gelöst werden. Dafür wird das GMRES-Verfahren mit Neustart verwendet (siehe Definition 1.11). Der Neustart wird nach $m_{\max} = 100$ Schritten durchgeführt. Der Reduktionsfaktor bestimmt den Wert um welchen der GMRES-Löser das Anfangsresiduum reduzieren muss. Wird dies nach 10 Neustarten nicht erreicht, so bricht das Verfahren ab. Es werden also maximal 1000 GMRES-Schritte durchgeführt. Als Reduktionsfaktor ist 10^{-4} gesetzt.

Ergebnisse: In den nachfolgenden Ergebnissen wird neben dem Residuum auch die Fehler in den Eigenwerten $|\lambda_i^t - \lambda_i^*|$ betrachtet. Die exakten Referenzwerte λ_i^* sind durch Lemma 2.6 gegeben.

Im ersten Versuch wird das Problem mit der Matrixgröße $n = 20$ und Startwerten $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$ getestet. Dabei ergibt sich die Beobachtung, dass das Verfahren den Gradienten der LAGRANGE-Funktion minimiert, siehe Abbildung 3.1.

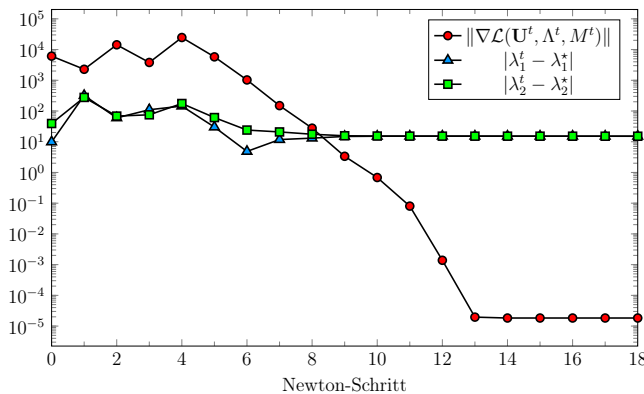
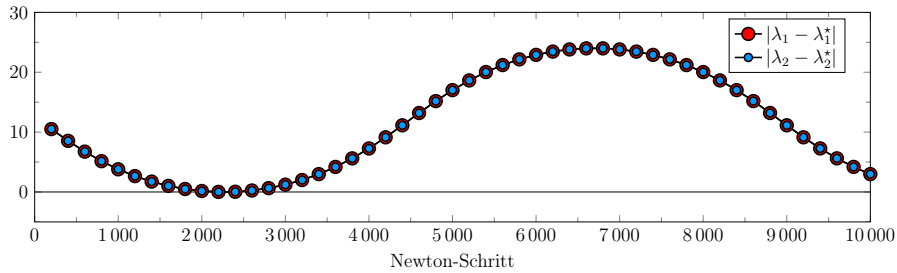


Abbildung 3.1: Erste Testrechnung für zwei Eigenwerte bei Matrixgröße $n = 20$.

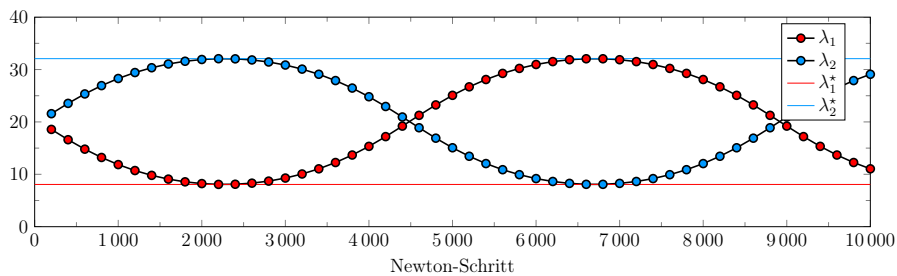
Die Approximationen Eigenwerte zum Schritt $t = 20$ betragen: $\lambda_1^{20} = 24.9386$ und $\lambda_2^{20} = 24.0974$. Beide Werte sind keine Eigenwerte von A_{20} .

Das Problem der Methode wird ersichtlich, wenn die NEWTON Iteration über eine große Schrittzahl durchgeführt wird. In Abbildung 3.2 ist der Fehler der approximierenden Eigenwerte und deren Wert im Verlauf von 10000 Iterationen dargestellt.

Am Minimum beträgt die Genauigkeit der Approximation $|\lambda_i^{2237} - \lambda_i^*| = 5.5 \cdot 10^{-7}$ in beiden Eigenwerten. Das gesamte Residuum liegt ab den ersten 15 NEWTON-Iterationen zwischen $6.3 \cdot 10^{-6}$ und $1.2 \cdot 10^{-5}$.



(a) Darstellung des Fehlers in den approximierenden Eigenwerten: $|\lambda_i^t - \lambda_i^*|$.



(b) Darstellung der approximierenden Eigenwerten im Vergleich zu den exakten Werten.

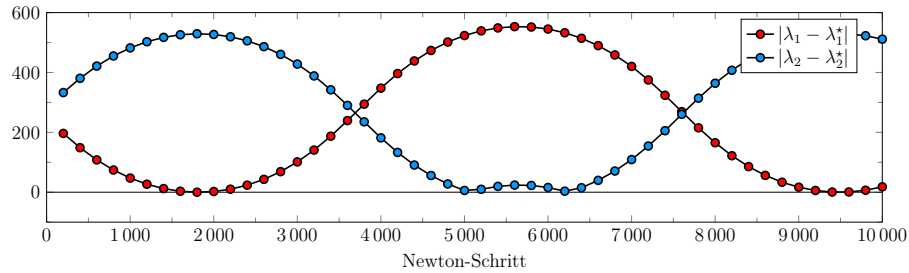
Abbildung 3.2: Residuum und Werte bei 10000 NEWTON-Iterationen, mit Systemgröße $n = 20$ und Startwerten $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$.

Es ist zu erkennen, dass beide approximierenden Eigenwerte jeweils gegen die zwei kleinsten Eigenwerte streben. Dies muss nicht immer der Fall sein. So ist bei der Wahl $n = 20$, $\lambda_1^0 = 2$ und $\lambda_2^0 = 5$ gegeben, dass der zweite Konvergenzpunkt bei λ_9^* liegt. Siehe dazu Abbildung 3.3.

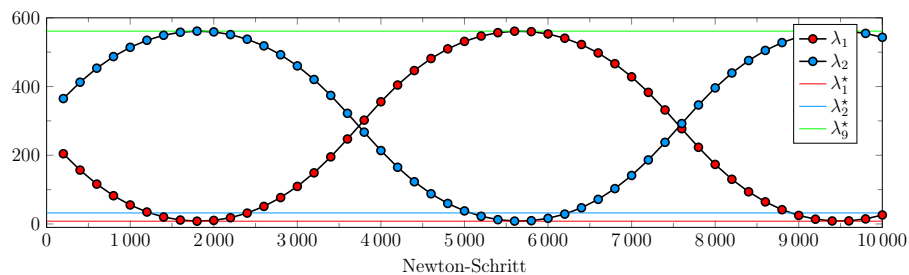
Eine naive Lösung ist es, dass Verfahren mit den Startwerten $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$ zu starten. Und dann zu beenden sobald ein fallender Eigenwert beginnt zu steigen. Dies ist nicht möglich, denn beispielsweise in der Konfiguration $n = 100$ mit $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$ sind die beiden Konvergenzpunkte gegeben durch λ_1^* und λ_{39}^* . Zusätzlich vergrößert sich die Frequenz der Konvergenzschwingung, sodass die Iterationszahl, mit der das erste Minimum erreicht wird, von 2237 bei $n = 20$ auf 7443 anwächst.

3 Das k -Eigenwert-Problem

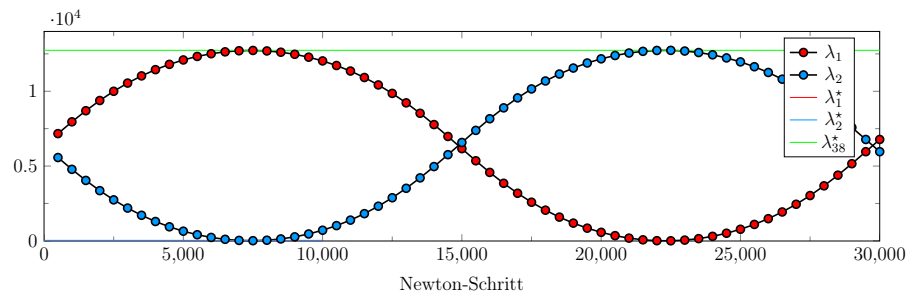
Das Ursache dieser Beobachtung liegt in der Formulierung des k -Eigenwerte-Problems. Im nachfolgenden Abschnitt wird die Ursache untersucht und eine Modifizierung eingeführt, mit dem Ziel die Berechnung von mehreren Eigenwerten zu ermöglichen.



- (a) Darstellung des Fehlers in den approximierenden Eigenwerten für 10000 NEWTON-Iterationen, mit Systemgröße $n = 20$ und Startwerten $\lambda_1^0 = 2$, $\lambda_2^0 = 5$.



- (b) Darstellung der approximierenden Eigenwerten im Vergleich zu den exakten Werten für 10000 NEWTON-Iterationen, mit Systemgröße $n = 20$ und Startwerten $\lambda_1^0 = 2$, $\lambda_2^0 = 5$.



- (c) Darstellung der approximierenden Eigenwerten im Vergleich zu den exakten Werten für 30000 NEWTON-Iterationen, mit Systemgröße $n = 100$ und Startwerten $\lambda_1^0 = 0$, $\lambda_2^0 = 0$.

Abbildung 3.3: Weitere Ergebnisse bei verschiedenen Startwerten und Systemgrößen.

3.3 Modifizierung von $\nabla\mathcal{L}(U, \Lambda, M)$

In Abschnitt 3.2 haben numerische Experimente gezeigt, dass das NEWTON-Verfahren sehr schlecht konvergiert, sofern es auf dem 2-Eigenwert-Problem nach Definition 3.1 basiert. Diese Beobachtung ist bei Untersuchung des 2-Eigenwert-Problems begründbar. Wir betrachten hierfür die Herleitung aus Abschnitt 3.1 für das 2-Eigenwert-Problem im Detail.

Definition 3.5

Sei $a(\cdot, \cdot)$ eine symmetrische, positiv definite Bilinearform. Dann ist die Suche nach den 2 kleinsten Eigenwerten ist gegeben durch das folgende Minimierungsproblem. Finde u_1 und u_2 , sodass:

$$U^* = \arg \min_{U \in V^2} \{a(u_1, u_1) + a(u_2, u_2)\} \quad (3.3a)$$

unter den Nebenbedingungen

$$(u_i, u_i) = 1, \text{ für } i = 1, 2 \quad (3.3b)$$

$$(u_1, u_2) = 0. \quad (3.3c)$$

Analog zu Abschnitt 3.1 lautet die LAGRANGE-Funktion

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(U, \Lambda, \mu_{12}) &= a(u_1, u_1) + a(u_2, u_2) \\ &\quad - \lambda_1 ((u_1, u_1) - 1) - \lambda_2 ((u_2, u_2) - 1) \\ &\quad - \mu_{12}(u_1, u_2), \end{aligned}$$

und ihr Gradient ist gegeben durch

$$\nabla\mathcal{L}(U, \Lambda, \mu_{12})[\delta U, \delta\Lambda, \delta\mu_{12}] = \begin{pmatrix} a(u_1, \delta u_1) - \lambda_1(u_1, \delta u_2) - \mu_{12}(\delta u_1, u_2) \\ a(u_2, \delta u_2) - \lambda_2(u_2, \delta u_1) - \mu_{12}(\delta u_2, u_1) \\ \delta\lambda_1((u_1, u_1) - 1) \\ \delta\lambda_2((u_2, u_2) - 1) \\ -\delta\mu_{12}(u_1, u_2) \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Die notwendige Bedingung für ein Minimum $(U^*, \Lambda^*, \mu_{12}^*)$ von \mathcal{L} lautet

$$\nabla\mathcal{L}(U^*, \Lambda^*, \mu_{12}^*)[\tilde{U}, \tilde{\Lambda}, \tilde{\mu}] = 0,$$

für beliebige Testfunktionen $(\tilde{U}, \tilde{\Lambda}, \tilde{\mu})$.

Das Problem besteht darin, dass durch die Symmetrie des Gradienten nicht festgelegt wird, welches approximierende Eigenwert-Eigenvektor-Paar gegen den kleinsten Eigenwert konvergiert. Die Orthogonalitätsbedingung $\mu_{12}(u_1, u_2)$ legt nur fest, dass beide Lösungsvektoren orthogonal sein müssen. Daher streben beide Lösungen

gegen den kleinsten Eigenwert, wie in den Abbildungen aus Abschnitt 3.2 deutlich wurde.

Ausgehend von dieser Problematik ist die folgende Modifizierung des Gradienten motiviert.

Definition 3.6 (Modifizierter Gradient des 2-Eigenwert-Problems)

Es werden nur die Ableitungen nach u_1 und u_2 verändert um den kleinsten Eigenwert auszuzeichnen.

$$\nabla_{u_1} \mathcal{L}(U, \Lambda, \mu_{12})[\delta u_1] = a(u_1, \delta u_1) - \lambda_1(u_1, \delta u_1), \quad (3.5a)$$

$$\nabla_{u_2} \mathcal{L}(U, \Lambda, \mu_{12})[\delta u_2] = a(u_2, \delta u_2) - \lambda_2(u_2, \delta u_2) - \mu_{12}(\delta u_2, u_1). \quad (3.5b)$$

Die Suche nach einem Minimum dieser modifizierten Variante ergibt nun das Eigenvektor-Eigenwert-Paar zum kleinsten Eigenwert nach Gleichung (3.5a). Zusätzlich bestimmt Gleichung (3.5b) ein weiteres Eigenvektor-Eigenwert-Paar, mit der Einschränkung $u_2 \perp u_1$. Es wird also nach einem Minimum im orthogonalen Komplement zu u_1 gesucht.

Mit der Änderung des Gradienten von \mathcal{L} ändert sich auch die HESSE-Matrix. Insbesondere ist die modifizierte Matrix unsymmetrisch.

Beispiel 3.7 (Diskrete HESSE-Matrix für 2 Eigenwerte)

Ursprüngliche Formulierung nach 3.1:

$$\nabla^2 \mathcal{L} = \left(\begin{array}{cc|cc|c} 2\mathbf{A} - 2\lambda_1\mathbf{M} & -\mu_{12}\mathbf{M} & -2\mathbf{M}\mathbf{u}_1 & 0 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_2 \\ -\mu_{12}\mathbf{M} & 2\mathbf{A} - 2\lambda_2\mathbf{M} & & 0 - 2\mathbf{M}\mathbf{u}_2 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_1 \\ \hline -2\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 \\ \hline -\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M} & -\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

Modifizierte HESSE-Matrix:

$$\nabla^2 \mathcal{L} = \left(\begin{array}{cc|cc|c} 2\mathbf{A} - 2\lambda_1\mathbf{M} & 0 & -2\mathbf{M}\mathbf{u}_1 & 0 & 0 \\ -\mu_{12}\mathbf{M} & 2\mathbf{A} - 2\lambda_2\mathbf{M} & 0 & -2\mathbf{M}\mathbf{u}_2 & -\mathbf{M}\mathbf{u}_1 \\ \hline -2\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 \\ \hline -\mathbf{u}_2^\top \mathbf{M} & -\mathbf{u}_1^\top \mathbf{M} & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

3.3.1 Modifizierung für das k -Eigenwert-Problem

Mit der im vorherigen Abschnitt motivierten Modifikation des Gradienten der LAGRANGE-Funktion werden nun die Hilfssätze aus Abschnitt 3.1 neu formuliert. Die Änderungen werden mit \bullet gekennzeichnet.

Für die ersten Ableitungen ergibt sich aus Lemma 3.2:

Lemma 3.8 (Modifizierter Gradient)

Die modifizierten Variationsableitungen der LAGRANGE-Funktion des k -Eigenwert-Problems sind gegeben durch:

- Für $u_i \in U$:
 $\nabla_{u_i}\mathcal{L}(U, \Lambda, M)[\delta u_i] = 2a(u_i, \delta u_i) - 2\lambda_i(u_i, \delta u_i) - m_i(\delta u_i),$
 mit $m_i(u) := \sum_{j=1}^{i-1} \mu_{ji}(u, u_j).$
- Für $\lambda_i \in \Lambda$:
 $\nabla_{\lambda_i}\mathcal{L}(U, \Lambda, M)[\delta \lambda_i] = -\delta \lambda_i((u_i, u_i) - 1).$
- Für $\mu_{ij} \in M$:
 $\nabla_{\mu_{ij}}\mathcal{L}(U, \Lambda, M)[\delta \mu_{ij}] = -\delta \mu_{ij}(u_i, u_j).$

Und aus Lemma 3.3 folgt mit den modifizierten Ableitungen nach Lemma 3.8:

Lemma 3.9 (Modifizierte HESSE-Matrix)

Die modifizierte HESSE-Matrix der LAGRANGE-Funktion ist von folgender Blockgestalt:

$$\nabla^2\mathcal{L} = \begin{pmatrix} \nabla^2\mathcal{L}_{uu} & \nabla^2\mathcal{L}_{u\lambda} & \nabla^2\mathcal{L}_{u\mu} \\ \nabla^2\mathcal{L}_{\lambda u} & \nabla^2\mathcal{L}_{\lambda\lambda} & \nabla^2\mathcal{L}_{\lambda\mu} \\ \nabla^2\mathcal{L}_{\mu u} & \nabla^2\mathcal{L}_{\mu\lambda} & \nabla^2\mathcal{L}_{\mu\mu} \end{pmatrix}.$$

Als Notation wird $\nabla^2\mathcal{L}_{xy}$ für die Matrix der Ableitungen von $\nabla_x\mathcal{L}(U, \Lambda, M)$ nach y verwendet. Im Detail sind die Einträge gegeben durch

- $(\nabla^2\mathcal{L}_{uu})_{il} = \delta_{\nabla_{u_i}\mathcal{L}}[\delta u_l] = \begin{cases} -\mu_{li}(\delta u_l, v_i), & l < i \\ 2a(\delta u_i, v_i) - 2\lambda_i(\delta u_i, v_i), & l = i \end{cases}$
- $(\nabla^2\mathcal{L}_{u\lambda})_{il} = \delta_{\nabla_{u_i}\mathcal{L}}[\delta \lambda_l] = \begin{cases} -2\delta \lambda_i(u_i, v_i), & l = i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$

- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{u\mu})_{i(lm)} = \delta_{\nabla_{u_i} \mathcal{L}}[\delta \mu_{lm}] = \begin{cases} -\delta \mu_{ml}(v_i, u_j), & l \neq i \text{ und } m = i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$
Wobei $_{i(lm)}$ den zu μ_{lm} gehörigen Eintrag in der i -ten Zeile bezeichnet.
- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda u})_{il} = \delta_{\nabla_{\lambda_i} \mathcal{L}}[\delta u_l] = \begin{cases} -2(\delta u_i, u_i) \hat{\lambda}_i, & l = i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$
- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda\lambda})_{il} = \delta_{\nabla_{\lambda_i} \mathcal{L}}[\delta \lambda_l] = 0$
- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{\lambda\mu}) = 0$
- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{\mu u})_{(lm)j} = \delta_{\nabla_{\mu_{lm}} \mathcal{L}}[\delta u_j] = \begin{cases} -(v_i, \delta u_j) \hat{\mu}_{lm}, & j = l \\ -(v_i, \delta u_j) \hat{\mu}_{lm}, & j = m \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$
- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{\mu\lambda})_{(lm)j} = \delta_{\nabla_{\mu_{lm}} \mathcal{L}}[\delta \lambda_j] = 0$
- $(\nabla^2 \mathcal{L}_{\mu\mu}) = 0$

Es bezeichnet v_i die Testfunktion zu u_i . Mit $\hat{\lambda}_i$ und $\hat{\mu}_{lm}$ wird die Testfunktion für die LAGRANGE-Parameter bezeichnet.

3.4 Modellproblem I: Numerische Ergebnisse II

Im zweiten Teil über numerische Berechnungen für das Finite-Differenzen-Modellproblem wird zunächst die Modifizierung aus Abschnitt 3.3 mit der Konfiguration aus 3.2 getestet. Hierfür betrachten wir das 2-Eigenwert-Problem für die Matrixgröße $n = 20$. Die numerischen Ergebnisse sind in der Abbildung 3.4 mit der grauen Vergleichskurve des 1-Eigenwert-Problems aus 2.2 dargestellt. Dabei bezeichnet $\|\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}_i^t, \lambda_i^t)\|$ das Residuum des i -ten Lösungsvektors von $\|\nabla \mathcal{L}(U^t, \Lambda^t, M^t)\|$:

$$\begin{aligned} \|\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}_1^t, \lambda_1^t)\| &= \|2\mathbf{A}\mathbf{u}_1 - 2\lambda_1\mathbf{u}_1\|, \\ \|\nabla \mathcal{L}(\mathbf{u}_2^t, \lambda_2^t)\| &= \|2\mathbf{A}\mathbf{u}_2 - 2\lambda_1\mathbf{u}_2 - \mu_{12}\mathbf{u}_1\|. \end{aligned}$$

Die expliziten Zahlen für die approximierenden Eigenwerte sind in Tabelle 3.1 aufgeführt. Der positive Aspekt des modifizierten Verfahrens zeigt sich in der Konvergenz von beiden Eigenwerten und Eigenvektoren. Im Gegensatz zur ursprünglichen Formulierung ist eindeutig festgelegt, dass λ_1^t gegen λ_1^* konvergiert.

Die Anzahl der benötigten NEWTON-Schritte und GMRES-Schritte erhöht sich dabei im Vergleich zur Berechnung von einem Eigenwert. Diese Beobachtung ist nicht ungewöhnlich in Betracht der größeren Komplexität der Problemstellung.

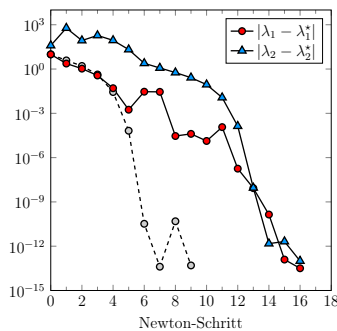
Interessanter ist die Beobachtung, dass λ_1 und \mathbf{u}_1 bereits in den ersten Iterationsschritten konvergieren, und das nahezu identisch mit den Werten aus dem 1-Eigenwert-Problem. Die Fehler in λ_2 und \mathbf{u}_2 wachsen zu Beginn stark an und fallen nach 5 NEWTON-Iterationen ab.

Mit den expliziten Zahlen aus Tabelle 3.1 kristallisieren sich zwei Probleme:

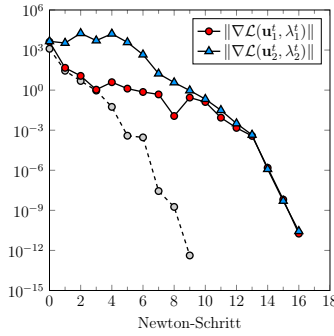
1. Der Wert von λ_2^t wächst stark an.
 In Abschnitt 2.3.2.2 wurde untersucht, wie sich Änderungen im Startwert auf die Konvergenz auswirken. Es hat sich gezeigt, dass ein zu großer Starteigenwert zur Konvergenz gegen falsche Eigenwerte führt.
2. Der Wert von λ_2^t oszilliert und wird dabei auch negativ.
 Dies spiegelt sich in der Anzahl der benötigten GMRES Schritte wieder.

Tabelle 3.1: Approximierende Eigenwerte für $n = 20$ berechnet mit dem modifizierten Verfahren.

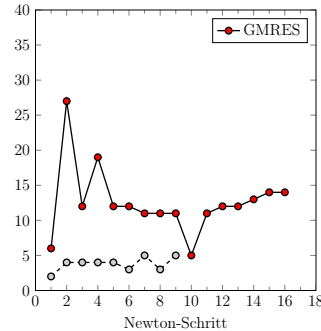
NEWTON	λ_1^t	λ_2^t	NEWTON	λ_1^t	λ_2^t
0	0.00	0.00	5	9.85	60.10
1	7.49	637.84	6	9.88	41.63
2	8.79	-46.19	7	9.82	40.37
3	9.48	227.96	8	9.85	39.76
4	9.80	-48.59	9	9.85	39.44



(a) Fehler im Eigenwert



(b) Residuum der Eigenvektoren



(c) GMRES-Schritte pro NEWTON-Schritt

Abbildung 3.4: Erster Testlauf für 2 Eigenwerte bei einer Systemgröße von $n = 20$ mit dem modifizierten Verfahren. Die Startwerte der Eigenwerte sind $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$. Der graue Graph ist ein Vergleichswert der Ergebnisse bei Berechnung von einem Eigenwert.

3.4.1 Gedämpftes NEWTON-Verfahren als Strategie zur Bestimmung von Startwerten

Das Ergebnis des vorherigen Abschnittes ist nur ein glücklicher Einzelfall. Bei unterschiedlichen Konfigurationen sind diverse Ergebnisse möglich, wie in Tabelle 3.2 dargestellt ist. Die folgenden Fälle sind bei den Testläufen aufgetreten:

- Fall 1: Konvergenz gegen die kleinsten Eigenwerte (λ_1, λ_2) .
- Fall 2: Konvergenz gegen beliebige Eigenwerte, oder gegen den kleinsten und einen weiteren Eigenwert.
- Fall 3: Abbruch durch GMRES vor Erreichen von 50 Iterationen mit Konvergenz gegen Eigenwert.
- Fall 4: Abbruch durch GMRES vor Erreichen von 50 Iterationen und keine Konvergenz gegen Eigenwerte (siehe Tabelle 3.5).
- Fall 5: Keine Konvergenz nach 50 NEWTON-Iterationen.

In der Tabelle 3.2 ist zusätzlich der maximale Wert angegeben, den λ_2^t erreicht. In der letzten Spalte steht der zugehörige NEWTON-Schritt.

Bemerkung 3.10

Grundsätzlich steigt der 2. Eigenwerte im ersten NEWTON-Schritt explosiv an. Dieses Anwachsen um mehrere Größenordnungen ist gut in Abbildung 3.4 erkennbar. Je nach Konfiguration ist auch der 1. Eigenwert λ_1^t davon betroffen.

In Abschnitt 2.3.2.2 wurde das Konvergenzverhalten des 1-Eigenwert-Problems bei unterschiedlichen Startwerten λ_1^0 getestet. Dabei wurde festgestellt, dass die Konvergenz gegen den kleinsten Eigenwert robust ist, sofern sich der Startwert in einem moderaten Umfeld um den kleinsten Eigenwert befindet.

Die Fälle 1 und 2 treten dann auf, wenn beide Eigenwerte moderate Werte im ersten NEWTON-Schritt erreichen. Ist dieser Wert für beide Eigenwerte zu groß, so wachsen sie in der Regel weiter an, bis 50 Iterationen erreicht sind (Fall 5) oder der GMRES-Löser nicht konvergiert (Fall 4). Sofern nur der 2. Eigenwert anwächst kann Fall 3 auftreten.

Im Gegensatz zu den Beobachtungen aus 2.3.2.1 führt die Normierung der Startvektoren nicht zu einer Verbesserung im Ergebnis. Sie vergrößert wesentlich den Wert von λ_2^t im 1. Schritt.

Tabelle 3.2: Auswirkung der Startwerte und Normierung auf die Konvergenz. Mit t_G ist der t -te NEWTON Schritt bezeichnet, bei dem der GMRES Löser nicht konvergiert ist.

$n =$	$\ \mathbf{u}_i\ = 1$	$(\lambda_1^0, \lambda_2^0)$	Ergebnis	$\max \lambda_2^t $	t_{\max}
20	Nein	(0, 0)	(λ_1, λ_2)	$6.4 \cdot 10^6$	1
20	Nein	(2, 5)	–	$-3.1 \cdot 10^4$	50
20	Ja	(0, 0)	$(\lambda_1, \lambda_{16})$	$4.1 \cdot 10^6$	1
20	Ja	(2, 5)	$(\lambda_2, \lambda_{14})$	$4.0 \cdot 10^6$	1
100	Nein	(0, 0)	$(\lambda_1, \lambda_{39})$	$13.3 \cdot 10^6$	1
100	Nein	(2, 5)	$(\lambda_2, \lambda_{39})$	$-26.4 \cdot 10^6$	1
100	Ja	(0, 0)	$(\lambda_3, 15_G)$	$1.3 \cdot 10^6$	14
100	Ja	(2, 5)	$(\lambda_1, 28_G)$	$-3.1 \cdot 10^{-12}$	27
≥ 1000	Beide Eigenwerte steigen an bis GMRES abbricht.				

Das rasche Ansteigen des zweiten Eigenwertes und des Residuums im zweiten Eigenvektor (siehe Abbildung 3.4) motiviert die Verwendung des gedämpften NEWTON-Verfahrens.

Definition 3.11 (Gedämpftes NEWTON-Verfahren im \mathbb{R}^n)

Sei $u^0 \in \mathbb{R}^n$ ein gegebener Startwert. Dann lautet die Defekt-Korrektur-Iteration des gedämpften NEWTON-Verfahrens:

$$\begin{array}{ll} \text{Löse} & \nabla f(u^t) \delta u = -f(u^t), \\ \text{Berechne} & u^{t+1} = u^t + \varepsilon \delta u, \end{array}$$

mit einem Dämpfungsparameter $\varepsilon \in [0, 1]$.

Die geeignete Wahl des Dämpfungsparameters ε kann die Konvergenz außerhalb des Bereichs der quadratischen Konvergenz sichern. Jedoch ist diese Wahl weder offensichtlich noch universell. Um den Dämpfungsparameter anhand der Problemstellung zu bestimmen wird die Methode der Schrittweitenhalbierung genutzt. Diese Bestimmung der Schrittweite besitzt den Vorteil, dass im Einzugsbereich der quadratischen Konvergenz die Schrittweite $\varepsilon = 1$ verwendet wird. Die Halbierung hat zur Folge, dass in Allgemeinen nicht das optimale ε gefunden wird.

Definition 3.12 (Schrittweitenhalbierung)

In jedem NEWTON-Schritt setze $\varepsilon = 1$.

Iteriere die folgende Schrittweitenhalbierung:

$$\begin{array}{ll} \text{Berechne} & u^{t+1} = u^t + \varepsilon \delta u, \\ \text{Falls} & \|f(u^{t+1})\| > \|f(u^t)\| \wedge \varepsilon \not\leq \varepsilon_{\min}, \\ \text{Setze} & \varepsilon = \frac{\varepsilon}{2}. \end{array}$$

Für die nachfolgenden Berechnungen wird eine maximale Anzahl von 20 Halbierungen gesetzt. Dies entspricht einer minimalen Schrittweite $\varepsilon_{\min} \approx 10^{-6}$.

Die Auswirkung der globalen Dämpfung sind in Spalte (b) von Tabelle 3.3 und 3.4 dargestellt. Die globale Dämpfung verringert den Wert von $\lambda_2^{t=1}$ für $n = 100$ um den Faktor 2. Diese Dämpfung genügt für kleine Systeme bereits für die Konvergenz gegen λ_2^* .

Für größere Systeme ist die globale Dämpfungsstrategie nicht zielführend. Dies zeigt bereits der Fall $n = 1000$, bei dem eine Verkleinerung von $\lambda_2^{t=1}$ um den Faktor 4 für $n = 1000$ nicht ausreichend für den GMRES-Löser ist.

Die folgende Methode soll das Anwachsen der Eigenwerte komplett unterdrücken.

Definition 3.13 (Stärkere Dämpfung der Eigenwerte)

Um das rasche Ansteigen des zweiten Eigenwertes zu verhindern werden die Eigenwerte mit einem kleineren Parameter ε_λ gedämpft. Ist die globale Dämpfung ε so wird

$$\varepsilon_\lambda = \frac{1}{\delta^{T-t+1}} \cdot \varepsilon$$

im t -ten NEWTON-Schritt, mit $t \leq T$ gesetzt. Dabei bestimmt T die Anzahl der Dämpfungsschritte und δ die Stärke der Dämpfung.

In Spalte (c) der beiden Tabellen sind die Ergebnisse mit den Parametern $\delta = 2$ und $T = 5$ aufgelistet. Dies entspricht einer Dämpfung in den ersten 5 NEWTON-Iterationen.

Nicht überraschend ist der kleinere Wert von λ_2^t . Des Weiteren lässt sich beobachten:

- Für $n = 100$ konvergiert das Verfahren gegen den falschen Eigenwert.
- Für $n = 1000$ wechselt das Vorzeichen des approximierenden Eigenwerts.

Tabelle 3.3: Auswirkung der Dämpfungsstrategien für $n = 100$ bei Berechnung mit $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$ und unnormierten Startvektoren. Dargestellt ist der approximierende Eigenwert λ_2^t im t -ten NEWTON-Schritt.

Die Berechnung erfolgt:

- (a) ohne Dämpfung,
- (b) mit globaler Dämpfung,
- (c) mit zusätzlicher Dämpfung der Eigenwerte mit $\delta = 2, T = 5$,
- (d) mit zusätzlicher Dämpfung der Eigenwerte *und* des LAGRANGE-Parameters μ_{12} mit $\delta = 2, T = 5$.

NEWTON	(a)	(b)	(c)	(d)
0	0	0	0	0
1	13250	6625.2	207.0	414.0
2	8418	1084.4	219.0	402.4
3	10877	-433.7	221.3	394.0
4	12214	24.2	224.4	387.4
5	12847	38.3	229.9	378.3
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
10	13262	39.5	246.2	354.2
11	13259	39.5	246.2	354.2
	$\approx \lambda_{30}^*$	$\approx \lambda_2^*$	$\approx \lambda_5^*$	$\approx \lambda_6^*$

Tabelle 3.4: Bezeichnung wie in Tabelle 3.3 für $n = 1000$.

NEWTON	(a)	(b)	(c)	(d)
0	0	0	0	0
1	$1.26 \cdot 10^6$	314376	1228.4	39297
2	$2.26 \cdot 10^6$	314378	-7142.2	39297
3	$3.11 \cdot 10^6$	-	-6958.1	-
4	$3.81 \cdot 10^6$		-5964.4	
5	$4.30 \cdot 10^6$		-4251.5	
6	$4.57 \cdot 10^6$		-1734.2	
7	$4.80 \cdot 10^6$		-559.5	
8	-		-125.4	
9			-9.6	
10			27.5	
11			36.1	
12			38.5	
	-	-	$\approx \lambda_2^*$	-

Bemerkung 3.14

Ein weiterer Aspekt der zu dieser besonderen Dämpfung geführt hat, ist die Wahl der Startwerte. Ziel des Verfahrens ist es ein Eigenwert-Eigenvektor-Paar des Operators zu approximieren. Da im Allgemeinen nur wenig über die kontinuierlichen Lösungen bekannt ist, sind die Testläufe mit beliebig gewählten Startwerten getestet worden. Die einzige begründete Wahl ist $\lambda_1^0 = 0$ als Näherung für den kleinsten Eigenwert, denn alle Eigenwerte sind positiv.

Daher besteht die Hoffnung durch stärkere Dämpfung in den ersten T Iterationen ein geeignetes Eigenvektor-Eigenwert-Paar zu finden, um die Konvergenz gegen die kleinsten Eigenwerte zu sichern.

Testläufe mit einer Vielzahl möglicher Konfigurationen sind in Tabelle 3.5 dargestellt. Auf den ersten Blick ist ersichtlich, dass keine Dämpfungsstrategie für beliebige Konfigurationen erfolgreich ist. Dennoch liefern einige Strategien die gewünschte Konvergenz gegen die kleinsten Eigenwerte.

Die Spalten (b) und (d) vergleichen das Verhalten bei Dämpfung beider Eigenwerte gegenüber der ausschließlicher Dämpfung des zweiten Eigenwertes. Gemeinsam mit der Veranschaulichung in den Abbildungen 3.5 und 3.6 zeigt sich, dass die Dämpfung des ersten Eigenwertes kaum Unterschiede im Konvergenzverhalten ergibt. Diese Dämpfung ist nicht stark genug um das Anwachsen im 1. Schritt zu verhindern. Der erreichte Wert ist für $n = 100$ im Einzugsbereich von λ_5^* , sodass Konvergenz gegen dieses Minimum erfolgt. Für $n = 1000$ fällt der Wert ins negative und konvergiert anschließend gegen die richtige Lösung. Dieses Verhalten wird in Bemerkung 3.15 untersucht.

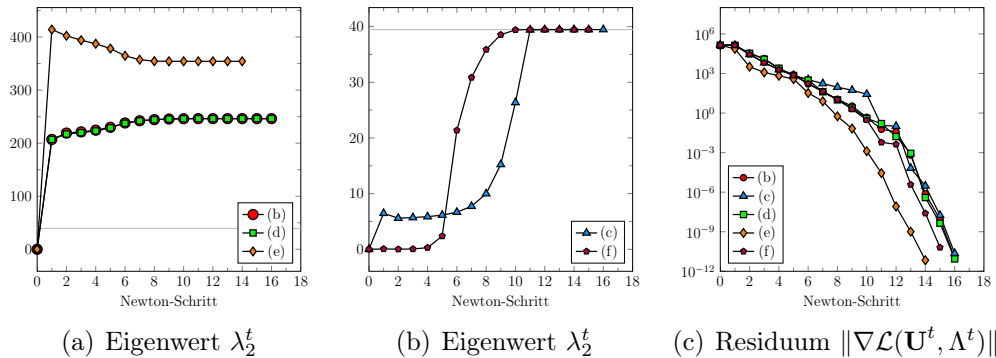


Abbildung 3.5: In dieser Abbildung werden die Dämpfungsstrategien aus Tabelle 3.5 für den Fall $n = 100$ mit Startwerten $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$ dargestellt.

Bei Dämpfung über eine größere Anzahl von NEWTON-Iterationen (c) kann sich das Ergebnis sowohl verbessern ($n = 100$) als auch verschlechtern ($n = 1000$).

Die Dämpfungsstrategie mit größerem Parameter $\delta = 10$ ist repräsentativ für das Verhalten von λ_2^t während der NEWTON-Iteration. Sobald die Dämpfung nach $T = 5$ Schritten beendet ist, steigt der Wert rapide an. Im Fall $n = 1000$ ist $\lambda_2^* < \lambda_2^6 < \lambda_3^*$ und noch im Konvergenzbereich von λ_2^* .

Die Wahl von $\delta = 10$ begründet sich darin, dass Berechnungen mit doppeltem Parameter $\delta = 4$ kaum Änderungen im Konvergenzverhalten zeigten. Die Ergebnisse in Spalte (d) von Tabelle 3.5 zeigen ebenso keine einheitliche Verbesserung oder Verschlechterung. Offenbar besitzt diese Dämpfung einen zu starken Einfluss, sodass auch die Konvergenz gegen den kleinsten Eigenwert gestört wird.

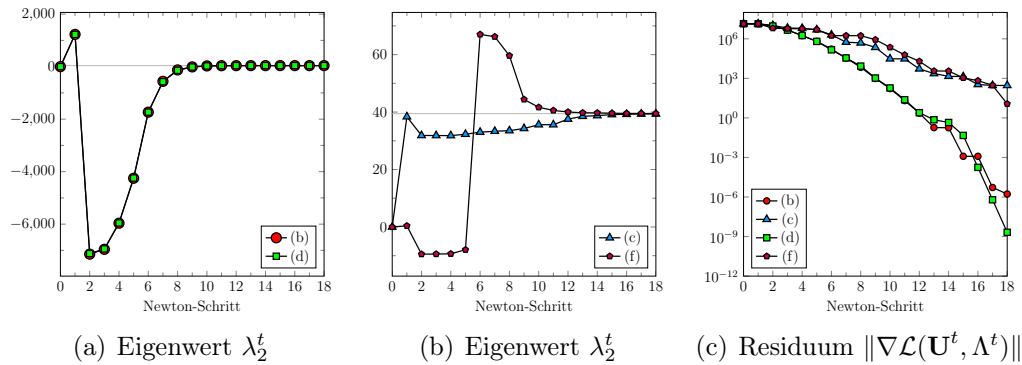


Abbildung 3.6: Darstellung der Konvergenz für $n = 1000$ mit Startwerten $\lambda_1^0 = \lambda_2^0 = 0$. Die Werte bei Dämpfungsstrategie (d) sind zu groß um sie gut in diesen Graphiken darzustellen. Bereits im ersten NEWTON-Schritt ist $\lambda_2^{2,(d)} = 39297$.

Sofern eine beliebige Dämpfung zur Konvergenz führt, ist diese durch das eingesetzte NEWTON-Verfahren sehr schnell. Weitere Testrechnungen ohne aufgeführte Daten sind in der folgenden Bemerkung zusammengefasst.

Bemerkung 3.15

Im Zuge der Beobachtung, dass die approximierenden Eigenwerte negativ werden (siehe Tabelle 3.4 und Abbildung 3.6), wurden Testläufe mit Startwerten $(\lambda_1^0, \lambda_2^0) = (0, x)$, $x \in \mathbb{R}_{<0}$ durchgeführt. Nur in wenigen Konfigurationen hat dies zur Konvergenz gegen die kleinsten Eigenwerte geführt. Dabei wurde beobachtet, dass λ_2^t häufig gegen λ_3^* konvergiert.

Ebenso wurde eine weitere Dämpfungsstrategie getestet. Hierbei wurde der Dämpfungsparameter für den zweiten Eigenwert auf 0 gesetzt. Sowohl Berechnungen mit gedämpftem und ungedämpftem λ_1 lieferten in den meisten Fällen keine guten Ergebnisse. In der Regel konvergierte das Verfahren gegen beliebige Werte.

Tabelle 3.5: Auswirkung verschiedener Dämpfungsstrategien für verschiedene Systemgrößen. Dargestellt ist das approximierende Eigenwert-Paar, sofern das NEWTON-Verfahren terminiert.

Die Berechnung erfolgt:

- (a) ohne Dämpfung,
- (b) mit zusätzlicher Dämpfung der Eigenwerte für $T = 5$ und $\delta = 2$
- (c) mit zusätzlicher Dämpfung der Eigenwerte für $T = 10$ und $\delta = 2$.
- (d) nur mit Dämpfung des zweiten Eigenwertes für $T = 5$ und $\delta = 2$.
- (e) mit Dämpfung der Eigenwerte und Dämpfung von μ_{12} für $T = 5$ und $\delta = 2$.
- (f) mit zusätzlicher Dämpfung der Eigenwerte für $T = 5$ und $\delta = 10$.

n	$\ \mathbf{u}_i\ = 1$	$(\lambda_1^0, \lambda_2^0)$	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)
20	Nein	(0, 0)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)
20	Nein	(2, 5)	–	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_9)	(λ_1, λ_2)
20	Ja	(0, 0)	$(\lambda_1, \lambda_{16})$	(λ_1, λ_7)	(λ_1, λ_6)	(λ_1, λ_7)	(λ_1, λ_9)	(λ_1, λ_9)
20	Ja	(2, 5)	$(\lambda_2, \lambda_{14})$	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_9)	(λ_1, λ_9)
100	Nein	(0, 0)	$(\lambda_1, \lambda_{39})$	(λ_1, λ_5)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_5)	(λ_1, λ_6)	(λ_1, λ_2)
100	Nein	(2, 5)	$(\lambda_2, \lambda_{39})$	(λ_1, λ_5)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_5)	(λ_1, λ_6)	(λ_1, λ_2)
100	Ja	(0, 0)	$(\lambda_3, 15_G)$	$(\lambda_1, \lambda_{22})$	$(\lambda_1, \lambda_{23})$	$(\lambda_1, \lambda_{22})$	$(\lambda_1, \lambda_{23})$	$(\lambda_1, \lambda_{22})$
100	Ja	(2, 5)	$(\lambda_1, 28_G)$	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	$(\lambda_1, \lambda_{22})$
1000	Nein	(0, 0)	$8_G^1)$	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_2)	5_G	(λ_1, λ_2)
1000	Nein	(2, 5)	16_G	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_3)	(λ_1, λ_2)	4_G	(λ_2, λ_1)
1000	Ja	(0, 0)	13_G	$(\lambda_1, \lambda_{15})$	(λ_1, λ_3)	$(\lambda_1, \lambda_{14})$	(λ_1, λ_2)	(λ_1, λ_3)
1000	Ja	(2, 5)	13_G	$(\lambda_1, \lambda_{19})$	–	$(\lambda_1, \lambda_{19})$	$(\lambda_1, \lambda_{19})$	(λ_1, λ_2)
10000	Nein	(0, 0)	8_G	(λ_1, λ_2)	–	$(\lambda_1, \lambda_{17})$	3_G	(λ_7, λ_4)
10000	Nein	(2, 5)	10_G	9_G	–	8_G	3_G	(λ_5, λ_2)
10000	Ja	(0, 0)	13_G	4_G	–	4_G	3_G	–
10000	Ja	(2, 5)	13_G	4_G	–	5_G	19_G	–
20000	Nein	(0, 0)	1_G	3_G	(λ_1, λ_3)	–	3_G	–
20000	Nein	(2, 5)	1_G	3_G	35_G	–	3_G	–
20000	Ja	(0, 0)	1_G	15_G	–	–	13_G	–
20000	Ja	(2, 5)	1_G	15_G	–	–	13_G	–

¹⁾ t_G : Die t -te NEWTON-Iteration, bei der das GMRES-Verfahren nicht konvergiert.

Die zusätzliche Dämpfung des LAGRANGE-Parameters μ_{12} ist ein weiterer Versuch Konvergenz gegen die kleinsten Eigenwerte zu erzeugen. Diese Idee ist durch das unregelmäßige Verhalten von μ_{12} in Abbildung 3.7 motiviert.

Die Ergebnisse in den vorherigen Abbildungen und Tabellen zeigen, dass die Dämpfung von μ_{12} im Allgemeinen zu einer Verschlechterung der Ergebnisse führt.

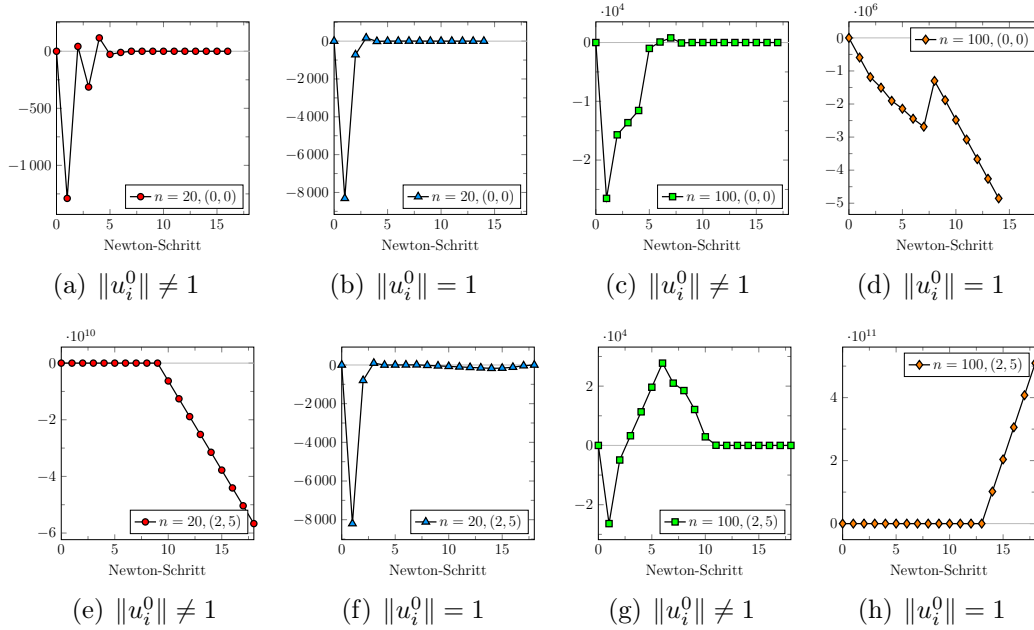


Abbildung 3.7: Verhalten des LAGRANGE-Multiplikators μ_{12}^t , bei verschiedener Matrixgröße und Starteigenwerten aus Tabelle 3.2.

Bemerkung 3.16 (Modellproblem II)

Für das finite Elemente Modellproblem aus Abschnitt 2.4 wurden Berechnungen mit 3 Eigenwerten durchgeführt, da λ_2^* mit Vielfachheit zwei gegeben ist. Dabei spiegelten sich die gleichen Probleme wie für das Modellproblem I wieder.

Da sich keine Stabilisierungsstrategie als erfolgreich erwiesen hat, ist das Verfahren nicht zu Eigenwertbestimmung einsetzbar. In Kapitel 4 sind zwei mögliche Veränderungen erläutert, welche die Berechnung mehrerer Eigenwerte ermöglichen könnten.

4 Zusammenfassung, Schlussfolgerung und Ausblick

In diesem Kapitel sind die Resultate dieser Arbeit zusammengefasst und es wird ein Ausblick auf zukünftige Forschung gegeben. Dabei ist bereits ein Großteil in den Bemerkungen der vorangegangenen Kapitel ausgeführt.

Diese Arbeit behandelt die Lösung variationeller Eigenwertprobleme mit dem NEWTON-Verfahren. Eigenwerte von Operatoren sind unter anderem in der Quantenmechanik gefragt. In der Quantenmechanik werden Eigenwert-Eigenvektor-Paare als Eigenzustände bezeichnet und sind die wichtigsten Informationsträger über die Zustände eines physikalischen Systems.

Da die Operatoren der Quantenmechanik im Allgemeinen nicht-linear sind, bietet sich das NEWTON-Verfahren zur Lösung des Eigenwert-Problems an. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Verfahren für zwei Modellprobleme getestet.

4.1 1-Eigenwert-Problem

Die Berechnung eines Eigenwertes mit dem NEWTON-Verfahren ist sehr gut durchführbar. Für beide Modellprobleme konnte der kleinste Eigenwert erfolgreich und mit hoher Genauigkeit approximiert werden. Hierfür ist die Vorkonditionierung aus Abschnitt 2.3.1 unerlässlich. Es hat sich gezeigt, dass das Verfahren robust unter Störungen der Startwerte konvergiert.

Für das 1-Eigenwert-Problem sind noch einige interessante Wege zu begehen.

Zunächst ist die Implementierung eines nicht-linearen Operators wichtig. Da nicht-lineare Operatoren die ursprüngliche Motivation für diese Arbeit waren, stellt sich die Frage, wie gut das NEWTON-Verfahren diese Probleme löst.

Anschließend ist ein Vergleich in Bezug auf Aufwand und Geschwindigkeit mit anderen Verfahren zur Berechnung eines Eigenwertes wichtig. Ein mögliches Verfahren ist die vorgestellte Potenzmethode nach VON MISES.

4.2 k -Eigenwert-Problem

Die Berechnung von mehreren Eigenwerten hat sich als sehr schwierig erwiesen. Auch mit dem modifizierten NEWTON-Verfahren aus Abschnitt 3.3 ergab sich keine allgemeine Methode, welche die Konvergenz gegen die richtigen Eigenwerte garantiert. Aufgrund der Erfahrungen mit der Berechnung von mehreren Eigenwerten, werden im Folgenden zwei Verfahren vorgeschlagen, die zu robustem Konvergenzverhalten führen können.

Bemerkung 4.1 (Idee 1)

In Abbildung 3.4 kann man erkennen, dass der erste Eigenwert schneller und insbesondere von Beginn an konvergiert. Der zweite Eigenwert beginnt erst nach einigen Iterationsschritten zu konvergieren. Daher kann die folgende Methode die Berechnung mehrerer Eigenwerte stabilisieren:

1. Berechne eine erste Approximation $(\lambda_1^T, \mathbf{u}_1^T)$ mit wenigen Schritten des 1-Eigenwert-Problems.
2. Verwende diese Approximation als guten Startwert $(\lambda_1^0, \mathbf{u}_1^0)$ im Löser des 2-Eigenwert-Problems.

Ist die Approximation des ersten Eigenwert-Eigenvektor-Paares hinreichend genau, so kann es sein, dass auch das zweite Paar direkt konvergiert.

Da der erste approximierende Eigenwert schneller konvergiert (siehe Abbildung 3.4), ist es naheliegend direkt konsekutiv beide Eigenwerte zu berechnen.

Bemerkung 4.2 (Idee 2)

Ein geschicktes Vorgehen nach Satz 1.8 ist:

1. Berechne eine Approximation $(\lambda_1^T, \mathbf{u}_1^T)$ des 1-Eigenwert-Problems mit der gewünschten Genauigkeit.
2. Löse das Minimierungsproblem: Finde $\mathbf{u}_2^* \in \mathbb{R}^n$, sodass:

$$\mathbf{u}_2^* = \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n} a(\mathbf{u}, \mathbf{u})$$

unter den Nebenbedingungen

$$0 = \mathbf{u}^\top \mathbf{u} - 1,$$

$$0 = \mathbf{u}_1^\top \mathbf{u}.$$

Literaturverzeichnis

- [1] H.W. Alt. *Lineare Funktionalanalysis*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1995.
- [2] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat. deal.II — a general purpose object oriented finite element library. *ACM Trans. Math. Softw.*, 33(4), 2007.
- [3] W. Bangerth, T. Heister, L. Heltai, G. Kanschat, M. Kronbichler, M. Maier, and B. Turcksin. The deal.II library, version 8.3. *Archive of Numerical Software*, 4(100):1–11, 2016.
- [4] P. Bastian. *Numerische Lösung partieller Differentialgleichungen - Vorlesungsskript*. Universität Heidelberg, 2008.
- [5] P.G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. SIAM, 1978.
- [6] T.A. Davis. Algorithm 832: UMFPACK v4.3—an unsymmetric-pattern multifrontal method. *ACM Trans. Math. Softw.*, 30:196–199, 2004.
- [7] G. Kanschat. *Amandus*, 2015.
<https://bitbucket.org/guidokanschat/amandus>.
- [8] L. Heltai M. Maier, M. Bardelloni. Linearoperator - a generic, high-level expression syntax for linear algebra. *Computers & Mathematics with Applications*, 2015.
- [9] W. Nolting. *Grundkurs - Theoretische Physik 5: Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. Springer, 2015.
- [10] G. Peters and J.H. Wilkinson. *Inverse Iteration, Ill-Conditioned Equations and Newton's Method*. 1978.
- [11] R. Rannacher. *Numerische Mathematik 3 (Numerik von Problemen der Kontinuumsmechanik) - Vorlesungsskript*. Universität Heidelberg, 2001.
- [12] R. Rannacher. *Numerische Mathematik 2 (Numerik Partieller Differentialgleichungen) - Vorlesungsskript*. Universität Heidelberg, 2008.

- [13] T. Richter. *Die Finite Elemente Methode für partielle Differentialgleichungen - Vorlesungsskript*. Universität Heidelberg, 2011.
- [14] T. Richter. *Numerische Methoden der Strömungsmechanik - Vorlesungsskript*. Universität Heidelberg, 2012.
- [15] Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems (1st edition)*. SIAM, 1996.
- [16] Y. Saad. *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems - 2nd Edition*. SIAM, 2011.
- [17] M. Salmhofer. *Quantenmechanik PTP4 - Vorlesungsskript*. Universität Heidelberg, 2014.
- [18] H. Schwetlick. *Inverse Iteration, Newton, and Jacobi-Davidson Type Methods for Computing Eigenvalues - IWASEP4 Workshop*. Technische Universität Dresden, 2012.
- [19] J.P. Solovej. *Many-body Quantum Physics - Lecture Notes*. Universität Wien, 2014.
- [20] T. Richter und T. Wick. *Einführung in die numerische Mathematik - Vorlesungsskript*. Universität Heidelberg, 2014.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne un-erlaubte fremde Hilfe verfasst habe. Alle verwendeten Quellen sind im Literaturverzeichnis am Ende der Arbeit angegeben.

Heidelberg, 1. März 2016
