Technische Universität München
Institut für Informatik

Multiskalenverfahren bei der Modellierung, Diskretisierung und Lösung von Diffusionsproblemen

Diplomarbeit

Stephan Knapek

Aufgabensteller: Prof. Dr. Christoph Zenger
Betreuer: Priv. Doz. Dr. Michael Griebel

Abgabedatum: 12. Juni 1995

Hiermit erkläre ich, daß ich die Diplomarbeit selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

München, den 12. Juni 1995

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Die Größenunterschiede der in der Natur auftretenden Erscheinungen sind wohl eine ihrer bemerkenswertesten Eigenschaften. Nur deswegen sind die meisten physikalischen Theorien, die Naturphänomene zu beschreiben versuchen, praktikabel, weil sie sich auf eine Größenordnung beschränken. Vorgänge, die sich auf sehr verschiedenen Größenordnungen abspielen, beeinflußen sich meist kaum. So ist es bei der Beschreibung makroskopischer mechanischer Vorgänge in der Regel unerheblich, welche mikroskopische Struktur die einzelnen beteiligten Körper besitzen. Oder denken wir nur an die Navier-Stokes-Gleichungen, die die Grundlage der modernen Strömungsmechanik bilden. Sie beschreiben die Bewegung von Fluiden auf einer Größenskala weit größer als die mittlere freie Weglänge eines einzelnen Atoms. Das heißt, Strukturen verschiedener Größenordnung, Vorgänge die sich auf verschiedenen Größenskalen abspielen, lassen sich unabhängig voneinander beschreiben. Dies gilt jedoch nicht für alle Erscheinungen in der Natur. Denken wir z.B. an das Verhalten von Ferromagneten oder von Wasser in der Nähe des kritischen Temperaturpunktes. Im Wasser bilden sich Flüssigkeitstropfen, die mit Dampfblasen durchsetzt sind, deren kleinste die Größe von einzelnen Molekülen besitzen, deren größte jedoch fast das gesamte Volumen einnehmen. Das Verhalten am kritischen Punkt wird nun von den Blasen beider Größenordnungen bestimmt und damit ist es nicht möglich, sich bei der Beschreibung des Problems auf eine einzige Größenskala zu beschränken. Weitere klassische Beispiele für solche Phänomene sind die Navier-Stokes-Gleichungen in der Turbulenzsimulation bei großen Reynoldszahlen oder das Verhalten einer Flüssigkeit, die durch den Erdboden oder durch ein anderes poröses Material sickert. Dort werden die Schwierigkeiten durch eine sehr schnell im Ort variierende Materialfunktion, die die Durchlässigkeit des Materials gegenüber der sie durchströmenden Flüssigkeit beschreibt, induziert.

Exakte Lösungen für Probleme dieser Art wurden bisher in den wenigsten Fällen gefunden, und um genaue numerische Lösungen zu erhalten, ist es erforderlich, daß alle im Problem auftretenden räumlichen Größenskalen durch die in der Simulation verwendeten diskreten Größen aufgelöst werden. Da im Speicher eines Computers nur eine endliche Zahl von Daten gehalten weden kann, können die exakten Details einer Lösung eines kontinuierlichen Problems im allgemeinen nicht berechnet werden. Der gebräuchlichste Weg, ein kontinuierliches Problem auf eines mit einer endlichen Zahl von Freiheitsgraden zu reduzieren, ist durch ein Gitter, das das interessierende Gebiet in eine endliche Zahl von Teilgebieten (Zellen) unterteilt. Dann wird angenommen, daß sich die Problemgrößen in jeder Zelle durch Mittelwerte über die gesamte Zelle „repräsentieren" lassen. Mit der Feinheit des verwendeten Gitters steigt die Genauigkeit der Approximation der kontinuierlichen Größen. Diese ist jedoch aus Speicherplatz- und Rechenzeitgründen beschränkt. Sollen Probleme beschrieben werden, bei denen sehr unterschiedliche Größenskalen auftreten, so läßt sich oft das bei der numerischen Behandlung verwendete Gitter nicht fein genug machen, um alle Skalen aufzulösen. Wenn also der Bereich der unterschiedlichen Größenskalen den durch die Computerkapazität „erlaubten" übersteigt, können die das kontinuierliche Problem beschreibenden fundamentalen Gleichungen nicht mehr verwendet werden.

Für die meisten praktischen Anwendungen sind in einer solchen Situation die feinen Details einer Lösung des Problems jedoch gar nicht von Interesse. Aus diesem Grund liegt es nahe, durch Mittelung der das Problem beschreibenden fundamentalen Gleichungen neue (effektive) Gleichungen zu bestimmen, die direkt die gemittelten abhängigen Variablen (der grobskaligen Lösung) beschreiben. Eine solche Methode der Mittelung wurde schon vor etwa einhundert Jahren von Reynolds in

Bezug auf die Navier-Stokes-Gleichungen durch eine Mittelung im Raum durchgeführt. Einige der feinsten Skalen werden durch die Mittelung herausgefiltert, und der Einfluß dieser „vernachlässigten“ Skalen auf die beibehaltenen Skalen muß modelliert werden. Der erste Schritt in Richtung der numerischen Behandlung eines solchen Problems ist also die Bestimmung derjenigen Gleichungen, die das grobskalige Verhalten des Systems direkt beschreiben.

Die Diskretisierung eines kontinuierlichen Operators läßt sich selbst als Mittelung auffassen, bei der Skalen kleiner als die Gitterweite herausgefiltert werden. Je gröber die Maschen des verwendeten Gitters, desto mehr Skalen gehen bei der Diskretisierung verloren.

Bei Mehrgitterverfahren wird das zu lösende Problem auf einer Sequenz verschieden feiner Gitter diskret betrachtet. Auf den groben Gittern wird eine Korrektur zum einfachen Iterationsverfahren berechnet, das auf dem feinen Gitter angewandt wird. Die Konvergenzraten von Mehrgitterverfahren zur Lösung großer, dünn besetzter, linearer Gleichungssysteme sind unter bestimmten Voraussetzungen, im Gegensatz zu denen klassischer Iterationsverfahren, unabhängig von der Anzahl der Unbekannten und damit von der Gitterweite des zur Diskretisierung verwendeten Gitters. Sie erhalten ihre Schnelligkeit und Effizienz aus dem Zusammenspiel ihrer Bausteine, insbesondere des Glätters und der Grobgitterkorrekturen. Der Glätter dämpft die hohen Frequenzen des Fehlers, und die Grobgitterkorrektur löscht die durch den Glätter kaum beeinträchtigten niederfrequenten Anteile.

Allerdings ist die Wahl der zur konkreten Beschreibung eines Mehrgitterverfahrens nötigen Verfahrenskomponenten – wie Glättungs-, Transport- (Prolongations- und Restriktionsoperatoren) und Grobgitteroperatoren – nicht für alle Problemklassen unproblematisch. Vielmehr kann eine schlechte Wahl der Verfahrenskomponenten zu Verlangsamung der Konvergenz oder sogar zu dessen Zusammenbruch führen.

Insbesondere für Probleme mit stark schwankenden oder springenden Koeffizientenfunktionen ist die Wahl geeigneter Verfahrenskomponenten zum Erreichen der besten, effizientesten und robustesten Algorithmen kein einfaches Problem. Die Grobgitterdiskretisierungen sowie die bilineare Interpolation als Prolongation und die gewichtete Restriktion, die als Verfahrenskomponenten beim konventionellen Zugang verwendet werden, spiegeln das knickbehaftete Verhalten der Lösungsfunktion nicht vernünftig wieder und sind Schuld an der Verschlechterung der Konvergenzrate des zugehörigen Mehrgitterverfahrens. Insbesondere sind die durch das Galerkinverfahren entstehenden Grobgitter-Diskretisierungen schlechte Approximationen des kontinuierlichen Operators und spiegeln das physikalische Verhalten der exakten Lösung nicht wieder.

Eine Lösungsmöglichkeit bieten hier die durch eine hierarchische Sichtweise des Problems motivierten Ansätze, bei denen die Verfahrenskomponenten in Abhängigkeit von der das Problem auf dem feinsten verwendeten Gitter darstellenden Matrix oder in Abhängigkeit des kontinuierlichen Operators gewählt werden. Die durch den Galerkin-Vergröberungsansatz entstehenden Grobgitter-Gleichungen werden in Abhängigkeit von den Feingitter-Gleichungen relativ dazu gebildet und feinskalige Information wird physikalisch sinnvoll auf die gröberen Skalen vererbt. Die Grobgitterdiskretisierungen approximieren das Verhalten der grobskaligen Lösungen des kontinuierlichen Problems besser und die Transportoperatoren zwischen den verschiedenen Gittern interpolieren Knicke im Lösungsverlauf in ausreichender Weise. Die so entstehenden Grobgitteroperatoren beschreiben dann direkt das Verhalten der grobskaligen Lösung des vorgegebenen Problems. Damit läßt sich die Galerkinapproximation als diskretes Verfahren zur Bestimmung von Grobskalenoperatoren interpretieren, die den Einfluß der feinen, durch das Gitter nicht auflösbaren

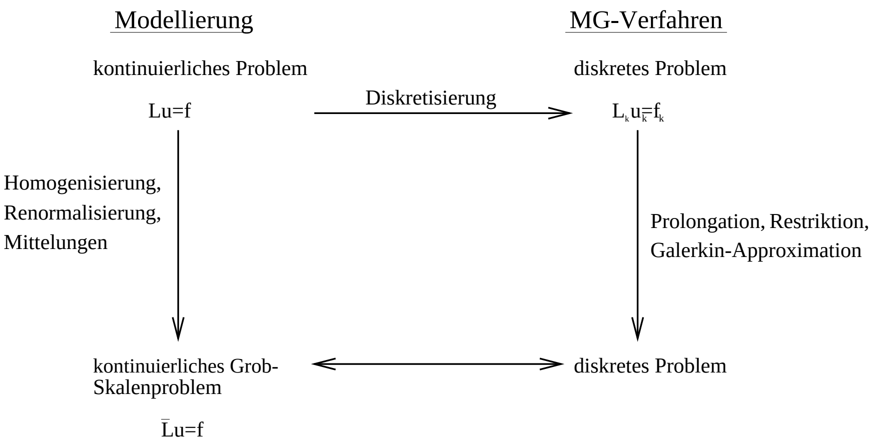

Abbildung 1: Zum Zusammenhang zwischen der Modellbildung zur Bestimmung grobskaliger Gleichungen und der Galerkinapproximation zur Bestimmung von Grobgitteroperatoren in Mehrgitterverfahren

Skalen modellieren. Einfache Mittelungsverfahren des Operators, wie sie durch die Galerkinapproximation mit den Standardtransportabbildungen ausgeführt werden, erweisen sich jedoch sowohl bei der Verwendung in Mehrgitterverfahren, als auch zur Bestimmung von Grobskalenoperatoren, als ungeeignet.

Werden die Verfahrenskomponenten (insbesondere die Transportoperatoren, die dann über die Galerkinapproximation die Grobgitteroperatoren bestimmen) jedoch richtig gewählt, so konvergieren die zugehörigen Mehrgitterverfahren robust und schnell. Ebenso beschreiben die durch die Galerkinapproximation bestimmten Grobgitteroperatoren die grobskaligen Lösungen des vorliegenden Problems besser, als dies durch einfache Mittelungsverfahren geschieht.

Insgesamt erhalten wir damit den in Abbildung 1 dargestellten Zusammenhang zwischen Modellierungsverfahren zur Bestimmung von Grobskalengleichungen – wie der Homogenisierung oder der Renormalisierung – einerseits und der in Mehrgitter-Verfahren zur Bestimmung von Grobgitteroperatoren verwendeten Galerkinapproximation andererseits. Gehen wir von einem kontinuierlichen Problem $Lu = f$ aus, wobei L einen Differentialoperator, u die Lösung des Problems, und f die rechte Seite beschreibe, so erhalten wir durch geeignete Mittelungsverfahren Operatoren, die direkt die grobskalige Lösung des Problems beschreiben. Analog dazu werden durch die Galerkinapproximation aus dem diskretisierten Problem $L_k u_k = f_k$ Grobgitteroperatoren $L_l, l \leq k$ gewonnen. Die entstehenden Grobgitteroperatoren definieren direkt verschiedene Modellierungsverfahren. Umgekehrt lassen sich die von den Modellierungsverfahren gebildeten Operatoren zur Bestimmung grobskaliger Lösungen dazu benutzen, diskrete Grobgitteroperatoren zur Verwendung in Mehrgitterverfahren zu definieren.

In dieser Arbeit werden wir diesen Zusammenhang zwischen den Methoden zur Bestimmung von Grobskalengleichungen einerseits, und der Bestimmung von Verfahrenskomponenten (Transport- und Grobgitteroperatoren) für Mehrgitterverfahren und der daraus resultierenden Interpretation der Galerkinapproximation als diskretem Modellierungsverfahren andererseits, genauer darlegen. Damit zusammenhängend ist die Bestimmung von matrixabhängigen Verfahrenskomponenten für Mehrgitterverfahren, die mit der Standardvergröberung, d.h. mit fest vorgegebenen groben Gittern, arbeiten, Thema dieser Arbeit. Desweiteren werden in dieser Arbeit Ideen dargelegt, wie die hierarchische Transformation, die zur Herleitung der matrixabhängigen Verfahrenskomponenten für MG-Algorithmen verwendet wird, erweitert werden kann. Mit Hilfe solcher allgemeinerer Transformationen ist es vielleicht mögliche, robustere MG-Verfahren herzuleiten.

Als Modellproblem verwenden wir in der ganzen Arbeit eine Diffusionsgleichung, wie sie bei der Modellierung poröser Medien Verwendung findet.

Dazu werden wir in Kapitel 2 der vorliegenden Arbeit nach einigen kurzen Bemerkungen über die bei der Beschreibung poröser Medien auftretenden Größen, und einer nochmaligen kurzen – jetzt spezifischen – Darstellung der bei deren Simulation auftretenden Probleme, zuerst das Modellproblem einführen, und dann einige der gebräuchlichsten Methoden zur Bestimmung von Grobskalenoperatoren und damit verbunden effektiver Operatoren und effektiver Diffusionskoeffizienten für die Modellgleichung vorstellen. Insbesondere werden wir dabei die Methoden der Renormalisierung und der Homogenisierung näher betrachten.

Kapitel 3 widmet sich den Mehrgitter-Verfahren für elliptische Differentialgleichungen. Zuerst führen wir in notwendige Notationen und Definitionen bezüglich Mehrgitter-Verfahren ein, formulieren die Standardschemata CS und FAS und besprechen kurz die Diskretisierung partieller Differentialgleichungen mit der Methode der finiten Elemente. Dann schildern wir die bei der Anwendung von Standard-Mehrgitterverfahren auf die Modellgleichung auftretenden Schwierigkeiten und deuten – als Vorbereitung auf folgende Abschnitte – Möglichkeiten zu deren Lösung an. Insbesondere werden wir darlegen, wie durch die Betrachtung der kontinuierlichen Differentialgleichung sogenannte operator- beziehungsweise, als ihr diskretes Analogon, sogenannte matrixabhängige Prolongationen gewonnen werden können, die dann von der Lösung des kontinuierlichen Problems beziehungsweise von der Feingittermatrix des diskreten Problems abhängig sind, und das Verhalten der kontinuierlichen Lösung besser beschreiben, als die Standardprolongation dies vermag. Schließlich werden wir, nach einer kurzen Beschreibung Yserentant's hierarchischer Basiswahl bei der Methode der finiten Elemente, in allgemeiner Weise energieabhängige Verfahrenskomponenten für Mehrgitteralgorithmen motivieren. Dies gelingt uns durch eine einfache Block-Gauß-Elimination angewandt auf die Feingittermatrix des diskretisierten Problems. Hauptergebnis dieses Abschnittes ist jedoch die Aufspaltung des zugrundeliegenden Finite-Elementraumes in bezüglich des durch die Feingittermatrix induzierten Skalarproduktes orthogonale Teilräume. Die Einteilung der Gitterpunkte in Punkte, die auch zum nächstgröberen Gitter gehören, beziehungsweise nicht dazugehören, erlaubt es uns, Kriterien für die Wahl jetzt problemabhängiger Prolongationen zu finden, die sich in natürlicher Weise durch die hierarchische Sichtweise ergeben. Wir werden sehen, daß eine matrixababhängige Wahl der Prolongationen auch als näherungsweise Elimination der Feingitterunbekannten aus den Grobgittergleichungen interpretiert werden kann, und daß dies äquivalent ist mit Wahl der Prolongation in den Feingitterpunkten als lokale Inverse der Feingittermatrix. Analog zu Yserentant's hierarchischer Basiswahl lassen sich mit diesem Vorgehen neue, jetzt matrixabhängige Nichtstandard-Finite-Elementbasisfunktionen definieren. Als Grobgitteroperator erhalten wir damit über die Galerkinapproximation das Schurkomplement der Feingittermatrix.

Da jedoch diese Prolongationen und Grobgitteroperatoren in zwei und mehr Dimensionen keine lokalen Operatoren sind, sind sie für konkrete MG-Algorithmen nicht verwendbar. Deswegen werden wir geeignete Näherungen dieser Prolongationen und der zugehörigen Grobgitteroperatoren beschreiben, die dann in MG-Algorithmen Verwendung finden können. Wir werden darstellen, daß sich aus der Literatur bekannte Prolongationen, wie z.B. die in [DEN83] und [ALC81] entwickelten, als einfache Näherungen obiger Prolongation darstellen lassen.

Außerdem werden wir aufzeigen, wie sich die Idee der hierarchischen Transformation verallgemeinern läßt, indem man sich nicht auf eine Transformation der Grobgitterbasisfunktionen beschränkt. Die dadurch erhöhte Zahl von Freiheitsgraden läßt sich vielleicht dazu nutzen, robustere MG-Algorithmen zu definieren.

In Kapitel 4 wenden wir uns der Verknüpfung der in Kapitel 2 und 3 behandelten Themen zu. Dazu deuten wir die Diskretisierung von Differentialgleichungen als Mittelungen, die die Skalen feiner als die jeweilige Gitterweite herausfiltern. Auch die durch die Galerkinapproximation entstandenen Operatoren lassen sich so als Mittelungen des Feingitteroperators bzw. des kontinuierlichen Operators und damit als Näherungsverfahren zur Bestimmung von Grobskalengleichungen interpretieren. Verschiedene Transportoperatoren die in der Galerkinapproximation verwendet werden, ergeben dann unterschiedliche Mittelungsverfahren. Die Galerkinapproximation, die mit matrix- bzw. operatorabhängigen Transportoperatoren arbeitet, approximiert das Verhalten der grobskaligen Lösung des kontinuierlichen jeweils vorgegebenen Problems besser als die Galerkinapproximation, die mit den Standard-Transportabbildungen (wie der bilinearen Interpolation als Prolongation) arbeitet und liefert daher auch die besseren Approximationen der effektiven Operatoren. Andererseits zeigt uns der Zusammenhang zwischen der Galerkinapproximation und den in Kapitel 2 beschriebenen Methoden zur Bestimmung effektiver Operatoren die Möglichkeit auf, mithilfe dieser Verfahren Grobgitteroperatoren für Mehrgitteralgorithmen zu definieren. So werden wir dort mithilfe der Renormalisierung Grobgitteroperatoren für MG-Algorithmen bestimmen, die wir in Kapitel 5 auch auf ihre Verwendbarkeit hin überprüfen.

Dort werden wir schließlich in einer Reihe von numerischen Experimenten das Konvergenzverhalten verschiedener MG-Algorithmen, deren Verfahrenskomponenten in den vorangegangenen Kapiteln entwickelt wurden, untersuchen. Außerdem werden wir numerische Experimente durchführen, um die Güte der Approximation des effektiven Diffusionskoeffizienten durch matrixabhängige Vergröberungsverfahren in MG-Methoden, im Vergleich mit den Methoden der Homogenisierung, der Renormalisierung und einfacher Mittelwertbildungen, anhand einiger Beispiele zu untersuchen. Für alle betrachteten Probleme erweist sich die Galerkinapproximation mit matrix- bzw. operatorabhängigen Transportabbildungen als den einfachen Mittelwertbildungen überlegen, was sich sowohl im Konvergenzverhalten der mit diesen Komponenten gebildeten Mehrgitteralgorithmen, als auch in der Abschätzung der effektiven Operatoren durch die Grobgitteroperatoren zeigt.

2 Modellierung von Strömungen durch poröse Medien

Poröse Medien werden gewöhnlich definiert als ein Festoffskelett, der sogenannten Matrix, und den dazwischenliegenden Hohlräumen, dem Porenraum. Dieser Porenraum kann durch ein oder mehrere ruhende oder fließende Fluide gefüllt sein. Geläufigste Beispiele für poröse Medien sind z.B. das natürliche Bodengefüge, Sand oder verschiedene Arten von Steinen, oder auch künstliche poröse Medien, wie Papier oder Katalysatoren.

Porösen Medien können unterschieden werden durch ihre chemische Zusammensetzung, ihre Struktur und ihre physikalische Beschaffenheit. Wenn es um die Strömung von Fluiden durch poröse Medien geht, so geht es dabei vor allem um zwei Größen:

- Die Porosität Θ, die definiert ist als Verhältnis von Volumen des Porenraumes zum Gesamtvolumen der Probe,
- der Permeabilität D, d, die einen Proportionalitätsfaktor in Darcys Gesetz darstellt, das in Abschnitt 2.1 diskutiert wird. Diese Größe kann als Maß für den Fließwiderstand angesehen werden, den ein Medium einem durchströmenden Fluid entgegenstellt. In den meisten Fällen ist die Permeabilität stark ortsabhängig, und kann in bestimmten Punkten lokal extrem variieren und sogar unstetig, und somit nicht differentierbar sein. Sie ist im allgemeinen eine anisotrope Eigenschaft des Mediums und wird durch einen symmetrischen positiv definiten Tensor dargestellt. In zwei Dimensionen nimmt D folgende Form an:
$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{pmatrix}$$
Für isotrope Medien ist D ein skalare Funktion, die im folgenden mit d bezeichnet wird.

In Anwendungen werden Porosität und Permeabilität durch Proben aus dem zu untersuchenden Gebiet an diskreten Punkten experimentell bestimmt. Die Skala der Messungen ist i.a. um Größenordnungen feiner, als eine zur numerischen Simulation mögliche Auflösung.

2.1 Die Modellgleichung – Darcys Gesetz

Die einfachste Beschreibung von stationären, laminaren, viskosen Fließvorgängen in porösen Medien auf der Makroebene ist durch Darcys Gesetz gegeben, daß dieser 1856 experimentell fand. Sie hat ihre Gültigkeit im Falle nicht zu großer Geschwindigkeiten des strömenden Fluids, und für den Fall, daß keine molekularen, ionischen oder elektrochemischen Effekte auftreten, und hat die folgende Form:

$$\vec{q} = -\frac{D}{\mu}\left(\nabla p - u\vec{g}\right) \tag{1}$$

Hierbei beschreibt p den Druck, u die Dichte des Fluids, $\vec{g}$ die Gravitation, μ die dynamische Viskosität, D den Proportionalitätsfaktor, genannt Permeabilität und q das durchströmende Flüssigkeitsvolumen pro Zeiteinheit und Querschnittsfläche. Obwohl Darcys Gesetz seinen Ursprung in einem Experiment hat, wurden zahlreiche Versuche einer mathematischen Herleitung unternommen [PAL80]. Im Abschnitt 2.3.3 über die Homogenisierung werden wir darauf kurz eingehen und auf eine Möglichkeit der mathematischen Herleitung hinweisen. Wird die Schwerkraft nicht berücksichtigt, nimmt Darcys Gesetz folgende Form an:

$$\vec{q} = -\frac{D}{\mu}\nabla p \tag{2}$$

Nimmt man an, daß die Porosität Θ zeitunabhängig ist, so lautet das Gesetz der Massenerhaltung

$$\Theta\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla\left(u\vec{q}\right) = f, \tag{3}$$

wobei f eine Quelle oder Senke beschreibt.
Zusammen mit der Annahme, daß das Fluid leicht kompressibel ist, also $u = u_0 e^{cp}$ (mit einer Konstanten c) und damit $\nabla u = cu\nabla p$ gilt, folgt aus Gleichung 2 zusammen mit Gleichung 3

$$\Theta\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla\left(\frac{D}{c\mu}\nabla u\right) = f. \tag{4}$$

Fassen wir $\frac{D}{c\mu}$ wieder zu D zusammen, so erhalten wir

$$\Theta\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla\left(D\nabla u\right) = f. \tag{5}$$

bzw. im stationären Fall, d.h. für $\partial u/\partial t = 0$

$$-\nabla\left(D\nabla u\right) = f. \tag{6}$$

Diffusionsgleichungen der Art von Gleichung 6 treten auch bei der Beschreibung des Wärmetransports, in der Elekrodynamik und bei der Beschreibung von Phänomenen des Magnetismus auf. u wäre dabei die Temperatur, das elekrische bzw. das magnetische Feld, D die Leitfähigkeit, die dielekrische Konstante bzw. die magnetische Permeabilität, respektive, und f eine vorgegebene Quelle oder Senke. Deswegen wird D im folgenden auch als Diffusionskoeffizient oder Materialfunktion bezeichnet.

Gleichung 6 soll uns durch die ganze Arbeit hindurch als Modellgleichung dienen. Zur Referenz wollen wir deswegen das Modellproblem, auf das im folgenden des öfteren Bezug genommen werden wird, notieren:

Sei Ω ein beschränktes Gebiet in $\mathrm{R}^{n\times n}$ mit Rand $\partial\Omega$. Sei $D : \Omega \to \mathrm{R}^{n\times n}$ mit $D := \{d_{ij}\}_{i,j=1}^{n,n}$, eine beschränkte, symmetrische und elliptische Funktion, d.h.

$$\begin{aligned} \exists\alpha \in \mathrm{R}^{+} : d_{ij}(x)\xi_i\xi_j &\geq \alpha\xi_i\xi_j \forall x \in \Omega, \xi = (\xi_i) \in \mathrm{R}^{\mathrm{n}} &(7)\\ d_{ij} &= d_{ji}, (1 \leq i,j \leq n) &(8)\end{aligned}$$

und sei $f \in L^2(\Omega)$.
Dann lautet das Modellproblem wie folgt:

Finde $u \in H_0^1(\Omega)$ mit

$$\begin{aligned} -\nabla(D\nabla u) &= f \text{ in } \Omega, \\ u &= 0 \text{ auf } \partial\Omega. \end{aligned} \tag{9}$$

2.2 Größenskalen bei der Beschreibung poröser Medien und numerische Probleme bei der Simulation

In der Simulation von Strömungsverhältnissen in z.B. Erdöllagerstätten oder Wasserreservoirs sind, wie bereits erwähnt, die durch Messungen ermittelten materialabhängigen Größen Permeabilität und Porosität auf einer feinen Größenskala gegeben – gewöhnlich einige Größenordnungen feiner, als eine bei der numerischen

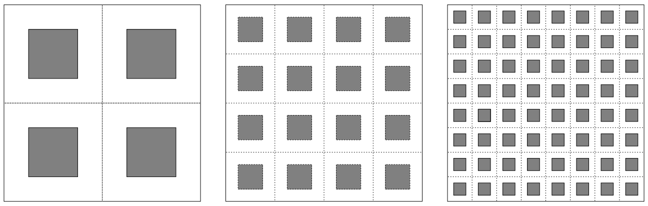

Abbildung 2: Ein einfaches Modell eines porösen Mediums zur Erläuterung der bei der Simulation auftretenden Schwierigkeiten.

Simulation aus Speicher- und Rechenzeitgründen mögliche Auflösung. Dort stellt sich also das Problem, daß die auf einer feinen Skala gegebenen Größen auf irgend eine Art gemittelt werden müssen, um den einzelnen Gitterzellen des bei der Simulation verwendeten Gitters sogenannte effektive Werte zuweisen zu können, die die Strömungsverhältnisse in der jeweiligen Gitterzelle beschreiben.

Betrachten wir dazu folgendes einfache Beispiel: Auf einem Gebiet Ω sei das Muster des Permeabilitätskoeffizienten D, wie in Abbildung 2 links zu sehen, gegeben. Dabei deuten die verschiedenen Schattierungen verschiedene Werte für den Diffusionskoeffizienten an. Läßt man nun die Anzahl der Zellen so wie in Abbildung 2 zu sehen langsam zunehmen, so gelangt man bald an die Grenzen jeder numerischen Simulierbarkeit, da das zur Diskretisierung des Problems verwendete Gitter fein genug sein muß, um alle Inhomogenitäten des Diffusionskoeffizienten aufzulösen.

An dieser Stelle setzt die Idee der sogennanten effektiven Größen bzw. effektiven Operatoren ein. Ist nicht eine bis in jedes Detail gehende Lösung des Problems gesucht, sondern ist man nur an einer grobskaligen Lösung interessiert, dann liegt es nahe, nach einer Differentialgleichung der Form

$$-\nabla D^{eff} \nabla u = f$$

zu suchen, mit einer ortsunabhängigen Diffusionsmatrix D^{eff}, die direkt die grobskalige Lösung des Problems 9 beschreibt. Problematisch hierbei ist jedoch die Abschätzung bzw. Bestimmung von D^{eff}, für die, wie wir sehen werden, einfache Mittelwertbildungen i.a. nicht geeignet sind.

Die Modellgleichung 9 mit einem sehr schnell schwankenden Diffusionskoeffizienten stellt uns damit zusammenfassend vor folgendes Problem: Weder können wir das zur numerischen Simulation verwendete Gitter fein genug machen, um alle Details des Diffusionskoeffizienten aufzulösen, noch ist es möglich, einfach auf feinskalige Information zu verzichten, da die dann berechnete Lösung i.a. nichts mit der wirklichen Lösung des Problems zu tun hat. Vielmehr muß die vorhandene feinskalige Information in geeigneter Weise gemittelt werden. Deswegen sucht man nach einer Differentialgleichung, die direkt das grobskalige Verhalten der Lösung von 9 beschreibt, und die dann numerisch gelöst werden kann. Genau dies versuchen die im folgenden beschriebenen Methoden.

2.3 Methoden der Näherung des effektiven Diffusionskoeffizienten

In diesem Abschnitt werden wir – in so kurzer Form wie möglich – einige Methoden zur Bestimmung von Grobskalengleichungen, die in der Literatur über poröse Medien zu finden sind, beschreiben.

2.3.1 Methoden der Mittelung des Diffusionskoeffizienten

Die ältesten Methoden zur Bestimmung der effektiven Permeabilität eines Gebietes $U \subset \Omega$ beruhen auf einfachen Mittelwertbildungen. D wird dabei ersetzt durch z.B.

$$\begin{aligned} D_{arith} &= \tfrac{1}{|U|} \int_U D(x)dx \qquad (arithmetisches Mittel), \\ \text{oder für } D(x) \neq 0 \forall x \in U & \\ D_{harm} &= |U| \left(\int_U \tfrac{1}{D(x)} dx \right)^{-1} \qquad (harmonisches Mittel) \end{aligned} \tag{10}$$

$U \subset \Omega$, bzw. ihren diskreten Analoga. Hierbei besteht die Möglichkeit, globale oder lokale Mittelungen durchzuführen, insbesondere, wenn Gebiete mit etwa gleichem Diffusionskoeffizienten vorliegen.

Falls D diskret gegeben ist auf einem gleichmäßigen Gitter durch $\{D_{i,j}\}_{i,j=0}^{n,m}$, so läßt sich auch das geometrische Mittel, def. durch

$$D_{geom} = \left(\prod_{i,j=0}^{n,m} D_{i,j} \right)^{1/nm} \qquad (geom. Mittel) \tag{11}$$

verwenden. Diese einfachen Abschätzungen sind jedoch i.a. – insbesondere bei großen Schwankungen des Diffusionskoeffizienten – nicht geeignet. So bleiben z.B. Diagonalmatrizen für die Diffusion

$$D = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 \\ 0 & d_{22} \end{pmatrix}$$

bei diesen einfachen Mittelwertbildungen diagonal. Dies ist jedoch für z.B. die in Abb. 7 zu sehende Konstellation, in der Schichten mit verschiedenen Diffusionskoeffizienten schräg aufeinandergeschichtet sind, nicht adäquat, da dort durch diese Schrägschichtungen Querableitungen in die Differentialgleichung induziert werden, und D^{eff} folglich Außerdiagonalelemente enthält.

In [WAR60] wurde durch numerische Simulationen gezeigt, daß für eine zufällige, isotrope Verteilung des Diffusionskoeffizienten vom geometrischen, harmonischen und arithmetischen Mittel das geometrische Mittel gewöhnlich die beste Abschätzung liefert. So findet in der Petroleumindustrie nach wie vor das geometrische Mittel als Standardabschätzung für den effektiven Diffusionskoeffizienten Verwendung. Jedoch ist dies für viele Verteilungen keine gute Abschätzung. Z.B. falls an einer Stelle $D(x) = 0$ gilt, aber $D \neq 0$ sonst, so folgt $D_{geom} = 0$, obwohl, abgesehen vom eindimensionalen Fall, $D_{eff} \neq 0$ gilt. Um dieses Problem zu beheben, wurden verschiedene Methoden verwendet, z.B. die aus der Physik bekannte Störungsrechnung und die effektive medium theory (siehe [LAN60] bzw. [KIR73]). In der Störungsrechnung wird D geschrieben als Mittelwert $\bar{D}$ plus eine kleine Störung δD, mit verschwindendem Mittelwert, also $\bar{\delta} D = 0$. δD verursacht eine Störung δP im mittleren Druckfeld $\bar{P}$, für die ebenfalls $\bar{\delta} P = 0$ gelten soll. Einsetzen in die untersuchte Differentialgleichung ergibt dann einen Ausdruck für die effektive Permeabilität. All diesen Ansätzen ist jedoch gemein, daß sie versagen, falls die Schwankungen im Diffusionskoeffizienten zu groß werden.

Deswegen wurde in [KIN89] die sogenannte Methode der Renormalisierung weiterentwickelt.

2.3.2 Renormalisierung

Betrachten wir ein Medium mit diagonaler Diffusionsmatrix

$$D = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 \\ 0 & d_{22} \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Die Idee der Renormalisierung ist, den effektiven Permeabilitätskoeffizienten zuerst lokal analog zu einem elektrischen Netzwerk (mit dem Kehrwert des Diffusionskoeffizienten als Widerstand) zu berechnen. Dadurch wird die Varianz des Diffusionskoeffizienten verringert, und einfache Methoden, wie die oben erwähnte Störungsrechnung geben dann, angewandt auf die neue Verteilung, bessere Ergebnisse. Alternativ dazu kann die Methode der Renormalisierung so lange wiederholt werden, bis sich ein einziger Wert als Abschätzung für den effektiven Diffusionskoeffizienten ergibt.

Dabei wird folgendermaßen vorgegangen: Das betrachtete Gebiet Ω wird in Blöcke von je vier Zellen zerlegt. Den vier Diffusionswerten in den Zellen wird ein einziger Wert, als Näherung für den effektiven Diffusionskoeffizienten zugewiesen, wie in Abbildung 3 zu sehen.

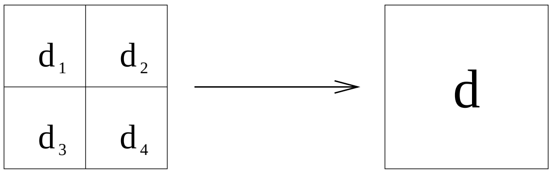

Abb. 3: Zur Renormalisierung: Dem 2×2 Werten d^1 bis d^4 des Diffusionskoeffizienten wird ein einziger Wert für die Diffusion des gesamten Blocks zugewiesen

Dabei wird zuerst jeder Zelle ein Netzwerk zugeordnet, wie es in Abbildung 4 zu sehen ist. Untersuchen wir dann z.B. die Diffusion in x-Richtung (wobei wir der Einfachheit halber für den Moment annehmen, daß der Diffusionskoeffizient eine skalare Funktion ist, also $d_{11} = d_{22}$ gilt), so wird dem 2×2-Block aus Abbildung 3 ein Netzwerk zugeordnet – wie in Abbildung 5 zu sehen –, und der Mittelwert der Diffusion wie in der Netzwerktheorie analog zu einem Netzwerk mit elektrischen Widerständen berechnet. So wird also zur Berechnung des renormalisierten Diffusionskoeffizienten in x-Richtung das arithmetische Mittel in y-Richtung und das harmonische Mittel in x-Richtung verwendet. Analoges gilt für nicht skalare Koeffizientenfunktionen. Dann wird jeder Zelle ein Netzwerk wie in Abbildung 4 zu sehen ist, zugeordnet. Dieses Vorgehen ließe sich natürlich auch mit größeren als 2×2 Blöcken durchführen.

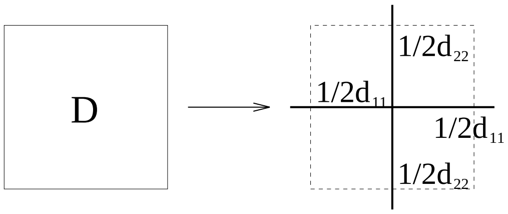

Abb. 4: Zelle zu Netzwerk

Hierbei wird als Randbedingung angenommen, daß, wenn in x-Richtung gemittelt wird, der Fluß an den horizontalen Seiten (C und E, siehe Abb. 5) Null ist, und der Druck an den jeweils zwei Zellen der vertikalen Seiten (a_1 und a_3 bzw. a_2 und a_4) gleich ist.

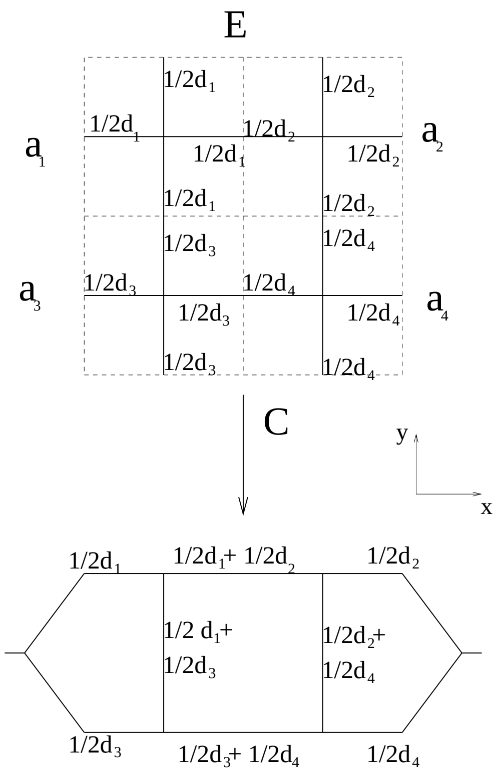

Abbildung 5: Zur Bestimmung der effektiven Diffusion in x-Richtung

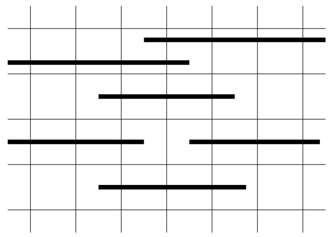

Abbildung 6: Zum Versagen der Renormalisierung: Die dunklen horizontalen Linien bezeichnen undurchlässige Gebiete, d.h. Gebiete mit $D \equiv 0$

Dabei ergeben sich jedoch einige Probleme:

- Dieses Vorgehen kann in ungünstigen Fällen völlig versagen. In Abb. 6 ist eine solche Situation abgebildet. Bei einer solchen Anordnung von undurchlässigen Schichten und einer ungünstigen Anordnung des Gitters, ergibt die Renormalisierung in y-Richtung ein Näherung für den effektiven Diffusionskoeffizienten gleich Null, obwohl das Medium offensichtlich auch in y-Richtung durchlässig ist.
- Es können nur Diagonalmatrizen für D verwendet werden, die außerdem wieder in Diagonalmatrizen übergehen. D.h. Verteilungen des Diffusionskoeffizienten wie in Abb. 7 werden von der Renormalisierung falsch behandelt, da Außerdiagonalelemente bei der Mittelung entstehen müßten!
- Die Annahmen bezüglich der Druckverhältnisse an den Rändern der Zellen sind nicht gerechtfertigt. Ebensolches gilt auch für die Annahmen bzgl. des Flußes am Rande der jeweiligen 2×2-Blöcke.

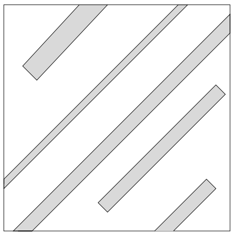

Abbildung 7: Struktur des Diffusionskoeffizienten bei einem Medium mit Querschichtung

Abbildung 8 bzw. 9 zeigt den Effekt wiederholter Renormalisierung angewandt auf ein Diffusionsproblem mit zufallsverteiltem Diffusionskoeffizienten bzw. auf ein Problem mit quergeschichtetem Diffusionskoeffizienten.

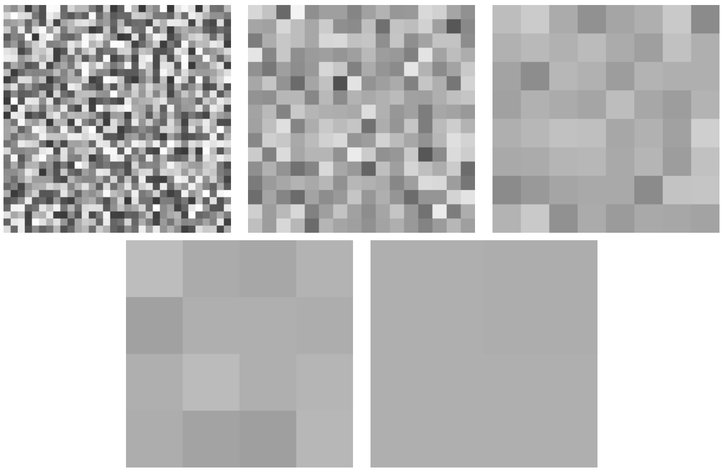

Abbildung 8: Der Effekt wiederholter Renormalisierung angewandt auf ein Diffusionsproblem

2.3.3 Homogenisierung

Die Methode der Homogenisierung stellt einen rigorosen mathematischen Zugang zum Problem der Bestimmung effektiver Operatoren dar. Ihre Hauptanwendung findet sie im Bereich der porösen Medien insbesondere bei der Modellierung sogenannter „fissured media“, bei denen es sich um nicht-homogene poröse Medien mit zusätzlichen Riß-Strukturen handelt, bei denen meist zwei verschiedene Grade von Porositäten und Permeabilitäten lokal variierend auftreten. Prinzipiell kann man es sich als eine Struktur poröser Blöcke vorstellen, die durch ein System von Kanälen mit großer Permeabilität und damit starker Diffusion getrennt sind. Das relative Volumen der Kanäle ist im Vergleich zu dem der porösen, permeablen Blöcke vernachlässigbar klein, jedoch erfolgt der größte Teil des Fluidtransportes durch die Kanäle. Siehe [ARB89][ARB90][HOR90][PES92][SHW91]. Für allgemeinere und ausführlichere Beschreibungen der Homogenisierung siehe [BEN87][PAL80][BAB76].

Bei der Homogenisierung geht man von einer periodischen Struktur (mit dem Parameter ϵ als charakteristischer Länge der Periode) des untersuchten Gebietes $\Omega \subset \mathrm{R}^n$ aus. Ω setzt sich zusammen aus Translationen von ϵY, wobei $Y := \{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i z_i :$

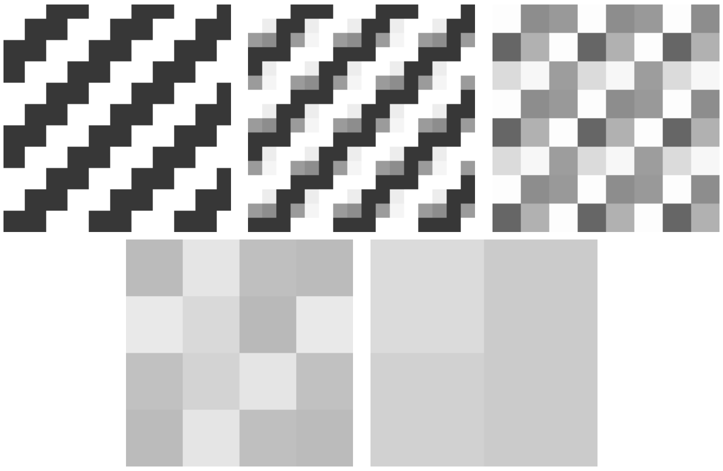

Abbildung 9: Wiederholte Renormalisierung in x-Richtung angewandt auf ein Problem mit geschichtetem Diffusionskoeffizienten

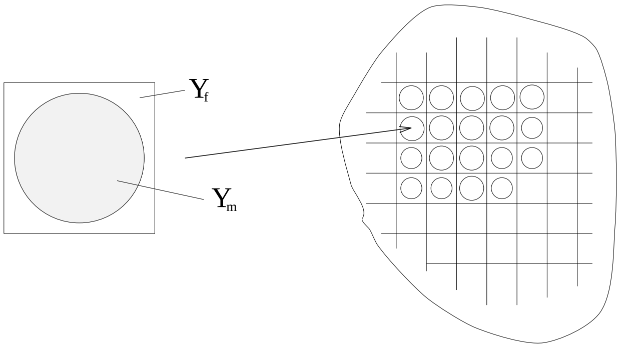

Abbildung 10: Periodische Struktur des Diffusionkoeffizienten bei der Homogenisierung

$0 \leq \lambda_i \leq 1\}$ ein Parallelepiped mit der Fläche $|Y| = 1$ ist. Durch eine offene Teilmenge Y_m von Y wird ein repräsentatives Korn (Matrixblock) und durch $Y_f := Y \setminus \bar{Y}_m, \Gamma := \partial Y_m$ das repräsentative Porenvolumen und die repräsentative Matrixoberfläche definiert. (Wir verwenden an dieser Stelle die Bezeichnungen Pore bzw. Matrix aus dem Kontext der porösen Medien. I.a. sollen diese Begriffe stellvertretend für zwei Bereiche mit unterschiedlichem Diffusionskoeffizienten stehen.) Bezeichnet für $X \subset Y \quad X^k := X + \sum_i k_i z_i, k \in \mathrm{Z}^n$ die verschobene Menge, dann haben wir für $\epsilon > 0$

$$\Omega_f^\epsilon := \Omega \cap \{\epsilon Y_f^k : \epsilon Y_f^k \subset \Omega, k \in \mathrm{Z}^n\} \tag{13}$$

$$\Omega_m^\epsilon := \Omega \cap \{\epsilon Y_m^k : \epsilon Y_m^k \subset \Omega, k \in \mathrm{Z}^n\} = \Omega \setminus \bar{\Omega}_f^\epsilon \tag{14}$$

$$\Gamma^\epsilon := \{\epsilon \Gamma^k : \epsilon \Gamma^k \subset \Omega, k \in \mathrm{Z}^n\}, \tag{15}$$

mit Ω_f^ϵ dem Porenraum, Ω_m^ϵ der Menge der Matrixblöcke und Γ^ϵ der Matrixoberfläche. Auf dieser ϵ-parametrisierten Geometrie werden die das Problem beschreibenden Gleichungen formuliert und dann einem Grenzwertprozeß $\epsilon \searrow 0$ unterworfen.

Ist also u_ϵ eine Größe, die einen Prozeß auf zwei verschiedenen Größenskalen (einer makroskopischen, beschrieben durch die Variable x, und einer mikroskopischen, beschrieben durch y) beschreibt, so bedeutet homogenisieren, diejenige Gleichung zu finden, die u_ϵ erfüllt für $\epsilon \searrow 0$, und damit u_0, den Grenzwert von u_ϵ zu bestimmen.

Die klassische Vorgehensweise, die wir im folgenden (in Anlehnung an [PAL80]) kurz skizzieren werden, besteht aus zwei Schritten: In einem ersten Schritt wird rein formal (Existenz und Konvergenz sind offen) die Existenz einer Lösung des gegebenen Problems in der Form einer asymptotischen Entwicklung, abhängig von zwei verschiedenen Größenskalen postuliert. Also:

$$u_\epsilon(x) = u_0(x) + \epsilon u_1(x,y) + \epsilon^2 u_3(x,y) + \dots,\ y = \frac{x}{\epsilon} \tag{16}$$

D.h., wir nehmen an, daß es Funktionen $u_0(x,y), u_1(x,y), u_2(x,y), \dots$ gibt, die definiert sind für $x \in \Omega, y \in \mathrm{R}^n$, unabhängig von ϵ, Y-periodisch in der Variable y, so daß für $y = x/\epsilon$ die rechte Seite von 16 eine asymptotische Entwicklung von $u_\epsilon(x)$ (wie auch dessen Ableitungen) ist.

Einsetzen von 16 in das vorgegebene Problem ergibt durch Koeffizientenvergleich in ϵ eine Sequenz von Problemen, die $u_0, u_1, \dots$ bestimmen.

Der zweite Schritt besteht darin, die Konvergenz des im ersten Schritt ausgeführten Homogenisierungsprozesses zu beweisen, d.h. eine Topologie zu finden, in der gilt $\lim_{\epsilon\to 0} u_\epsilon = u_0$. Dies rechtfertigt im nachhinein die im ersten Schritt ausgeführten formalen Rechnungen.

Um die Verfahrensweise klarer zu machen, werden wir für das Modellproblem die Methode explizit darstellen.

Man betrachte das Modellproblem mit differentierbarem, symmetrischem und Y-periodischem Diffusionskoeffizienten D. Die Funktion D^ϵ sei definiert durch $D^\epsilon(x) = D(x/\epsilon)$, mit $\epsilon > 0$. Man beachte, daß die Funktion D^ϵ ϵY-periodisch in x ist. Dann betrachten wir das folgende Randwertproblem, analog zu unserem Modellproblem:

$$-\nabla(D^\epsilon(x)\nabla u_\epsilon) = f(x) \text{ in } \Omega, \tag{17}$$

$$u_\epsilon = 0 \text{ auf } \partial\Omega. \tag{18}$$

Im folgenden wird die Summenkonvention verwendet und folgende Schreibweise benutzt:

$$\frac{d}{dx_i} := \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\epsilon}\frac{\partial}{\partial y_i}, \tag{19}$$

da die Notation

$$z = x, y = x/\epsilon$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial z_i} + \frac{1}{\epsilon}\frac{\partial}{\partial y_i}$$

etwas mühsam ist.

Annahme: u_ϵ habe für $\epsilon \to 0$ eine asymptotische Entwickung der Form 16 in ϵ. Ebenso postulieren wir die Existenz asymptotischer Entwicklungen von $p_i^\epsilon := D_{ij}\frac{du^\epsilon}{dx_i}$ $(1 \leq i \leq n)$:

$$p_i^\epsilon(x) = p_i^0(x,y) + \epsilon p_i^1(x,y) + \epsilon^2 \dots \tag{20}$$

19 angewandt auf 16 ergibt

$$\frac{du^\epsilon}{dx_j} = \left(\frac{\partial u_0}{\partial x_j} + \frac{\partial u_1}{\partial y_j}\right) + \epsilon\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_j} + \frac{\partial u_2}{\partial y_j}\right) + \epsilon^2 \dots (1 \leq j \leq n) \tag{21}$$

Mit der Definition von p_i^ϵ haben wir damit

$$p_i^0 = D_{ij}(\frac{\partial u_0}{\partial x_j} + \frac{\partial u_1}{\partial y_j}) \tag{22}$$

$$p_i^1 = D_{ij}(\frac{\partial u_1}{\partial x_j} + \frac{\partial u_2}{\partial y_j}), \tag{23}$$

$$\vdots \tag{24}$$

20 eingesetzt in 17 und Koeffizientenvergleich in ϵ ergibt dann

$$\epsilon^{-1} : \quad \frac{\partial p_i^0}{\partial y_i} = 0 \tag{25}$$

$$\epsilon^0 : \quad -\frac{\partial p_i^0}{\partial x_i} - \frac{\partial p_i^1}{\partial y_i} = f \tag{26}$$

$$\vdots$$

Sei der Mittelungsoperator $\bar{\ }$ über Y für $\Phi \in L^1(Y)$ definiert durch

$$\bar{\Phi} := \frac{1}{|Y|}\int_Y \Phi(y)dy. \tag{27}$$

Anwenden auf beide Seiten von 26 ergibt

$$-\overline{\frac{\partial p_i^0}{\partial x_i}} - \overline{\frac{\partial p_i^1}{\partial y_i}} = \bar{f}, \tag{28}$$

und durch Anwendung des Divergenztheorems erhält man ($\vec{n}$ sei die äußere Einheitsnormale auf ∂Y)

$$\overline{\frac{\partial p_i^1}{\partial y_i}(x,y)} = \frac{1}{|Y|}\int_Y \frac{\partial p_i^1}{\partial y_i}dy = \frac{1}{|Y|}\int_{\partial Y} \vec{n} p_i^1(x,y)dS = 0, \tag{29}$$

wobei die letzte Gleichung gilt, weil p_i^1 Y-periodisch ist. Da f von y unabhängig ist, also $\bar{f} = f$ gilt, ergibt sich insgesamt

$$-\overline{\frac{\partial p_i^0}{\partial x_i}}(x) = f(x). \tag{30}$$

30 ist eine makroskopische Gleichung, da sie nur von der makroskopischen Größe x abhängt.

Formt man 25 mithilfe von 22 um in

$$-\frac{\partial}{\partial y_i}(D_{ij}(y)\frac{\partial u_1(x,y)}{\partial y_j}) = \frac{\partial u_0(x)}{\partial x_j}\frac{\partial D_{ij}(y)}{\partial x_i}, \tag{31}$$

so folgt daß u_1 Y-periodisch und eindeutig bis auf eine von y unabhängige Konstante C bestimmt ist (siehe z.B. [PAL80]).

Ist w^k die Y-periodische Lösung des lokalen Problems

$$-\nabla_y(D(y)\nabla_y w^k(y)) = \nabla_y(D(y)\vec{e}_k) \quad \text{auf} \quad Y, \tag{32}$$

$$\int_Y w^k dy = 0, \tag{33}$$

wobei $\vec{e}_k$ den j-ten Einheitsvektor bezeichnet und ∇_y Divergenz bzw. Gradient bezüglich der Variable y meint, so gilt aufgrund der Linearität von 31

$$u_1(x,y) = \frac{\partial u_0}{\partial x_k}w^k(y) + C(x). \tag{34}$$

Dies eingesetzt in 22 ergibt

$$\overline{p}_i^0(x,y) = \overline{(D_{ik}(y) + D_{ij}(y)\frac{\partial w^k}{\partial y_j})\frac{\partial u_0(x)}{\partial x_k}} \tag{35}$$

und aus 30 folgt dann die homogenisierte Differentialgleichung

$$\begin{aligned} -\nabla(D^{hom}\nabla u_0) &= f, & (36)\\ \text{mit} \quad D_{ik}^{hom} &= \overline{(D_{ik}(y) + D_{ij}(y)\frac{\partial w^k(y)}{\partial y_j})}, & (37)\\ u_0 &= 0 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega & (38)\end{aligned}$$

bzw. in etwas übersichtlicherer Schreibweise

$$D^{hom} = \int_Y D(x)(I + W(x))dx \tag{39}$$

wobei I die Einheitsmatrix bezeichne und gelte

$$W = (\nabla_y w^1, \nabla_y w^2, \ldots, \nabla_y w^n). \tag{40}$$

D.h. der homogenisierte Diffusionskoeffizient D^{hom} besteht aus dem arithmetischen Mittelwert von D über dem Gebiet Ω und einer Korrektur $\overline{D_{ij}(y)\frac{\partial w^k}{\partial y_j}}$, die aus der Lösung eines lokalen Problems (32) entsteht.

Aus der variationellen Formulierung von 32 erhalten wir, indem wir als Testfunktion $w^i + y_i$ wählen, die Darstellung

$$D_{ij}^{hom} = \frac{1}{|Y|} a_Y(w^j + y_j, w^i + y_i), \tag{41}$$

mit

$$a_Y(u,v) = \int_Y \nabla v^t(y) D^\epsilon(y) \nabla u(y) dy. \tag{42}$$

Aus der Formulierung 41 folgt sofort die Symmetrie von D^{hom}. Weiterhin gilt: Der homogenisierte Diffusionskoeffizient genügt der gleichen Elliptizitätsbedingung wie D^ϵ. Für einen Beweis siehe [BEN87].

Zum Beweis der noch offenen Konvergenz von u_ϵ gegen u_0 siehe z.B. [TAR].

Ist D unstetig, bzw. nicht differentierbar, so müssen die Gleichungen im distributionellen Sinne gelesen werden. Durch Umwandlung in die variationellen Formulierungen ergibt sich, daß das Endergebnis 37 bzw. 41 auch für diesen Fall gilt.

In [NGU89] wird in allgemeinerer Form die Existenz asymptotischer Entwicklungen der Art 16 für u_ϵ bewiesen. Genauer gesagt wird unter der Voraussetzung $u_\epsilon \in L^2(\Omega) = H^0(\Omega)$ beschränkt bzgl. der L^2-Norm, die Existenz von u_0 bewiesen. Ebenso folgt aus $u_\epsilon \in H^1(\Omega)$ beschränkt bzgl. der H^1-Norm die Existenz von u_1, usw.

Darüberhinaus wird eine mathematische Version obigen klassischen Vorgehens vorgestellt, die vielleicht bei der Untersuchung sog. singulärer Homogenisierungsprobleme nützlich ist. Dabei handelt es sich um Probleme, bei denen u_ϵ eine asymptotische Entwicklung der Form 16 besitzt, mit u_0 abhängig von y. Ein solches Problem ergibt sich z.B. bei der Homogenisierung der auf der Mikroebene in einem porösen Medium, bestehend aus undurchlässigen Körnern und Kanälen, formulierten Stokes-Gleichungen. Dabei ergibt sich als homogenisierte Gleichung die Darcy-Gleichung

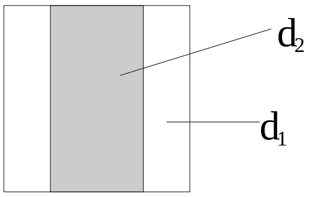

Abbildung 11: Struktur einer Periode des Diffusionskoeffizienten bei Beispiel 2

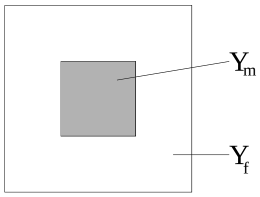

Abbildung 12: Struktur einer Periode des Diffusionskoeffizienten bei Beispiel 3

[BEN87],[PAL80] Dies ist außerdem ein Beispiel dafür, daß die homogenisierte Gleichung nicht von der gleichen Gestalt wie die ursprüngliche Gleichung sein muß.

Hier einige Beispiele für die Homogenisierung der Gleichung 17 mit verschiedenen Diffusionskoeffizienten, die wir später noch brauchen werden:

1. Im eindimensionalen Fall auf dem Gebiet $\Omega = (a, b)$ reduziert sich das lokale Problem 32 zur Bestimmung von w auf

$$-\frac{\partial}{\partial y}(d(y)\frac{\partial w(y)}{\partial y}) = \frac{\partial d(y)}{\partial y}. \tag{43}$$

Damit erhalten wir

$$w(y) = -y + (b-a)\left(\int_a^b \frac{1}{d(y)}dy\right)^{-1}\int_a^y \frac{1}{d(s)}ds + K, \tag{44}$$

mit einer durch die Normierungs- und die Randbedingung festgelegten Konstanten K. Einsetzen in 37 ergibt

$$D^{hom} = \int_a^b d(y)(1 + \frac{\partial w(y)}{\partial y})dy = (b-a)\left(\int_a^b \frac{1}{d(y)}dy\right)^{-1},$$

also das harmonische Mittel von D als homogenisierten Diffusionskoeffizienten. Entsprechendes gilt natürlich auch für einen nicht differenzierbaren oder sogar unstetigen Diffusionkoeffizienten.

2. Betrachten wir ein Medium mit längsgeschichtetem Diffusionskoeffizienten, wie es in Abb. 11 zu sehen ist.

$$\begin{array}{lll} D(x) = d_1 > 0 & \text{für} & -\frac{1}{2} < x_1 < -\frac{1}{4} \; \& \; \frac{1}{4} < x_1 < \frac{1}{2} \\ D(x) = d_2 > 0 & \text{für} & |x_1| \leq \frac{1}{4} \end{array}$$

d.h. D ist unabhängig von x_2. Es ergibt sich

$$D_{11}^{hom} = \frac{2d_1d_2}{d_1+d_2}, \tag{45}$$

$$D_{21}^{hom} = \tilde{D}_{12}^{hom} = 0, \tag{46}$$

$$D_{22}^{hom} = \frac{1}{2}(d_1+d_2). \tag{47}$$

D.h. in x-Richtung erhält man für den homogenisierten Diffusionskoeffizienten das harmonische Mittel von d_1 und d_2, und in y-Richtung das arithmetische Mittel, wie man es auch mit der Renormalisierung erhält (vgl. Abschnitt 2.3.2).

3. Betrachte das in Abb. 12 zu sehende Gebiet mit

$$D_{ij} = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{in} \quad Y_m \\ \alpha\delta_{ij} & \text{in} \quad Y_f, \alpha > 0 \end{cases}$$

Dann ergibt sich für den homogenisierten Diffusionskoeffizienten

$$D^{hom} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix},$$

mit $\gamma = \gamma(\alpha)$. Als homogenisierter Operator ergibt sich also $-\gamma\triangle$.

Zum letzten Beispiel, wie auch zu einem Problem mit einem quergeschichteten Diffusionskoeffizienten wie er in Abbildung 7 zu sehen ist, werden wir nähere Betrachtungen noch in Kapitel 5 durchführen.

Man beachte, daß die Homogenisierung das einzige der vorgestellten Verfahren ist, daß direkt auch für eine volle (also nicht diagonale) Diffusionsmatrix verwendet werden kann.

Darüberhinaus gilt, daß im Gegensatz zu den in Abschnitt 2.3.1 angeführten einfachen Abschätzungen, und auch im Gegensatz zur Renormalisierung, Außerdiagonalelemente in D^{hom} entstehen können, selbst wenn D eine Diagonalmatrix ist. D.h. es kann eine Differentialgleichung mit Querableitungen entstehen, z.B. im Falle eines Diffusionskoeffizienten wie er in Abbildung 7 zu sehen ist. Andererseits verwendet die Homogenisierung die Annahme einer periodischen Struktur des betrachteten Mediums, was eine sehr starke Einschränkung der Anwendbarkeit darstellt. Darüberhinaus benötigt die Homogenisierung analytische Berechnungen, insbesondere zum Lösen des lokalen Problems 32.

3 Zur Verwendung von Mehrgitterverfahren bei der numerischen Lösung elliptischer partieller Differentialgleichungen

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns u.a. mit der Wahl geeigneter Verfahrenskomponenten für Mehrgitter-Algorithmen, die mit fest vorgegebenen standardvergröberten Gittern arbeiten. Grundlage der hier beschriebenen Methoden ist die Aufspaltung der zugrundeliegenden Gitter in Gitterpunkte, die ebenfalls zum nächstgröberen Gitter gehören oder eben nicht dazugehören. Die dadurch entstehende Partitionierung der Steifigkeitsmatrizen, zusammen mit einer hierarchischen Wahl des zugrundeliegenden finite Elementraumes führt auf eine a-orthogonale Aufspaltung der finite Elementräume und zu matrix- bzw. operatorabhängigen Verfahrenskomponeneten, wie sie z.B. in [ALC81] [DEN82] [DEN83] [FUH93] [FUH94] [REU93a] [REU93b] beschrieben werden. Multilevelartige Verfahren, die explizit auf eine solche Partitionierung der Feingittermatrix zurückgreifen, finden sich auch in [AXE89] [AXE90] [AXE91] [FUH93] [FUH94] [PLO93].

Darüberhinaus werden wir in diesem Kapitel allgemeinere Transformationen der Steifigkeitsmatrix (als die Transformation in die hierarchische Basis) betrachten. MG-Algorithmen, wie die in [REU94] vorgestellten, lassen sich dann als Spezialfälle dieser so entstehenden Verfahren darstellen, und es besteht die Hoffnung, daß auf diesem Wege robustere MG-Algorithmen entwickelt werden können.

Betrachtet man klassische Iterationsverfahren, wie etwa das Gauß-Seidel- oder das Jacobi-Verfahren, so zeigt sich, daß die Konvergenzgeschwindigkeit, nach anfänglich (in den ersten Schritten) sehr schneller Konvergenz, stark nachläßt. Untersucht man das verwendete Iterationsverfahren mit Hilfe der Methode der Fourier-Analyse, so stellt man fest, daß die hochfrequenten Anteile des Iterationsfehlers, also diejenigen Anteile mit Fehlerfrequenzen mit Wellenlängen in der Größenordnung der Maschenweite des verwendeten Gitters, stark reduziert, also gut geglättet werden. Längerwellige Anteile des Fehlers (niederfrequente Anteile) werden jedoch nur schwach gedämpft, dominieren also nach wenigen Iterationsschritten die Konvergenzgeschwindigkeit, und führen damit zur Verlangsamung der Konvergenz. Damit wird die Konvergenzrate abhängig von der Maschenweite des Gitters.

In Mehrgitterverfahren wird nun nach einigen Iterationsschritten das Residuum, das sich ja, da es vor allem nur noch niederfrequente Anteile enthält, auch auf einem gröberen Gitter gut darstellen läßt, auf das nächstgröbere Gitter transportiert. Dort wird das Problem mit dem Residuum als rechter Seite gelöst. Mit der damit gewonnenen Näherung der Fehlerfunktion wird dann die Lösungsapproximation auf dem feinen Gitter verbessert. Dieses Verfahren läßt sich natürlich rekursiv auf weitere gröbere Gitter fortsetzen. So wird, um eine Näherung für die Fehlerfunktion auf dem gröberen Gitter zu finden, selbiges Verfahren angewandt. Da die Grobgittersysteme eine bedeutend kleinere Anzahl von Unbekannten besitzen als das Feingittersystem, sind dort weniger Rechenoperationen zur Bestimmung einer Näherung notwendig. Durch Aufteilung auf zwei oder mehrere Gitter wird (unter bestimmten Voraussetzungen an die Regularität der betrachteten Aufgabe) erreicht, daß der Gesamtprozeß unabhängig von der Maschenweite und damit unabhängig von der Anzahl der Unbekannten konvergiert.

3.1 Grundlegendes über Mehrgitterverfahren und die Methode der finiten Elemente

3.1.1 Notation und Verfahrenskomponenten

In diesem Abschnitt geben wir einen kurzen Überblick über das Mehrgitterprinzip und führen in die im folgenden verwendete Terminologie ein. Dabei ist die Darstellung möglichst knapp gehalten. Für weitergehende Informationen verweisen wir auf [HAC85], [BRA84] oder [STU82]. Wir beschränken uns hierbei und im folgenden auf den 2-dimensionalen Fall. Die Darstellung dieses Abschnitts ist größtenteils [GRI90] entnommen.

Sei $\Omega \subset \mathrm{R} \times \mathrm{R}$ ein offenes Gebiet und Γ dessen Rand. Wir betrachten eine kontinuierliche Randwertaufgabe

$$Lu = f \tag{48}$$

für das Gebiet $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$, die durch die Kombination einer Differentialgleichung

$$L_\Omega u = f_\Omega \quad \text{in} \quad \Omega \tag{49}$$

mit einer Randbedingung, wie beispielsweise der Dirichlet-Bedingung

$$u = g \quad \text{auf} \quad \Gamma, \tag{50}$$

entstanden ist. In dieser Arbeit beschränken wir uns auf zweidimensionale elliptische Probleme mit linearem Operator.

Als konkretes Beispiel für 49 siehe die Modellgleichung 9.

Der Mehrgitteransatz setzt eine Hierarchie von Gittern voraus. Wir beschränken uns auf uniforme Gitter über Ω, bei denen die Maschenweiten in beiden Koordinatenrichtungen gleich sind. Dabei gelte für die Maschenweite der einzelnen Gitter, wenn $h_0 \in \mathrm{R}$ die Maschenweite des gröbsten Gitters ist,

$$h_k = h_{k-1}/2, \quad k = 1, 2, 3, \ldots.$$

Für die Gitterhierarchie

$$\Omega_0 \subset \Omega_1 \subset \Omega_2 \subset \ldots \subset \Omega_{k-1} \subset \Omega_k$$

definieren wir

$$G_k = \{(x, y) \in \mathrm{R} \times \mathrm{R} : x = ih_k, y = jh_k, i, j \in \mathrm{Z}\}, k = 0, 1, 2, \ldots.$$

und damit die zu Ω, Γ und $\bar{\Omega}$ gehörenden Teilgitter

$$\Omega_k = G_k \cap \Omega, \tag{51}$$

$$\Gamma_k = G_k \cap \Gamma \text{ und} \tag{52}$$

$$\bar{\Omega}_k = \Omega_k \cup \Gamma_k. \tag{53}$$

Der Index k bezeichnet im folgenden meist das feinste Gitter, $k-1$ das nächstgröbere. Manchmal verwenden wir die Indizes k und $k-1$ jedoch auch, um ein beliebiges Grobgitter und das jeweils nächstgröbere Gitter zu bezeichnen, insbesondere, wenn der zwei Level-Fall beschrieben wird. Die Rekursivität in Bezug auf den Multi-Level-Fall und die Bedeutung des Indizes ist jedoch immer aus dem Zusammenhang klar. Des öfteren bezeichnen wir auch das feinere von zwei betrachteten Gittern als Feingitter und das nächstgröbere als Grobgitter.

Der dem Randwertproblem 48 zugeordnete Operator

$$L : V \to F \tag{54}$$

sei eine lineare Abbildung von einem geeigneten Funktionenraum V in einen Funktionenenraum F. Seinen $V_k : \bar{\Omega}_k \to \mathrm{R}, k = 0, \ldots, j$ und $F_k : \bar{\Omega}_k \to \mathrm{R}, k = 0, \ldots, j$ Mengen von Gitterfunktionen auf $\bar{\Omega}_k$, dann bezeichne

$$L_k : V_k \to F_k, k = 0, \ldots, j \tag{55}$$

eine diskrete Approximation von L auf dem Gitter $\bar{\Omega}_k$.

Formal ist der Diskretisierungsprozeß auf jedem Gitter $\bar{\Omega}_k, k = 0, \ldots, j$ durch

$$L_k = R^k L P_k \text{ und } f_k = R^k f \tag{56}$$

gegeben, wobei

$$P_k : V_k \to V, \quad R^k : F \to F_k$$

noch zu wählende Abbildungen zwischen Funktionen und Gitteräumen sind. Weiterhin setzt der Mehrgitter-Algorithmus Abbildungen zwischen aufeinanderfolgenden Gitterräumen voraus. Dazu werden als „grob zu fein“ Abbildungen die sogenannten Prolongationen

$$P^k_{k-1} : V_{k-1} \to V_k$$

und als „fein zu grob“ Abbildungen die sogenannten Restriktionen

$$R^{k-1}_k : F_k \to F_{k-1}$$

eingeführt. Eine mögliche Wahl der Prolongation ist in Sternschreibweise (die wir im folgenden immer durch einen hochgestellten Stern * kennzeichnen werden) durch

$$P^k_{k-1}{}^* = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \tag{57}$$

gegeben. Dabei zeigt der Stern die Werte der Feingitterfunktion, die durch Prolongation einer Grobgitterfunktion die 1 an einem Punkt und sonst 0 ist, erzeugt werden. Die Prolongation 57 entspricht der Interpolation durch eine bilineares Polynom. Sie wird im folgenden des öfteren gebraucht und von uns als Standardprolongation bezeichnet.

Damit ergeben sich zwei Strategien, die im Mehrgitter-Algorithmus benötigten Grobgitteroperatoren zu definieren:

1. Durch explizite Diskretisierung auf jedem Gitter:
   Der Grobgitteroperator wird wie auf dem feinsten Gitter direkt aus dem kontinuierlichen Operator gewonnen.

2. Durch die Galerkin-Approximation:
   Der Grobgitteroperator L_{k-1} wird in Abhängigkeit vom Feingitteroperator und der Prolongations- und Restriktionsoperatoren durch

   $$L_{k-1} = R^{k-1}_k L_k P^k_{k-1} \tag{58}$$

   bestimmt. Dann ist schon nach wenigen Vergröberungsschritten die entstehende Grobgittermatrix entscheidend von der Prolongation und Restriktion mitbestimmt [GRI90] [ZEE90].

3.1.2 Die Diskretisierung partieller Differentialgleichungen mit Finiten Elementen

Sei auf dem Gebiet Ω eine Differentialgleichung 2. Ordnung mit dem linearen Operator L und der kontinuierlichen Lösung u, sowie der rechten Seite f

$$Lu = f \text{ in } \Omega, u \in V, \tag{59}$$

mit der Randbedingung

$$u = g \text{ auf } \partial\Omega,$$

und V einem geeigneten Lösungsraum, gegeben. Durch die Multiplikation von Gleichung 59 mit einem Element aus V und anschließender Integration über Ω erhält man die sogenannte variationelle Formulierung von 59:
Finde ein $u \in V$, so daß für alle $v \in V$ gilt

$$a(u,v) = (f,v). \tag{60}$$

$a(.,.) : V \times V \to \mathrm{R}$ ist dabei die durch die Integration entstehende Bilinearform und $(f,.) : V \to \mathrm{R}$ die entsprechende Linearform der rechten Seite.

Nach dem Lemma von Lax-Milgram besitzt die Randwertaufgabe 59 eine eindeutige Lösung, wenn a stetig und V-elliptisch ist (siehe z.B. [GRO92]). Um ein endlichdimensionales Problem zu erhalten, daß dann numerisch gelöst werden kann, wählt man zwei endlichdimensionale Unterräume V_l und W_l von V gleicher Dimension n_l, mit Basen

$$B_{V_l} := \{\varphi_i^l\}_{i=1}^{n_l} \text{ den Ansatzfunktionen und}$$

$$B_{W_l} := \{\psi_i^l\}_{i=1}^{n_l} \text{ den Testfunktionen.}$$

Sind z.B. V_l bzw. W_l die bezüglich Ω_l stückweise linearen Funktionen, so sind die bekannten nodalen Basisfunktionen (Hut-Funktionen) (siehe Abbildung 13 und 14), die definiert sind durch

$$\varphi_i^l(x_j) = \delta_{i,j}, x_j \in N_l, \tag{61}$$

Basisfunktionen von B_{V_l} und von B_{W_l}, d.h. z.B. für $l = k$:

$$\varphi_i^k(x) = \begin{cases} (x - x_i)/(x_i - x_{i-1}) & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ (x_{i+1} - x)/(x_{i+1} - x_i) & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{62}$$

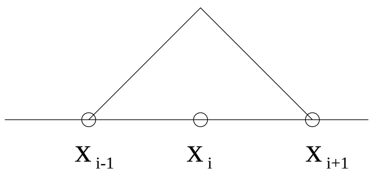

Abb. 13: Die eindimensionale finite Element Hut-Basisfunktion φ_i^k zum Punkt x_i auf dem Gitter Ω_k

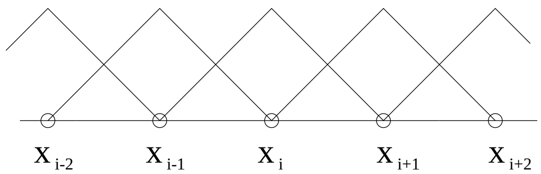

Abb. 14: Die eindimensionale Hut-Basis

Dann läßt sich eine eindimensionale Funktion $u_k \in V_k$ eindeutig als Linearkombination

$$u_k(x) = \sum_i u_k(x_i)\varphi_i^k(x) \tag{63}$$

der Finite-Element-Basisfunktionen φ_i^k darstellen.

Damit erhalten wir ein diskretes Analogon zu 60: Finde ein $u_l \in V_l$, so daß für alle $v_l \in W_l$ gilt:

$$a(u_l, v_l) = (f, v_l). \tag{64}$$

Dies können wir wegen Gleichung 63 in der folgenden kompakten Form als Matrix-Vektor-Produkt schreiben:

$$L_l u_l = f_l, \tag{65}$$

mit der Steifigkeitsmatrix

$$(L_l)_{ij} = a(\varphi_i^l, \psi_j^l) \tag{66}$$

und der rechten Seite

$$(f_l)_i = (f, \psi_i^l). \tag{67}$$

Offensichtlich hat die Wahl der endlichdimensionalen Teilräume V_l und W_l, und insbesondere die Wahl der zugehörigen Basen einen entscheidenden Einfluß auf die Gestalt der Steifigkeitsmatrix L_l. Die ideale Wahl für die Basisfunktionen von V_l und W_l ist offensichtlich diejenige, in der L_l Diagonalgestalt hat, in der also

$$a(\varphi_i^l, \psi_j^l) = \delta_{ij}$$

gilt. D.h. V_l wie auch W_l bestehen aus einer Teilmenge der Menge der orthonormierten Eigenfunktionen des Operators L. Doch diese Wahl ist natürlich nicht realistisch, da dies ja dem Lösen des diskreten Problems selbst gleich kommt. Auf die Frage, wie die Basisfunktionen geeignete gewählt werden können, kommen wir in folgenden Abschnitten zurück.

Für die Modellgleichung 9 erhalten wir die Bilinearform

$$a(u, v) := \int_\Omega (\nabla u)^t D \nabla v dx. \tag{68}$$

3.1.3 Standard MG-Schemata

Hier wollen wir kurz verschiedene Standardversionen von MG-Algorithmen zur Lösung der diskreten Randwertaufgabe $L_k u_k = f_k$ beschreiben.

Wird, wie bereits oben beschrieben, auf dem groben Gitter eine Näherung des Fehlers der Approximation der Lösung auf dem nächstfeineren Gitter berechnet, so erhält man das sogenannte Korrekturscheme (CS-Schema):

Ist $k = 0$, so löse $L_k u_k = f_k$ direkt.
Sonst

1. Iteriere ν_1-mal über $L_k u_k = f_k$.
2. Bilde das Residuum $r_k := f_k - L_k u_k$.
3. Bilde $f_{k-1} := R_k^{k-1} r_k$.
4. Setze $u_{k-1} := 0$ als Startwert.
5. Wende das Schema γ-mal auf $L_{k-1} u_{k-1} = f_{k-1}$ an.

6. Bilde $u_k := u_k + P_{k-1}^k u_{k-1}$.
7. Iteriere ν_2-mal über $L_k u_k = f_k$.

Dabei bestimmt γ die Gestalt des MG-Zyklus. Für $\gamma = 1$ ergibt sich der sogenannte V-Zyklus, und für $\gamma = 2$ der sogenannte W-Zyklus. Schritt 1 bzw. 7 werden als Vor- bzw. Nachglättungsschritt bezeichnet. (Vor Berechnung der Korrektur auf den gröberen Gittern bzw. nach Addition der Grobgitterkorrektur.) In diesem Schema bezeichnet u_{k-1} eine Näherung des Fehlers und nicht der Lösung auf dem Gitter $\bar{\Omega}_{k-1}$.

Bemerkung: Schritt 3 bis 6 läßt sich (hier der Einfachheit halber nur für den Zwei-Level-Fall in dem die Grobgittergleichung exakt gelöst wird) zusammenfassen in der Substitution

$$u_k := u_k + P_{k-1}^k L_{k-1}^{-1} R_k^{k-1} (f_k - L_k u_k)$$

wie man durch Einsetzen von 3 bis 5 in 6 sofort sieht. Bezeichnet u die exakte Lösung, so läßt sich dies auch schreiben als

$$u_k := u_k + P_{k-1} L_{k-1}^{-1} R_k^{k-1} L_k (u - u_k) \tag{69}$$

und man erhält die Iterationsmatrix

$$(I - P_{k-1}^k L_{k-1}^{-1} R_k^{k-1} L_k).$$

Anstatt Korrekturen auf den groben Gittern zu betrachten, kann man auch direkt Approximationen der Lösung berechnen. Führt man dazu den neuen Ausdruck

$$\tau_k^{k-1} := L_{k-1} \hat{R}_k^{k-1} u_k - R_k^{k-1} L_k u_k$$

ein, dann ergibt sich bei expliziter Berechnung von τ_k^{k-1} der folgende Zyklus:

Ist $k = 0$, so löse $L_k u_k = f_k$ direkt.
Sonst

1. Iteriere ν_1-mal über $L_k u_k = f_k$.
2. Bilde $\tilde{u}_{k-1} := \hat{R}_k^{k-1} u_k$.
3. Bilde $\tau_k^{k-1} := L_{k-1} \tilde{u}_{k-1} - R_k^{k-1} L_k u_k$.
4. Bilde $\hat{f}_{k-1} := R_k^{k-1} f_k + \tau_k^{k-1}$.
5. Setze $\hat{u}_{k-1} := \tilde{u}_{k-1}$ als Startwert.
6. Wende das Schema γ-mal auf $L_{k-1} \hat{u}_{k-1} = \hat{f}_{k-1}$ an.
7. Bilde $u_k := u_k + P_{k-1}^k (\hat{u}_{k-1} - \tilde{u}_{k-1})$.
8. Iteriere ν_2-mal über $L_k u_k = f_k$.

Hierbei wird im Gegensatz zum CS-Schema auf jedem Gitter eine Approximation der Feingitterlösung berechnet. Deswegen bezeichnet man dieses Schema auch als FAS-Schema (full approximation storage). Damit wird es möglich, die Mehrgittertechnik für nichtlineare Probleme einzusetzen.

Aus Zeile 6 des Zyklus entnehmen wir die Grobgittergleichung

$$L_{k-1} \tilde{u}_{k-1} = R_k^{k-1} f_k + \tau_k^{k-1},$$

die sich ohne den Term τ_k^{k-1} als Grobgitterdiskretisierung des kontinuierlichen Problems interpretieren läßt. Der Term τ_k^{k-1} sorgt dafür, daß die Lösung der Grobgittergleichung mit der der Feingittergleichung zusammenfällt, weswegen er sich als Fein-zu-Grob-Defektkorrektur betrachten läßt.

Um konkrete Algorithmen zu erhalten sind jetzt noch

- die Restriktionen und Prolongationen,
- die Diskretisierungen und
- das Iterationsverfahren

speziell angepaßt an das jeweilige Problem zu wählen.

Allerdings gibt es bei der Wahl geeigneter Verfahrenskomponenten für die Mehrgitteralgorithmen – wie der Transportoperatoren zwischen den verschiedenen Gittern (Leveln), der Grobgitteroperatoren und der Glättungsoperatoren – kein ausgezeichnetes Verfahren, daß für alle Probleme gleich gut geeignet wäre, und damit als sogennanter „black-box“ Löser Verwendung finden könnte. Insbesondere ist die Wahl der Diskretisierung des kontinuierlichen Problems auf den verschiedenen groben Gittern, also der Grobgitteroperatoren, ein zentrales Problem. Werden die Verfahrenskomponenten schlecht gewählt, kann dies zur Verlangsamung der Konvergenz, oder sogar zu dessen Zusammenbruch führen.

Bei der Behandlung von Problemen, wie unserem Modellproblem, gibt es für die Wahl der Verfahrenskomponenten verschiedene Ansätze. Einerseits die, von ihrer Motivation her eher heuristischen Ansätze aus [ALC81] und andererseits die sogenannte AMG-Methode (Algebraische Mehrgittermethode) [STU82] [STU83], bei der auf geometrische Informationen verzichtet wird, und alle Information zur Wahl der Transportoperatoren und der Grobgitteroperatoren allein aus der Matrix des diskreten Operators gewonnen wird. Zwischen diesen beiden Ansätzen bewegen sich die an manchen Stellen der Literatur als „algebraisch definierte“ MG-Verfahren bezeichneten Methoden, bei denen, ähnlich wie bei der AMG-Methode, die Information zur Bildung der Grobgitteroperatoren und der Transportabbildungen alleine aus dem diskreten Feingitteroperator gewonnen wird. Im Gegensatz zu AMG sind jedoch die groben Gitter bereits vorgegeben, und werden nicht ebenfalls aus der Feingittermatrix bestimmt.

3.1.4 Etwas lineare Algebra

Bevor wir uns den Problemen der Standard-MG-Verfahren bezüglich der Modellgleichung zuwenden noch etwas vorbereitende lineare Algebra, um in die in Abschnitt 3.3.3 benutzte Notation einzuführen.

Das Verhalten von Vektoren bei Basiswechsel Sei V ein n-dimensionaler euklidischer K-Vektorraum mit Basis $B = (v_1, \ldots, v_n)$, $(\alpha_i)_{i=1}^n \subseteq \mathrm{K}^n$. Zu $v := \sum_{i=1}^n \alpha_i v_i$ ist

$$_B[v] := \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}$$

eindeutig bestimmt. $_B[v]$ heißt Koordinatenvektor von v bezüglich der Basis B.

Sei C ebenfalls eine Basis von V mit $C := I = (e_1, \ldots, e_n)$, wobei I die Einheitsmatrix bezeichne. B definiert eine Matrix $U = (_C[v_1], \ldots, _C[v_n])$, bestehend aus den Koordinatenvektoren der Elemente von B bezüglich der Basis C. Dann gilt

$$_C[v] = U_B[v] \text{ und damit } _B[v] = U_C^{-1}[v].$$

D.h. die Matrix des Koordinatenwechsels bzgl. der Darstellung in der Basis B in die Darstellung bzgl. der Basis C ist U.

Das Verhalten von quadratischen Matrizen bei Basiswechsel Sei A eine symmetrischer positiv-definiter linearer Operator (in seiner Darstellung bezüglich der Basis C), so hat die Darstellung von A bzgl. der Basis B die Form

$$U^{-t}AU^{-1},$$

denn es gilt

$$({}_C[v], {}_C[u])_A = (A_C[v], {}_C[u]) = (U^{-t}AU^{-1}U_C[v], U_C[u]) = (U^{-t}AU^{-1}{}_B[v], {}_B[u]).$$

Orthogonalzerlegung Sei V wiederum ein endlichdimensionaler euklidischer Vektorraum mit Skalarprodukt $(.,.)$, A ein symmetrischer positiv-definiter Operator, der das Energie-Skalarprodukt

$$(.,.)_A := (A.,.)$$

definiert.

Unter einer Orthogonalzerlegung von V versteht man eine Zerlegung der Form

$$V = \tilde{V} \oplus_A W, \tag{70}$$

wobei jeder Vektor $v \in V$ sich eindeutig in der Form

$$v = u + w \text{ mit } u \in \tilde{V}, w \in W$$

darstellen läßt, wobei gilt

$$W := \{w \in V : (v,w)_A = 0 \forall v \in \tilde{V}\}. \tag{71}$$

3.2 Probleme der Standard MG-Verfahren mit der Modellgleichung

Wie wir in Kapitel 2 erwähnt haben, versagen die dort vorgestellten einfachen Mittelungsmethoden zur Bestimmung von Grobgitteroperatoren (Gleichungen auf der Makroskala) bei stark variierendem Diffusionskoeffizienten. Die entstehenden Grobskalengleichungen enthalten die feinskaligen Informationen, die im Operator der exakten Gleichungen vorhanden sind, nicht (richtig), und geben das physikalische Verhalten der grobskaligen Lösung falsch wieder. Analog dazu beobachtet man bei der numerischen Lösung der Modellgleichung 9 mittels der Standard-Mehrgittermethode mit bilinearer Interpolation als Prolongation und der adjungierten Abbildung als Restriktion, daß die Konvergenzrate sehr schlecht wird. Diese klassische Mehrgittermethode aus [BRA77] arbeitet befriedigend, solange die Unstetigkeiten im Diffusionskoeffizienten D nicht zu groß sind, und die Unstetigkeitsstellen von D nicht aus zu vielen Linien bestehen. Andernfalls zeigt das klassische Mehrgitterverfahren schlechte Konvergenzraten oder bricht sogar zusammen [ALC81].

Man weiß, daß die Lösung u an den Unstetigkeitsstellen der Materialfunktion D noch stetig ist, jedoch einen Sprung in der ersten Ableitung hat. Die Lösung ist also an solchen Stellen nicht glatt. Bilineare Interpolation als Prolongation approximiert jedoch die Stetigkeit von ∇u und basiert auf der Glättung des Fehlers in ∇u. Dies trägt aber dem nicht glatten Verhalten der Lösung an den Unstetigkeitstellen nicht Rechnung. Vielmehr müßte eine geeignete Prolongation auf der Stetigkeit des

Flußes $D\nabla u$ basieren, und das unstetige Verhalten der Lösungsableitung approximieren. Anstatt nun, wie in der oben bechriebenen Standard-MG-Methode, die starre bilineare Interpolation als Prolongation zu verwenden, kann die kontinuierliche Differentialgleichung herangezogen werden, um Prolongationen und Restriktionen zu bestimmen, die das Verhalten der kontinuierlichen Lösung besser wiederspiegeln (siehe dazu [GRI90]).

Ebenso wird durch ein geeignetes Diskretisierungsverfahren die Unstetigkeit des Diffusionskoeffizienten D durch die Matrix des diskreten Operators $L_k, k = 0, \ldots, j$ lokal wiedergegeben. Statt der in den Standard-Mehrgittermethoden verwendeten starren Prolongation, die bei Verwendung der Methode der finiten Elemente einer Diskretisierung mit bilinearen Ansatzfunktionen entspricht, sollte also die Feingittermatrix benutzt werden, um aus ihr Prolongation und Restriktion zu gewinnen. Dabei handelt es sich dann um sogenannte gewichtete Interpolationen, die nicht mehr starr, sondern vom jeweiligen betrachteten Gitterpunkt abhängig sind.

In die Konstruktion der Grobgitteroperatoren sollte also entweder explizit in der direkten Diskretisierung auf jedem Level, oder implizit über die Galerkinapproximation die Stetigkeit des Flußes $D\nabla u$ und damit die approximative Flußerhaltung beim Übergang zwischen verschiedenen Gittern eingehen.

Bevor wir jedoch darauf in allgemeinerer Form näher eingehen, wollen wir als Einführung kurz auf eine in [GRI90] beschriebene Möglichkeit eingehen, Prolongationen und Restriktionen und damit zusammenhängend, Basisfunktionen der finite Elementräume, direkt aus dem kontinuierlichen Operator zu gewinnen.

3.2.1 Betrachtung der eindimensionalen Diffusionsgleichung

Betrachten wir die eindimensionale homogene Diffusionsgleichung

$$(d(x)u(x)_x)_x = 0 \tag{72}$$

auf einem beliebigen Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ mit den Randdaten $u(x_i) = \alpha$, $u(x_{i+1}) = \beta$, $\alpha \neq \beta$ und $d(x) \neq 0 \forall x \in [x_i, x_{i+1}]$.

Dann haben wir die allgemeine Lösung des Problems zu

$$u(x) = \frac{\beta - \alpha}{\int_{x_i}^{xi+1} \frac{1}{d(s)} ds} \int_{x_i}^{x} \frac{1}{d(y)} dy + \alpha. \tag{73}$$

Sie ist von d, den Randdaten $x_i, x_{i+1}, \alpha, \beta$ abhängig und läßt sich folgendermaßen zur Definition der Prolongation benutzen:
Sind x_i und x_{i+1} Punkte auf dem groben Gitter Ω_{k-1}, so wird in ihnen die Prolongation als Identität definiert. Was dann noch zu bestimmen ist, ist das Ergebnis der Prolongation im Feingitterpunkt $x_{i+1/2} = (x_i + x_{i+1})/2$, dem Mittelpunkt des Intervalls $[x_i, x_{i+1}]$. Dazu kann man die allgemeine Lösung 73 des Problems heranziehen, indem man den Wert der allgemeinen Lösung am Punkt $x_{i+1/2}$ berechnet, und diesen als Ergebnis der Prolongation betrachtet. Es gilt

$$u(x_{i+1/2}) = p_1\alpha + p_2\beta,$$

mit den Gewichten

$$p_1 = \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{d(s)} ds \right)^{-1} \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \frac{1}{d(s)} ds \text{ und} \tag{74}$$

$$p_2 = 1 - p_1. \tag{75}$$

Damit erhalten wir das Prolongationsmolekül

$$P_{k-1}^{k}{}^{*} = [\ p_1 \quad 1 \quad p_2\ ], \tag{76}$$

das jetzt für nicht konstantes d von der Maschenweite des Gitters und von d abhängt, und sich von der linearen Interpolation mit dem Prolongationsmolekül

$$[\ \tfrac{1}{2} \quad 1 \quad \tfrac{1}{2}\ ]$$

unterscheidet. Die Prolongationsmoleküle in den Punkten aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ werden also direkt durch die Lösung des kontinuierlichen lokalen homogenen Problems 72 bestimmt und damit wird die Stetigkeit des Flußes du_x bzw. die eventuelle Unstetigkeit von u_x diskret nachempfunden. Darüberhinaus interpoliert dann die Prolongation die exakte Lösung des Problems, wenn die Lösung in den Grobgitterpunkten bereits bestimmt ist.

Beispiel: Ist der Diffusionskoeffizient d auf $[x_i, x_{i+1}]$ durch

$$d(x) = \begin{cases} d_1 & \text{für } x \in [x_i, x_{i+1/2}] \\ d_2 & \text{für } x \in (x_{i+1/2}, x_{i+1}] \end{cases}$$

gegeben, so ergibt sich aus Gleichung 74

$$p_1 = \frac{d_2}{d_1 + d_2} \text{ bzw. } p_2 = \frac{d_1}{d_1 + d_2}$$

und damit das Prolongationsmolekül im Punkte $x_{i+1/2}$ zu

$$[\ p_1 \quad 1 \quad p_2\ ] = [\ \tfrac{d_2}{d_1+d_2} \quad 1 \quad \tfrac{d_1}{d_1+d_2}\ ].$$

Ist die Lösung in den Grobgitterpunkten gegeben, dann interpoliert die Prolongation nach Konstruktion in den Punkten aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ die exakte Lösung, wohingegen die Standardprolongation die Näherung

$$\alpha/2 + \beta/2$$

für $u(x_{i+1/2})$ ergibt, was nur für $d_1 = d_2$, also im Falle $d = konst$ die Lösung interpoliert.

Dieses Vorgehen läßt sich direkt ins Diskrete übertragen. Die Forderung , daß das Ergebnis der Prolongation in den Feingitterpunkten durch die Lösung des homogenen lokalen Problems bestimmt ist, schreibt sich diskret als

$$(L_k P_{k-1}^{k} u_{k-1})(x_i) = 0 \text{ für } x_i \in \Omega_k \setminus \Omega_{k-1}. \tag{77}$$

Damit erhalten wir direkt aus der Steifigkeitsmatrix L_k eine jetzt matrixabhängige Prolongation. Dann sind operator- und matrixabhängige Prolongation gleich.

Insgesamt ergibt sich also folgendes: Analytisches Lösen der lokalen homogenen Differentialgleichung mit den bereits durch die Identität als Prolongation bestimmten Werten in den Grobgitterpunkten als Randwerten, ergibt die Prolongationsmoleküle, die damit von der kontinuierlichen Differentialgleichung abhängig sind. Die Prolongationsgewichte in den Punkten aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ entstehen also durch lokales Invertieren der homogenen Differentialgleichung.

Man bedenke an dieser Stelle, daß mit Linearkombinationen der Basisfunktionen des Testraumes eine möglichst gute Approximation des Lösung des Problems möglich sein sollte. Betrachtet man das Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ als finites Element der Länge h_k

auf dem Gitter Ω_k, dann ist eine Approximation der Lösung durch eine Linearkombination zweier Basisfunktionen ψ_i^k, ψ_{i+1}^k des FE-Raumes gegeben:

$$u_k^{appr}(x) = \alpha\psi_i^k(x) + \beta\psi_{i+1}^k(x) \tag{78}$$

Wählt man als Basisfunktionen des Testraumes die bekannten Hut-Funktionen, so erhält man im allgemeinen keine gute Approximation der Lösung. Dies ist offensichtlich, wenn man die exakte Lösung 73 des homogenen Problems mit der Approximation durch u_k^{appr} vergleicht. Diese fallen nur für $d \equiv konst$ zusammen. Also ist die Wahl der Hut-Funktionen als Basis des FE-Raumes nur für das Poissonproblem $u_{xx} = f$ (d.h. für $d \equiv konst$) geeignet.

Stattdessen kann man geeignetere Basisfunktionen, die dann den FE-Raum aufspannen, ebenfalls direkt aus der Lösung des homogenen Dirichlet-Problems 72 mit Randdaten α, β über den Elementen $[x_i, x_{i+1}]$ bestimmen. Definiert man

$$\psi_i^k(x) = \begin{cases} \left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{d(s)}ds\right)^{-1} \int_{x_{i-1}}^{x} \frac{1}{d(y)}dy & \text{für } x \in [x_{i-1}, x_i], \\ 1 - \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{d(s)}ds\right)^{-1} \int_{x_i}^{x} \frac{1}{d(y)}dy & \text{für } x \in (x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \tag{79}$$

als Basisfunktion des FE-Raumes V_k zum Punkt x_i, die aus den Lösungen der homogenen Probleme über den Intervallen $[x_{i-1}, x_i]$ bzw. $[x_i, x_{i+1}]$ mit Randbedingungen $\alpha = 0, \beta = 1$ bzw. $\alpha = 1, \beta = 0$ respektive hervorgeht, dann läßt sich die exakte Lösung des homogenen Problems mit beliebigen Randdaten als Linearkombination der Basisfunktionen darstellen. Dieses Vorgehen läßt sich auf allen Leveln durchführen. Bezeichnet z.B. k nicht das feinste Gitter, sondern ein gröberes Gitter, dann lassen sich die Gewichte der Prolongationen als Werte der nun operatorabhängigen Basisfunktionen an den Stellen $x_{i+1/2}$ bzw. $x_{i-1/2}$ interpretieren, wie ein Vergleich von 79 mit 74 zeigt.

Insgesamt haben wir also folgende Vorgehensweise: Auf jedem Gitter Ω_k werden die FE-Basisfunktionen bestimmt, indem die elementlokalen homogenen Probleme für beliebige Randdaten gelöst werden. Die Gewichte der Prolongationen ergeben sich dann direkt aus den Werten der Basisfunktionen an den Element-Mittelpunkten. Darüberhinaus ließen sich dann mit den operatorabhängigen FE-Basisfunktionen rekursiv Steifigkeitsmatrizen auf den gröberen Gittern definieren, die dann für stabile Diskretisierungen auf allen Leveln sorgen.

Diese Vorgehensweise läßt sich auch für allgemeinere Differentialgleichungen anwenden, jedoch ist die Bestimmung der Prolongation aus der Lösung des kontinuierlichen homogenen Problems meist nicht praktikabel, da die Berechnung der analytischen Lösung des homogenen Problems im allgemeinen nicht so einfach ist. Stattdessen verwendet man direkt Gleichung 77 zur Bestimmung matrixabhängiger Prolongationen und damit (implizit) auch zur Bestimmung von Grobgitterbasisfunktionen.

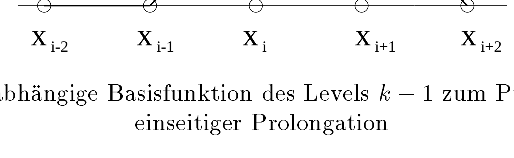

Abb. 15: Matrixabhängige Basisfunktion des Levels $k-1$ zum Punkt x_i bei extrem einseitiger Prolongation

Verwendet man als finite Elementraum V_k den Raum der bezüglich Ω_k stückweise linearen Funktionen, so bestimmt ja z.B. im eindimensionalen die einseitige Prolongation $P_{k-1}^{k}{}^*(x_i) = [\ 0 \quad 1 \quad 1\ ]$ im Punkte x_i direkt die in Abbildung 15 zu sehende

Basisfunktion des Levels $k-1$, die nicht mehr – wie die Standardbasis des Levels $k-1$ – linear bezüglich Ω_{k-1}, sondern linear bezüglich Ω_k ist.

3.2.2 Bemerkungen zum zweidimensionalen Fall

Im zweidimensionalen Fall ist es jedoch nicht mehr möglich, die Prolongation in den Feingitterpunkten als lokale Inverse der Steifigkeitsmatrix direkt aus der Beziehung

$$(L_k P_{k-1}^k u_{k-1})(x_i, y_j) = 0 \text{ für } (x_i, y_j) \in \Omega_k \setminus \Omega_{k-1} \tag{80}$$

zu bestimmen. Dies ist darauf zurückzuführen, daß ein Punkt aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ i.a. sowohl Grobgitterpunkte, d.h. Elemente aus Ω_{k-1}, als Nachbarn besitzt, als auch weitere Punkte aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$, mit denen er über die Steifigkeitsmatrix L_k gekoppelt ist. Jedoch lassen sich durch näherungsweises erfüllen von Gleichung 80 matrixabhängige Prolongationen definieren, wie wir in den folgenden Abschnitten sehen werden.

Analog dazu lassen sich auch aus der kontinuierlichen homogenen Differentialgleichung

$$-\nabla D \nabla u = 0 \tag{81}$$

nicht mehr direkt operatorabhängige Basisfunktionen und Prolongationen herleiten. Fordert man – analog zum eindimensionalen Fall –, daß die Basisfunktion ψ_{ij}^k des Levels k die homogene Differentialgleichung auf jeder Masche des Gitters auf Level k löst, so steht man vor dem Problem der Wahl der richtigen Randbedingungen für die homogene Differentialgleichung. Abbildung 16 verdeutlicht die Problematik.

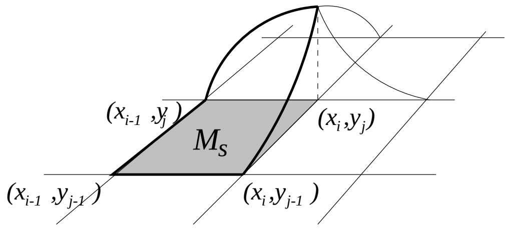

Abb. 16: Zur Bestimmung von operatorabhängigen Basisfunktionen in zwei Dimensionen: Die operatorabhängige Basisfunktion φ_{ij}^k

Auf den Randstücken $[(x_{i-1}, y_{j-1}), (x_i, y_{j-1})]$ bzw. $[(x_{i-1}, y_{j-1}), (x_{i-1}, y_j)]$ haben wir die natürlichen Null-Randbedingungen für φ_{ij}^k vorgegeben. Im Punkt (x_i, y_j) soll gelten $\psi_{ij}^k(x_i) = 1$. Was für Randbedingungen aber sind idealerweise auf

$$[(x_i, y_{j-1}), (x_i, y_j)] \text{ und } [(x_{i-1}, y_j), (x_i, y_j)]$$

zu wählen?

Eine Möglichkeit ist, die Randbedingungen aus der Lösung des eindimensionalen Problems

$$-\frac{\partial}{\partial y}(D(x_i, y)\frac{\partial}{\partial y}u(x_i, y)) = 0 \tag{82}$$

mit Randbedingungen $u(x_i, y_j) = 1, u(x_i, y_{j-1}) = 0$ und

$$-\frac{\partial}{\partial x}(D(x, y_j)\frac{\partial}{\partial x}u(x, y_j)) = 0 \tag{83}$$

mit Randbedingungen $u(x_i, y_j) = 1, u(x_{i-1}, y_j) = 0$ zu bestimmen. D.h. ψ_{ij}^k wird auf $[(x_{i-1}, y_{j-1}), (x_i, y_{j-1})]$ bzw. $[(x_{i-1}, y_{j-1}), (x_{i-1}, y_j)]$ (durch Reduktion auf ein eindimensionales Problem) wie im eindimensionalen Fall bestimmt. Damit wären Randbedingungen vorgegeben und ψ_{ij}^k ließe sich aus der homogenen Differentialgleichung

$$-\nabla D \nabla \psi_{ij}^k = 0 \text{ auf } M_l$$

bestimmen. Man könnte natürlich zur Bestimmung der Randdaten auch andere Varianten betrachten. So könnte man z.B. statt $D(x, y_j)$ in Gleichung 83

$$\bar{D}(x, y_j) := \frac{1}{h_k} \int_{x_{i-1}}^{x_i} D(x, y) dx$$

und statt $D(x_i, y)$ in Gleichung 82

$$\bar{D}(x_i, y) := \frac{1}{h_k} \int_{y_j}^{y_j} D(x, y) dy$$

oder andere Mittelungen verwenden.

Im allgemeinen, insbesondere auch bei allgemeineren Differentialgleichungen, sind diese Methoden zur Bestimmung von finite Element Basisfunktionen auf allen Leveln bedeutend zu aufwendig und haben daher nur theoretischen Wert. Verwendung findet daher i.a. nur nur die diskrete Variante, die die Prolongationen aus der näherungsweisen Erfüllung der Beziehung 80 herleitet. Wie dies konkret geschieht, werden wir im folgenden sehen. Dabei werden wir einige diskrete Varianten des obigen kontinuierlichen Ansatzes zur Bestimmung von operator- bzw. matrixabhängigen Prolongationen kennenlernen.

3.3 Energieabhängige Verfahrenskomponenten für Mehrgitterverfahren

Multilevelmethoden wie die klassischen (in Abschnitt 3.1.3 beschriebenen) Mehrgitterverfahren lassen sich in den allgemeineren Rahmen der Unterraum-Korrekturmethoden integrieren. Dabei fallen klassische Multilevelmethoden in die Kategorie der multiplikativen (Gauß-Seidel artigen) und Verfahren wie die hierarchische Basis MG-Methode oder die Multilevel nodale Basis MG-Methode aus [BRA82] in die Kategorie der additiven (Jacobi artigen) Unterraum-Korrekturmethoden. Siehe [YSE93] [XU92] [GRI95] für einen Überblick.

Seien $U_0, U_1, \ldots, U_s$ Unterräume von V_k und $Q_l : V_k \to U_l$ orthogonale Projektionen auf den Unterraum U_l, definiert durch

$$a(Q_l v, u_l) = a(v, u_l), u_l \in U_l, v \in V_k,$$

wobei a das dem Problem zugrundeliegende Energieskalarprodukt bezeichne. Der grundlegende Bausteine dieser iterativen Methoden sind die Unterraumkorrekturen

$$\tilde{u} \leftarrow \tilde{u} + Q_l(u - \tilde{u})$$

in Bezug auf den Unterraum U_l. Diese Unterraumkorrektur macht den Fehler $u - \tilde{u}$ zwischen der exakten Lösung des u Problems und der Approximation $\tilde{u}$ a-orthogonal zum Unterraum U_l. Dann ist klar, daß es ideal ist, wenn die Unterräume $U_0, \ldots, U_s$ selbst a-orthogonal sind, d.h.

$$a(u, v) = 0 \text{ für } u \in U_n, v \in U_m, m \neq n$$

gilt. Problematisch hierbei ist jedoch, daß i.a. die exakte Berechnung der Korrektur $Q_l(u - \tilde{u})$ bei weitem zu teuer ist, um zu einer vernünftigen Methode zu führen.

Deswegen werden die exakten Unterraum-Korrekturen durch approximative Korrekturen ersetzt. Beschränkt man sich auf zwei Level, so hat eine solche approximative Korrektur in einem MG-Verfahren die Form

$$I - P^k_{k-1} L_{k-1} R^{k-1}_k L_k.$$

(Vergleiche dazu Gleichung 69.)

Im folgenden werden wir eine Transformation der Steifigkeitsmatrix L_k durchführen, wie sie in [AXE91] beschrieben wird, die exakt im gerade besc hriebenen Sinne ist, d.h. bei der die entstehenden Verfahrenskomponenten Unterraumkorrekturen erzeugen, die den Fehler der Approximation a-orthogonal zum jeweiligen Unterra um machen. L_k wird durch diese Transformation in einen blockdiagonale Matrix übergeführt. Die entstehenden finite Element Basisfunktionen spalten den zugrundeliegenden finite Elementraum in zueinander a-orthogonale Teilräume auf und die entstehenden energieabhängigen Verfahrenskomponenten (Prolongation, Restriktion und das Schurkomplement von L_k als Grobgitteroperator) lassen sich in genäherter Form in MG-Algorithmen einsetzen. Diese hierarchische Transformation ist der hierarchischen Transformation nach [YSE83] ähnlich, ist aber, im Gegensatz zu dieser, von der Steifigkeitsmatrix abhängig. Damit sind auch die zugehörigen finite Element Basisfunktionen wie auch die entstehenden Verfahrenskomponenten nicht mehr starr, sondern von L_k abhängig. Die entstehenden Prolongationen beschreiben das Verhalten der kontinuierlichen Lösung besser als die Standardprolongation, die Grobgitteroperatoren approximieren den kontinuierlichen Operator besser und beschreiben direkt die grobskalige Lösung des vorgegebenen Problems, wie wir noch sehen werden.

3.3.1 Die Matrixpartitionierung

In diesem Abschnitt führen wir die Partitionierung der Steifigkeitsmatrix L_k ein, auf die das nachfolgende aufbauen wird.

Betrachten wir wieder die Sequenz der ineinander verschachtelten uniformen Gitter

$$\Omega_0 \subset \Omega_1 \subset \ldots \subset \Omega_j.$$

D.h. Ω_k hat die Gitterweite $2^{j-k}h$, mit h der Gitterweite des feinsten Gitters Ω_j. Assoziieren wir mit dem Gitter Ω_k den zugehörigen Finite-Elementraum V_k aus stückweise linearen Funktionen, die stetig sind auf $\bar{\Omega}_k$, und wählen wir eine Basis $B_k := \{\varphi^k_i\}^{n_k}_{i=1}$ von V_k, so können wir die Steifigkeitsmatrix L_k berechnen.

Nummerieren wir die Punkte in Ω_k, indem wir zuerst die Punkte in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$, und dann die in Ω_{k-1} lexikographisch nummerieren, so erhalten wir z.B. für Dirichlet-Randbedingungen und ein 9×9 großes Gitter für die inneren Punkte das Muster

1	2	3	4	5	6	7
8	41	9	42	10	43	11
12	13	14	15	16	17	18
19	44	20	45	21	46	22
23	24	25	26	27	28	29
30	47	31	48	32	49	33
34	35	36	37	38	39	40.

Die Punkte mit Nummern 1 bis 40 gehören zu $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$, die mit Nummern von 41 bis 49 zu Ω_{k-1}. Außerdem führen wir noch eine Bezeichnung für die Indexmenge der Gitterpunkte in Ω_l ein:

$$N_l := \{i : x_i \in \Omega_l\}$$

Mit einer solchen Nummerierung erhalten wir eine Partitionierung der Steifigkeitsmatrix L_k in fein-ohne-grob- und grob-Anteile:

$$\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \tag{84}$$

Hierbei enthält u_1 die Unbekannten auf dem Teilgitter $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$, und u_2 diejenigen auf dem Gitter Ω_{k-1}, d.h.

$$L_{11} = \{a(\varphi_i^k, \varphi_j^k)\}_{i\in N_k\setminus N_{k-1}, j\in N_k\setminus N_{k-1}}, \tag{85}$$

$$L_{12} = \{a(\varphi_i^k, \varphi_j^k)\}_{i\in N_k\setminus N_{k-1}, j\in N_{k-1}}, \tag{86}$$

$$L_{21} = \{a(\varphi_i^k, \varphi_j^k)\}_{i\in N_{k-1}, j\in N_k\setminus N_{k-1}}, \tag{87}$$

$$L_{22} = \{a(\varphi_i^k, \varphi_j^k)\}_{i\in N_{k-1}, j\in N_{k-1}}. \tag{88}$$

Man beachte, daß wenn L_k durch 9-Punkte-Sterne darstellbar ist, L_{22} eine Diagonalmatrix ist.

3.3.2 Die hierarchische Transformation nach Yserentant

In [YSE83] wird die sogenannte hierarchische Basis für den finite Elementraum der linearen Funktionen über Ω_k eingeführt. Dem Vorgehen in [YSE83] folgend betrachten wir dafür in den Punkten aus Ω_k, die auch im nächstgröberen Gitter, also in Ω_{k-1} liegen (Index $i \in N_{k-1}$), statt den Hut-Basisfunktionen φ_i^k mit Träger $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ die zum Gitter Ω_{k-1} gehörigen Standardbasen φ_i^{k-1} (siehe Abbildung 17) mit doppelt großem Träger $[x_{i-2}, x_{i+2}]$, wie es in Abbildung 18 zu sehen ist.

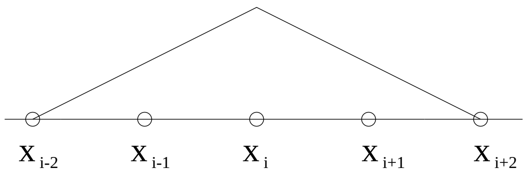

Abb. 17: Die eindimensionale finite Element Basisfunktion φ_i^{k-1}

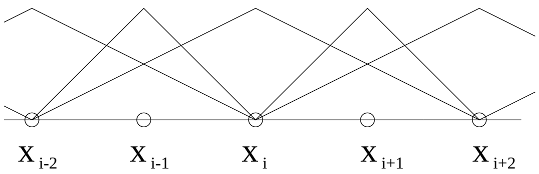

Abb. 18: Die eindimensionale hierarchische Basis im Zwei-Level-Fall

Setzt man dieses Vorgehen rekursiv für alle Punkte in $\Omega_l \subset \Omega_k, l = 0, \ldots, k-2$ fort, so erhält man eine neue, die sogenannte hierarchische Basis von V_k. Dadurch erhält man eine multilevel-artige Aufspaltung der Finite-Element-Basis zum Gitter Ω_k. Das durch die Diskretisierung auf Ω_k mit der hierarchischen Basis entstehende hierarchische System wollen wir im folgenden mit $^-$ kennzeichnen. Es ensteht also

$$\bar{L}_k w_k = \bar{f}_k, \text{ mit } \bar{L}_k = \bar{T}_k^t L_k \bar{T}_k \text{ und } \bar{f}_k = \bar{T}_k^t f_k.$$

Hierbei stellt $\bar{T}$ die Transformationsmatrix für die Transformation der Hut-Basis in die hierarchische Basis dar.

Dann läßt sich der unter Anwendung des Gauß-Seidel-Verfahrens auf das hierarchische System entstehende Algorithmus als Mehrgitter-Algorithmus interpretieren, in dem das Iterationsverfahren jeweils nur über die Punkte iteriert, die nicht auch zum nächstgröberen Gitter gehören [BAN87] (HB-MG-Verfahren). Dabei werden die im Mehrgitteralgorithmus auszuführenden Prolongationen einmal zu Beginn bei der Transformation in die hierarchische Basis ausgeführt. Betrachtet man nur den Zwei-Level-Fall und ist eine Blockzerlegung der Matrix L_k wie oben beschrieben gegeben, dann hat die Transformationsmatrix $\bar{T}_k$ die Form

$$\bar{T}_k = \begin{pmatrix} I & \bar{P}_{k-1}^k \\ 0 & \end{pmatrix}, \tag{89}$$

mit $\bar{P}_{k-1}^k$ der bilinearen Interpolation. Im multi-level-Fall hat $\bar{T}_k$ dann die Form

$$\bar{T}_k = U_0^1 U_1^2 \cdots U_{k-2}^{k-1} U_{k-1}^k, \tag{90}$$

wobei

$$U_{l-1}^l = \left(\begin{array}{c|c} I & 0 \\ \hline 0 & \begin{array}{cc} I & \bar{P}_{l-1}^l \\ 0 & \end{array} \end{array}\right) \tag{91}$$

die zur jeweiligen Prolongation $\bar{P}_{l-1}^l$ gehörige Matrix ist, die mittels der geeigneten Einheitsmatrix auf die Dimension der Feingittermatrix erweitert wurde. Man sieht, daß implizit in der Transformation die Prolongation $\bar{P}_{l-1}^l$ ausgeführt wird, und erkennt hier auch direkt den Zusammenhang zwischen der Wahl der finite Element Basisfunktionen einerseits und den Transportabbildungen (Prolongation und Restriktion) andererseits.

3.3.3 Die Energietransformation

Sei $B_k := \{\varphi_i^k\}_{i=1}^{n_k}$ eine Basis von V_k (man stelle sich z.B. die Hut-Basis vor), und sei $L_k = \{a(\varphi_i^k, \varphi_j^k)\}_{i,j=1}^{n_k,n_k}$ die zugehörige Steifigkeitsmatrix.

[AXE91] folgend erhält man durch Block-Gauß-Seidel-Elimination, bzw. – dazu äquivalent – durch Block-LU-Zerlegung der Matrix L_k

$$L_k = T^{-t} D_k T^{-1}, \tag{92}$$

mit

$$T = \begin{pmatrix} I & -L_{11}^{-1} L_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix} \tag{93}$$

und

$$D_k = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 \\ 0 & S_k \end{pmatrix},$$

wobei $S_k = L_{22}^k - L_{21}^k (L_{11}^k)^{-1} L_{12}^k$ das Schurkomplement von L_k bezeichne.

Im folgenden werden wir des öfteren den Index der Levelbezeichnung (hier k) weglassen. Was jeweils gemeint ist, ist direkt aus dem Zusammenhang klar. So schreiben wir also z.B. $S_k = L_{22} - L_{21} L_{11}^{-1} L_{12}$ für das Schurkomplement von L_k. L_{11}^{-1} bezeichnet dabei immer $(L_{11})^{-1}$ und nicht $(L^{-1})_{11}$.

Dann gilt

$$L_k^{-1} = T D_k^{-1} T^t \tag{94}$$

und für einen entsprechend partitionierten Vektor $v = \binom{v_1}{v_2}$ haben wir damit

$$L_k^{-1} v = \begin{pmatrix} -L_{11}^{-1}(L_{12} S_k^{-1}(v_2 - L_{21} L_{11}^{-1} v_1)) + L_{11}^{-1} v_1 \\ S_k^{-1}(v_2 - L_{21} L_{11}^{-1} v_1) \end{pmatrix}. \tag{95}$$

Um dies zu berechnen werden die iterative Berechnung der Aktionen von L_{11}^{-1} und von S_k^{-1} benötigt.

Weiterhin gilt

$$L_k^{-1} = \begin{pmatrix} -L_{11}^{-1}L_{12} \\ I \end{pmatrix} S_k^{-1} \begin{pmatrix} -L_{21}L_{11}^{-1} & I \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} L_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{96}$$

Interpretiert man diese Block-Gauß-Elimination als Basistransformation einer Basis B_k von V_k in eine neue Basis C_k von V_k, so definiert die Matrix T aus Gleichung 93 eine Abbildung des Basiswechsels zwischen B_k und C_k. Im vorigen Abschnitt haben wir schon eine ähnliche Transformation, nämlich die Transformation mittels $\bar{T}$ von der nodalen Basis in die hierarchische Basis kennengelernt. Im Gegensatz zu dieser, ist jetzt jedoch die Transformationsmatrix T von der Steifigkeitsmatrix L_k, genauer gesagt von den zu den Punkten in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ gehörenden Gleichungen, abhängig. Deswegen werden wir im folgenden diese Transformation als energieabhängige hierarchische Transformation oder kurz als „Energie-Transformation" bezeichnen. Ebenso werden wir die implizit in T definierten Prolongation

$$\begin{pmatrix} -L_{11}^{-1}L_{12} \\ I \end{pmatrix}$$

als energieabhängige Prolongationen bzw. kurz als Energieprolongation bezeichnen.

Die durch diese Transformation neu entstehende Basis C_k von V_k hat die Form $C_k := \{\psi_i^k\}_{i=1}^{n_k}$ mit ${}_{B_k}[\psi_i^k] = Te_i$ (e_i der i-te Einheitsvektor), also $C_k := \{\varphi_i^k\}_{i\in N_k\setminus N_{k-1}} \cup \{\psi_i^k\}_{N_{k-1}}$.

Definiert man dann

$$\tilde{C}_{k-1} := \{\psi_i^k\}_{i\in N_{k-1}},$$

so erhält man wegen $a(\psi_i^k, \psi_j^k) = (D_k)_{ij}$ die folgende a-Orthogonalzerlegung von V_k:

$$V_k = \tilde{V}_{k-1} \oplus_a W_k \tag{97}$$

mit

$$W_k := span\{\varphi_i^k\}_{i\in N_k\setminus_{k-1}}$$

und

$$\tilde{V}_{k-1} := span\{\tilde{C}_{k-1}\}.$$

V_k wird also aufgespalten in den Raum, den die Basisfunktionen zu den Punkten in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ aufspannen, und in den dazu (bezüglich des Energie-Skalarproduktes a) orthogonalen Teilraum $\tilde{V}_{k-1}$, der von L_k abhängig ist, und die Grobgitterbasisfunktionen enthält. Besteht B_k aus den Hut-Basisfunktionen des Levels k, dann wird W_k aufgespannt von den Hut-Basisfunktionen zu den Punkten in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ und $\tilde{V}_{k-1}$ aus dazu a-orthogonalen Funktionen. Ähnliche orthogonale Aufspaltungen der finite Element Räume, die langsam Einzug in die Theorie der MG-Verfahren halten, werden bezüglich des L^2-Skalarproduktes in der Wavelettheorie betrachtet.

Setzt man die Aufspaltung des finite Elementraumes V_k rekursiv bezüglich gröberen Gittern fort, so erhält man eine Aufspaltung von V_k in a-orthogonale Teilräume gemäß

$$V_k = \tilde{V}_{k-1} \oplus_a \tilde{V}_{k-2} \oplus_a \ldots \oplus_a \tilde{V}_1 \oplus_a W_0.$$

Es ergeben sich also folgende Schlußfolgerungen:

1. In der hierarchischen MG-Methode aus [YSE83] haben wir als Transformation auf das hierarchische Basis-System, die ja die Prolongation implizit beeinhaltet, die Matrix $\bar{T}_k$ aus 89. Nun sehen wir aber, daß dies nur eine Näherung an die mit 93 gegebene Transformation darstellt. Statt

$$\bar{T}_k = \begin{pmatrix} I & \\ 0 & \bar{P}_{k-1}^k \end{pmatrix} \tag{98}$$

mit der Standard-Interpolation

$$\bar{P}_{k-1}^{k}{}^{*} = \begin{bmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 1/2 & 1 & 1/2 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{bmatrix} \tag{99}$$

als Prolongation müßte in einer „exakten“ Transformation

$$T_k = \begin{pmatrix} I & \\ 0 & P_{k-1}^k \end{pmatrix} \tag{100}$$

mit

$$P_{k-1}^k = \begin{pmatrix} -L_{11}^{-1} L_{12} \\ I \end{pmatrix} \tag{101}$$

statt $\bar{P}_{k-1}^k$ ausgeführt werden, die L_{11}^{-1} beinhaltet.

2. Es müßte eigentlich in der Prolongation

$$P_{k-1}^k := \begin{pmatrix} -L_{11}^{-1} L_{12} \\ I \end{pmatrix} \tag{102}$$

ausgeführt werden. Dies geschieht jedoch in mehr als einer Dimension – wie wir sehen werden – nur näherungsweise

   (a) mittels der Standard-Interpolation, oder

   (b) durch Näherungsformeln für die Prolongation 102, wie sie in Abschnitt 3.4 beschrieben werden.

3. Die durch die Transformation entstehenden hierarchischen finite Element Basisfunktionen (im Zwei-Level-Fall C_k) sind i.a. von der hierarchischen Basis nach [YSE83] verschieden. Sie sind (analog zur Prolongation) von den Steifigkeitsmatrizen der jeweiligen Level abhängig.

4. Bezüglich der Punkte in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ bleibt L_{11} erhalten. Ist also L_k durch die Diskretisierung einer Konvektions-Diffusionsgleichung entstanden, so sind die Punkte in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ zwar in Diagonalrichtung durch die Transformation entkoppelt, dennoch reicht auch nach der Transformation einfacher Gauß-Seidel als Glätter bezüglich L_{11} nicht aus, da L_{11} weiterhin einen Konvektionsanteil enthält. Vielmehr müssen andere Glätter, wie z.B. Gauß-Seidel in Stromrichtung oder unvollständige LU-Zerlegung (ILU) oder geeignete Linienglätter eingesetzt werden. Eine andere mögliche Lösung dieses Problems durch allgemeinere Transformationen, als die gerade beschriebene, deuten wir in Abschnitt 3.6 an.

5. Die mit diesen Verfahrenskomponenten gebildete Unterraumkorrektur (mit u der exakten Lösung des Problems)

$$u_k := u_k + P_{k-1}^k S_k^{-1} R_k^{k-1} L_k (u - u_k) \tag{103}$$

macht den Fehler $u-u_k$ a-orthogonal zum Unterraum W_k denn es gilt

$$P^k_{k-1}S_kR^{k-1}_kL_k = \begin{pmatrix} 0 & S_k \end{pmatrix}$$

und wegen $P^k_{k-1}w \in W_k$ damit

$$\begin{aligned}
(u-u_k-P^k_{k-1}S_k^{-1}R^{k-1}_kL_k(u-u_k), P^k_{k-1}w)_a &= \\
(u-u_k-\begin{pmatrix} 0 & S_k \end{pmatrix}(u-u_k), P^k_{k-1}w)_a &= \\
(R^{k-1}_kL_k(u-u_k-\begin{pmatrix} 0 & S_k \end{pmatrix}(u-u_k)), w) &= \\
((\begin{pmatrix} 0 & S_k \end{pmatrix}(u-u_k)-\begin{pmatrix} 0 & S_k \end{pmatrix}(u-u_k), w) = (0,w) &= 0.
\end{aligned}$$

Das durch die Transformation in die energieabhängige Basis C_k entstehende Gleichungssystem

$$D_k\tilde{u}_k = \tilde{f}_k \text{ mit } \tilde{f}_k = T^tf_k$$

bzw. ausgeschrieben mit $f_k = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}, \tilde{u}_k = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} L_{11} & 0 \\ 0 & S_k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 - L_{11}^{-1}L_{12}f_2 \\ f_2 \end{pmatrix}$$

spaltet das Problem in zwei unabhängige Teilprobleme, eines für die Unbekannten des Grobgitters Ω_k

$$S_ku_2 = f_2$$

und eines für die Unbekannten in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$

$$L_{11}u_1 = f_1 - L_{11}^{-1}L_{12}f_2.$$

Gilt $f_1 - L_{11}^{-1}L_{12} = 0$, dann ist die Lösung des Problems in der energieabhängigen Basis also durch $\begin{pmatrix} 0 \\ \hat{u}_2 \end{pmatrix}$ gegeben.

Erinnern wir uns an dieser Stelle noch einmal an Gleichung 94 die die Transformation von L_k^{-1} in die neue Basis beschreibt. Sie entstand durch Block-Gauß-Elimination der Feingitterunbekannten aus den Grobgittergleichungen und der Grobgitterunbekannten aus den Feingittergleichungen. Damit sehen wir, daß Hierarchisierung zusammen mit der Energieprolongation als Elimination der Feingitterunbekannten aus den Grobgittergleichungen interpretiert werden kann. Die exakten Energieprolongationen sind jedoch i.a. in MG-Verfahren nicht verwendbar, da sie keine lokalen Operatoren sind. Nähert man jedoch diese Prolongationen durch matrixabhängige Prolongationen – wie wir das im folgenden tun werden – so läßt sich Hierarchisierung zusammen mit matrixabhängiger Wahl der Prolongation als näherungsweise Elimination der Feingitterunbekannten interpretieren.

Bei der Bestimmung von genäherten Energieverfahrenskomponenten hilft uns die folgende Beobachtung.

In Abschnitt 3.2 hatten wir im eindimensionalen Fall festgestellt, daß sich die dort bestimmte matrixabhängige Prolongation in den Punkten aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ als (approximative) Invertierung des diskreten Feingitteroperators L_k interpretieren läßt. Mit der Energie-Prolongation gilt nun folgendes:

Gilt $\begin{pmatrix} 0 & I \end{pmatrix} P^k_{k-1} = I$ (d.h. die Prolongation ist in den Grobgitterpunkten als Identität definiert), so gilt:

$$\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} L_kP^k_{k-1} = 0 \Longleftrightarrow P^k_{k-1} = \begin{pmatrix} -L_{11}^{-1}L_{12} \\ I \end{pmatrix} \tag{104}$$

Damit sehen wir, daß die in Abschnitt 3.2.1 beschriebene operator- bzw. matrixabhängige Prolongation im eindimensionalen Fall mit der exakten Energieprolongation zusammenfällt und die im zweidimensionalen Fall in Abschnitt 3.2.2 vorgenommenen theoretischen Überlegungen zu Näherungen der Energieprolongation führen. Darüberhinaus folgt aus 104 daß eine energieabhängige Prolongation als lokale Inverse der Steifigkeitsmatrix bestimmt werden kann, wie wir das speziell für die Modellgleichung ja bereits in Abschnitt 3.2.1 getan haben.

Aus der hierarchischen Sichtweise läßt sich die Wahl der Prolongation als lokale Inverse der Steifigkeitsmatrix auch heuristisch leicht erklären. Dort soll die in den Feingitterpunkten bereits erzielte Näherung der Lösung nicht durch die Grobgitterlösung wieder zerstört werden, was genau durch diese Wahl verhindert wird.

Bemerkung: Wie bereits erwähnt lassen sich i.a. (abgesehen vom eindimensionalen Fall) die Energieprolongation und der auf dem Grobgitter durch die Galerkinapproximation entstehende Grobgittergeroperator nicht als Verfahrenskomponenten in MG-Algorithmen verwenden, da ihre Berechnung bedeutend zu aufwendig ist, und sie zudem i.a. keine lokalen Operatoren sind. Um in MG-Verfahren verwendbare matrixabhängige Näherungen der Energieprolongation zu bestimmen, läßt sich jedoch 104 verwenden, wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden.

3.4 Näherungen der Energie-Prolongation

Die Energie-Prolongation P_{k-1}^k kann in einem praktikablen MG-Verfahren i.a. nicht benutzt werden, da diese, wie auch das durch die Galerkinapproximation als Grobgittermatrix entstehende Schurkomplement S_k von L_k kein lokaler Operatorer mehr ist. Verwendung könnten obige Verfahrenskomponenten jedoch z.B. für diagonales L_{11} finden, da dann sowohl die Prolongation, als auch der über das Schurkomplement definierte Grobgitteroperator wieder lokale Operatoren sind.

Betrachtet man statt der „exakten“ Transformation mit der Matrix

$$T = \begin{pmatrix} I & -L_{11}^{-1}L_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

eine geeignete Näherung

$$\tilde{T} = \begin{pmatrix} I & U \\ 0 & I \end{pmatrix} \tag{105}$$

von T, so kann man in Analogie zur Energieprolongation P_{k-1}^k aus Gleichung 101 die Prolongation

$$\tilde{P}_{k-1}^k = \begin{pmatrix} U_k \\ I \end{pmatrix} \tag{106}$$

definieren, die dann eine Näherung von P_{k-1}^k darstellt.

Dann gilt

$$\tilde{T}_k^t L_k \tilde{T}_k = \begin{pmatrix} L_{11} & \epsilon_k \\ \epsilon_k^t & \tilde{S}_k \end{pmatrix} \tag{107}$$

mit

$$\epsilon_k = L_{11}U_k + L_{12} \tag{108}$$

$$\tilde{S}_k = L_{22} + L_{21}U_k + U_k^t L_{12} + U_k^t L_{11} U_k = S_k + \epsilon_k^t L_{11}^{-1} \epsilon_k. \tag{109}$$

Für $U_k \neq -L_{11}^{-1}L_{12}$ wird also nicht mehr der vollständige Eliminationseffekt – wie in Abschnitt 3.3.3 beschrieben – erzielt. Die Prolongation $\tilde{P}_{k-1}^k$ ist damit in den Feingitterpunkten nicht mehr die exakte lokale Inverse des Feingitteroperators, vielmehr gilt nach Gleichung 107

$$\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} L_k \tilde{P}^k_{k-1} = \epsilon_k. \tag{110}$$

Es ist jedoch auch gar nicht notwendig, den vollständigen Eliminationseffekt zu erzielen, da wir ja kein Eliminationsverfahren konstruieren wollen, sondern unsere Überlegungen dazu benutzen wollen, geeignete Prolongationen und Grobgitteroperatoren für MG-Algorithmen abzuleiten. Über die Galerkinapproximation mit der gestörten Prolongation $\tilde{P}^k_{k-1}$ statt P^k_{k-1} erhält man dann als Grobgitteroperator L_{k-1} ein gestörtes Schurkomplement $\tilde{S}_k$ von L_k, nämlich

$$L_{k-1} = \tilde{S}_k = S_k + \epsilon_k^t L_{11}^{-1} \epsilon_k,$$

wie man ebenfalls direkt aus Gleichung 107 ablesen kann.

Die Iterationsmatrix

$$I - \tilde{P}^k_{k-1} L_{k-1}^{-1} \tilde{R}^{k-1}_k L_k$$

macht zwar den Fehler nicht mehr exakt a-orthogonal zu Unterraum W_k, aber die entstehenden Verfahrenskomponenten lassen sich in der genäherten Form in MG-Algorithmen verwenden.

Bemerkung: Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf die Beschreibung von MG-Algorithmen, die mit standardvergröberten Gittern arbeiten. Die Matrixpartitionierungen und auch die anderen Betrachtungen dieses Abschnittes ließen sich jedoch auch bei einer beliebigen anderen Wahl der Grobgitterpunkte anwenden. Bei den im folgenden beschriebenen Näherungen der exakten energieabhängigen Transportoperatoren müßten an manchen Stellen der Approximation Gewichtungen mit den jeweiligen Abständen der auf den jeweiligen Gittern benachbarten Punkte eingefügt werden. Wir werden uns damit jedoch nicht näher befassen. Es sei nur darauf hingewiesen daß bei der sogenannten AMG-Methode eben auch die Auswahl der Grobgitterpunkte in Abhängigkeit von der Steifigkeitsmatrix des jeweiligen Levels getroffen wird.

Aus Gleichung 110 ersieht man, daß durch eine Forderung der Art

$$|\left(\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} L_k \tilde{P}^k_{k-1}\right)_{ij}| \leq \Delta_{ij}, \quad i,j = 1,\ldots,n_k, \quad \Delta_{ij} > 0 \tag{111}$$

ein Kriterium gegeben ist, die „Güte" der Approximation von P^k_{k-1} durch $\tilde{P}^k_{k-1}$ und von S_k durch $\tilde{S}_k$ mittels der Parameter Δ_{ij} zu steuern.

Wie für MG-Verfahren geeignete Prolongationen konkret gewonnen werden können, und was für Grobgitteroperatoren sich über die Galerkinapproximation ergeben, beschreiben wir in den folgenden Abschnitten.

3.4.1 Der eindimensionale Fall – Das HB-MG-Verfahren mit gewichteter Prolongation als direkter Löser

Der Feingitteroperator L_k sei durch den Dreipunktestern

$$L_k(x_i) = \begin{bmatrix} L_{-1}(x_i) & L_0(x_i) & L_1(x_i) \end{bmatrix} \tag{112}$$

gegeben. Die Unterteilung des feinen Gitters Ω_k in Grobgitteranteil Ω_{k-1} und Grob-ohne Feingitteranteil $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ entspricht in einer Dimension einer „red-black"-Numerierung der Unbekannten. Dann hängen die Feingitterwerte jeweils nur von den beiden benachbarten Grobgitterwerten ab. Mit L_{11} ist dann auch L_{11}^{-1} diagonal, d.h. die Prolongation wie auch der Grobgitteroperator $L_{k-1} = S_k$ sind lokale Operatoren. Über die homogene Gleichung $\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} L_k P_{k-1}^k = 0$ bzw. explizit über

$$
\begin{gathered}
L_{11}^{-1} L_{12} = \\
\begin{pmatrix}
\ddots & & & & \\
& L_0^{-1}(x_{i-2}) & & & \\
& & L_0^{-1}(x_i) & & \\
& & & L_0^{-1}(x_{i+2}) & \\
& & & & \ddots
\end{pmatrix}
\end{gathered}
$$

$$
\begin{pmatrix}
\ddots & & & & & \\
& L_{-1}(x_{i-2}) & L_1(x_{i-2}) & & & \\
& & L_{-1}(x_i) & L_1(x_i) & & \\
& & & L_{-1}(x_{i+2}) & L_1(x_{i+2}) & \\
& & & & & \ddots
\end{pmatrix}
\tag{113}
$$

$$
= \begin{pmatrix}
\ddots & & & & & \\
& \frac{L_{-1}(x_{i-2})}{L_0(x_{i-2})} & \frac{L_1(x_{i-2})}{L_0(x_{i-2})} & & & \\
& & \frac{L_{-1}(x_i)}{L_0(x_i)} & \frac{L_1(x_i)}{L_0(x_i)} & & \\
& & & \frac{L_{-1}(x_{i+2})}{L_0(x_{i+2})} & \frac{L_1(x_{i+2})}{L_0(x_{i+2})} & \\
& & & & & \ddots
\end{pmatrix}
$$

mit $x_{i-2}, x_i, x_{i+2} \in \Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$, erhalten wir für die Energieprolongation P_{k-1}^k z.B. im Punkt $x_{i+1} \in \Omega_{k-1}$ die Sterndarstellung

$$
{P_{k-1}^k}^*(x_{i+1}) = \begin{bmatrix} -\frac{L_1(x_i)}{L_0(x_i)} & 1 & -\frac{L_{-1}(x_{i+2})}{L_0(x_{i+2})} \end{bmatrix}. \tag{114}
$$

Die Transformation von L_k mit T_k entspricht also der Gauß-Elimination bezüglich der Unbekannten in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$.

Definieren wir rekursiv die Prolongationen $P_{l-1}^l, 1 \le l < k$ analog zu P_{k-1}^k und die Transformationsmatrizen T_l durch

$$
T_l = \begin{pmatrix} I & \\ 0 & P_{l-1}^l \end{pmatrix} \tag{115}
$$

so erhalten wir also durch die Transformation von L_k in die Basis der zugehörigen energieabhängigen hierarchischen Nichtstandard-Finite-Element-Basen eine vollständige Diagonalisierung der Feingittermatrix L_k. Das heißt, das hierarchische Mehrgitterverfahren wird mit den oben angegebenen Prolongationen zu einem direkten Löser.

3.4.2 Der zweidimensionale Fall

Wie schon bei der Betrachtung der Modellgleichung in Abschnitt 3.2 bemerkt wurde, kann die eindimensionale Betrachtung zur Wahl der Prolongation nicht direkt auf den zweidimensionalen Fall übertragen werden, da die Punkte aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ über das Gleichungssystem in $\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \end{pmatrix}$ sowohl mit Grobgitterpunkten, als auch mit benachbarten Feingitterpunkten aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ gekoppelt sind. L_{11} ist also im Gegensatz zum eindimensionalen Fall keine Diagonalmatrix mehr.

Die Energie-Prolongation ist damit kein lokaler Operator mehr, und benötigt außerdem die Berechnung von L_{11}^{-1}. Damit ist das Verfahren in dieser Form nicht mehr praktikabel.

Statt dessen werden Näherungen für die Energie-Prolongation verwendet, die, wie auch die durch die Galerkinapproximation entstehenden Grobgitteroperatoren, lokale Operatoren sind, so daß sie durch z.B. 9-Punkte-Sterne darstellbar sind.

Im folgenden werden wir mehrere Verfahren vorstellen, die diese Forderungen erfüllen.

Ersetzen wir das Gleichungssystem in $\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \end{pmatrix}$, das ja durch 9-Punkte-Sterne darstellbar sein soll, und die Gleichungen für die Punkte in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ enthält, durch ein verändertes Gleichungssystem $\begin{pmatrix} \tilde{L}_{11} & \tilde{L}_{12} \end{pmatrix}$, das wieder durch 9-Punkte-Sterne darstellbar sein soll, aber die Bedingungen

- $\tilde{L}_{11}$ ist „leicht" zu invertieren
- $\tilde{L}_{11}^{-1}\tilde{L}_{12}$ ist eine gute Näherung an $L_{11}^{-1}L_{12}$
- $\begin{pmatrix} -\tilde{L}_{11}^{-1}\tilde{L}_{12} \\ I \end{pmatrix}$ ist ein lokaler Operator,

erfüllt, dann läßt sich ein Prolongationsoperator $\tilde{P}_{k-1}^k$ durch

$$\tilde{P}_{k-1}^k = \begin{pmatrix} -\tilde{L}_{11}^{-1}\tilde{L}_{12} \\ I \end{pmatrix} \tag{116}$$

definieren. D.h. die Näherung für die Energie-Prolongation wird als exakte Energie-Prolongation einer defektbehafteten Diskretisierung

$$\tilde{L}_k = \begin{pmatrix} \tilde{L}_{11} & \tilde{L}_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}$$

des zu lösenden Problems berechnet, die gegenüber der Diskretisierung L_k des Problems veränderte Feingittergleichungen aufweisen.

Für $k > 0$ läßt sich jedes Gitter Ω_k in vier disjunkte Teilgitter zerlegen:

$$\begin{aligned} \Omega_k^{00} &:= \{(x,y) \in \Omega_k : x = ih_k, y = jh_k, i,j \in \mathrm{Z}, i \text{ gerade}, j \text{ gerade}\} = \Omega_{k-1} \\ \Omega_k^{10} &:= \{(x,y) \in \Omega_k : x = ih_k, y = jh_k, i,j \in \mathrm{Z}, i \text{ ungerade}, j \text{ gerade}\} \\ \Omega_k^{01} &:= \{(x,y) \in \Omega_k : x = ih_k, y = jh_k, i,j \in \mathrm{Z}, i \text{ gerade}, j \text{ ungerade}\} \\ \Omega_k^{11} &:= \{(x,y) \in \Omega_k : x = ih_k, y = jh_k, i,j \in \mathrm{Z}, i \text{ ungerade}, j \text{ ungerade}\}. \end{aligned} \tag{117}$$

Daraus ensteht die Matrixpartitionierung

$$L_k = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ l_{21} & l_{22} & l_{23} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} \\ l_{21} & l_{22} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} l_{13} \\ l_{23} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} l_{31} & l_{32} \end{pmatrix} & l_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}, \tag{118}$$

wobei $\begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \end{pmatrix}$ die Gleichungen bezüglich der Punkte in Ω^{11} enthalte, $\begin{pmatrix} l_{21} & l_{22} & l_{23} \end{pmatrix}$ die zu $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ und $\begin{pmatrix} l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix}$ die zu den Grobgitterpunkten $\Omega^{22} = \Omega_{k-1}$ gehörigen Gleichungen enthalte.

Dann gilt falls L_k durch einen 9-Punkte-Stern darstellbar ist:

- l_{11} ist diagonal
- l_{33} ist diagonal

Im folgenden werden wir immer annehmen, daß L_k durch 9-Punkte-Sterne darstellbar ist.

Bemerkung: Im Falle eines 5-Punkte-Sternes für L_k läßt sich die Knotenmenge „red-black" partitionieren. Verwendet man außerdem „red-black"-Vergröberung, dann ist L_{11} diagonal, und die Prolongation läßt sich direkt aus 102 bestimmen.

3.4.3 Einige Prolongationsoperatoren im 2-D Fall

Prolongationsoperator I Die einfachste Möglichkeit, die obigen Forderungen zu erfüllen, besteht darin, $\tilde{L}_{11}$ als Diagonalmatrix zu wählen. Dies läßt sich z.B. dadurch erreichen, daß man Beziehungen zwischen Unbekannten in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ durch lineare Interpolation eliminiert.

Betrachten wir z.B. einen Gitterpunkt x_i aus Ω_k^{10}. Die Elimination von Kopplungen mit Punkten aus $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ erreicht man dann, indem man den Stern

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1} & L_{0,1} & L_{1,1} \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ L_{-1,-1} & L_{0,-1} & L_{1,-1} \end{bmatrix}$$

von L_k durch den Stern

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1}/2 + L_{0,1}/4 & 0 & L_{1,1}/2 + L_{0,1}/4 \\ 0 & 0 & 0 \\ \begin{matrix} L_{-1,0} + (L_{-1,1} + L_{-1,-1})/2 \\ +(L_{0,-1} + L_{0,1})/4 \end{matrix} & L_{0,0} & \begin{matrix} L_{1,0} + (L_{1,1} + L_{1,-1})/2 \\ +(L_{0,-1} + L_{0,1})/4 \end{matrix} \\ 0 & 0 & 0 \\ L_{-1,-1}/2 + L_{0,-1}/4 & 0 & L_{1,-1}/2 + L_{0,-1}/4 \end{bmatrix}$$

ersetzt, d.h. eine Unbekannte $u(x,y)$ in Ω^{10} wird ersetzt durch $\frac{1}{2}(u(x,y+h) + u(x,y-h))$, eine Unbekannte $u(x,y)$ in Ω^{11} wird ersetzt durch $\frac{1}{4}(u(x-h,y-h) + u(x-h,y+h) + u(x+h,y-h) + u(x+h,y+h))$. Analog geht man in den Punkten aus Ω^{01} vor. In den Punkten aus Ω^{11} führt man die Substitution

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1} & L_{0,1} & L_{1,1} \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ L_{-1,-1} & L_{0,-1} & L_{1,-1} \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} L_{-1,1} + \frac{L_{0,1}+L_{-1,0}}{2} & 0 & L_{1,1} + \frac{L_{0,1}+L_{1,0}}{2} \\ 0 & L_{0,0} & 0 \\ L_{-1,-1} + \frac{L_{0,-1}+L_{-1,0}}{2} & 0 & L_{1,-1} + \frac{L_{0,-1}+L_{1,0}}{2} \end{bmatrix}$$

aus. Diese Sterne definieren dann die neuen Gleichungen

$$\begin{pmatrix} \tilde{L}_{11} & \tilde{L}_{12} \end{pmatrix} = \left(\begin{pmatrix} \tilde{l}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{l}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{l}_{13} \\ \tilde{l}_{23} \end{pmatrix} \right)$$

mit diagonalem $\tilde{l}_{11}$ und $\tilde{l}_{22}$, mittels denen man über 116 die Prolongation $\tilde{P}_{k-1}^k$ definieren kann, die dann ein lokaler Operator ist. Genauer gesagt entstehen 17-Punkte Sterne der Form

$$\begin{bmatrix} & * & & * & \\ * & * & * & * & * \\ & * & * & * & \\ * & * & * & * & * \\ & * & & * & \end{bmatrix}.$$

Taylorentwicklung zeigt, daß die Differenz zwischen den ursprünglichen Sternen in $\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} \tilde{L}_{11} & \tilde{L}_{12} \end{pmatrix}$ von der Ordnung $O(h)$ ist.

Man erhält damit eine dreistufige Prolongation: Zuerst führe man die Injektion bezüglich der Grobgitterpunkte aus, dann interpoliere man aus diesen durch die Anwendung von $-\tilde{l}_{22}^{-1}\tilde{l}_{23}$ die Punkte in $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$, und schließlich aus den damit bestimmten Punkten in $\Omega^{00} \cup \Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ die Werte in Ω^{11} mittels $-\tilde{l}_{11}^{-1}\tilde{l}_{13}$.

Bezogen auf die Forderung nach der Wahl der Prolongation in den Punkten aus $\Omega^{00} \cup \Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ als lokale Inverse der Feingittermatrix scheint diese Wahl der Prolongation wenig vorteilhaft, denn es gilt

$$\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} L_k \tilde{P}_{k-1}^k = \begin{pmatrix} -l_{11}\tilde{l}_{11}^{-1}\tilde{l}_{12} - l_{12}\tilde{l}_{22}^{-1}\tilde{l}_{23} + l_{13} \\ -l_{21}\tilde{l}_{11}^{-1}\tilde{l}_{13} - l_{22}\tilde{l}_{22}^{-1}\tilde{l}_{23} + l_{23} \end{pmatrix}, \tag{119}$$

und für allgemeine Operatoren dürfte dies weit von einer Elimination der Grobgitterunbekannten aus den Feingittergleichungen entfernt sein. Deswegen ist zu vermuten, daß MG-Algorithmen, die diese Prolongation verwenden keine besonders guten Konvergenzraten erzielen.

Bemerkung: Bedenkt man, daß l_{11} diagonal ist, dann läßt sich für die Wahl

$$\tilde{L}_{11} = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} \\ 0 & \tilde{l}_{22} \end{pmatrix} \tag{120}$$

mit $\tilde{l}_{22}$ einer Diagonalmatrix, die Inverse direkt zu

$$\tilde{L}_{11}^{-1} = \begin{pmatrix} l_{11}^{-1} & -l_{11}^{-1}l_{12}\tilde{l}_{22}^{-1} \\ 0 & \tilde{l}_{22}^{-1} \end{pmatrix} \tag{121}$$

angeben. Dann kann man die Prolongation

$$\tilde{P}_{k-1}^k = \begin{pmatrix} -\tilde{L}_{11}^{-1}\begin{pmatrix} l_{13} \\ \tilde{l}_{23} \end{pmatrix} \\ I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -l_{11}^{-1}(l_{13} - l_{12}\tilde{l}_{22}^{-1}\tilde{l}_{23}) \\ -\tilde{l}_{22}^{-1}\tilde{l}_{23} \\ I \end{pmatrix}$$

als Energieprolongation der defektbehafteten Diskretisierung

$$\tilde{L}_k = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ 0 & \tilde{l}_{22} & \tilde{l}_{23} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \tag{122}$$

definieren. Man erhält also wieder eine dreistufige Prolongation:
Zuerst führe man die Injektion bezüglich der Grobgitterpunkte aus, dann interpoliere man aus diesen die Punkte in $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ mittels $-\tilde{l}_{22}^{-1}\tilde{l}_{23}$, und schließlich aus den damit bestimmten Punkten in $\Omega^{00} \cup \Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ die Punkte aus Ω^{11} durch die Anwendung von $-l_{11}^{-1}(l_{13} - l_{12}\tilde{l}_{22}^{-1}\tilde{l}_{23})$.

Da sich $\tilde{L}_k$ nur in den zu den Punkten aus $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ gehörigen Gleichungen vom exakten Feingitteroperator L_k unterscheidet, erhält man damit

$$\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} L_k \tilde{P}_{k-1}^k = \begin{pmatrix} 0 \\ -l_{21}l_{11}^{-1}(l_{13} - l_{12}\tilde{l}_{22}^{-1}\tilde{l}_{23}) + (I - \tilde{l}_{22}^{-1}l_{22})l_{23} \end{pmatrix}. \tag{123}$$

Der Fehler relativ zur Energie-Prolongation wird also nur in den Punkten von $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ induziert, wohingegen in Ω^{11} die Prolongation wie bei der Energieprolongation als Inverse von L_k gewählt wird.

Wir wollen hier drei Möglichkeiten zur Bestimmung einer solchen defektbehafteten Diskretisierung anführen.

Prolongationsoperator *II* Modifiziert man die Gleichungen in $\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \end{pmatrix}$ indem man die Substitutionen

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1} & L_{0,1} & L_{1,1} \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ L_{-1,-1} & L_{0,-1} & L_{1,-1} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ in } \Omega^{10},$$

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1} & L_{0,1} & L_{1,1} \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ L_{-1,-1} & L_{0,-1} & L_{1,-1} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} 0 & L_{0,1} & 0 \\ 0 & L_{0,0} & 0 \\ 0 & L_{0,-1} & 0 \end{bmatrix} \text{ in } \Omega^{01}$$

durchführt, so erhält man die in [ALC81] beschriebenen Prolongationsoperatoren.

Die Prolongation nach Dendy Führt man die Substitutionen

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1} & L_{0,1} & L_{1,1} \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ L_{-1,-1} & L_{0,-1} & L_{1,-1} \end{bmatrix} \longrightarrow \left[\begin{array}{c|c|c} 0 & 0 & 0 \\ \hline L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ +L_{-1,-1} & +L_{0,-1} & +L_{1,-1} \\ +L_{-1,1} & +L_{0,1} & +L_{1,1} \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array}\right] \text{ in } \Omega^{10},$$

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1} & L_{0,1} & L_{1,1} \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ L_{-1,-1} & L_{0,-1} & L_{1,-1} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} 0 & L_{0,1} + L_{-1,1} + L_{1,1} & 0 \\ 0 & L_{0,0} + L_{-1,0} + L_{1,0} & 0 \\ 0 & L_{0,-1} + L_{-1,-1} + L_{1,-1} & 0 \end{bmatrix} \text{ in } \Omega^{01}$$

aus, so erhält man die in [DEN83] beschriebenen Prolongationsoperatoren. Diese Prolongation, allerdings nur für 5-Punkte-Sterne, findet man auch in [FUH94].

Die Prolongation nach de Zeeuw Definiert man

$$d_n := max(|L_{-1,1} + L_{0,1} + L_{1,1}|, |L_{-1,1}|, |L_{1,1}|),$$

$$d_s := max(|L_{-1,-1} + L_{0,-1} + L_{1,-1}|, |L_{-1,-1}|, |L_{1,-1}|),$$
$$d_o := max(|L_{-1,0} + L_{-1,-1} + L_{-1,1}|, |L_{-1,1}|, |L_{-1,-1}|),$$
$$d_w := max(|L_{1,0} + L_{1,1} + L_{1,-1}|, |L_{1,-1}|, |L_{1,1}|)$$

und ersetzt damit die Sterne in Ω^{10} bzw. Ω^{01} mit der folgenden Substitution

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1} & L_{0,1} & L_{1,1} \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ L_{-1,-1} & L_{0,-1} & L_{1,-1} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ d_w & d_w + d_o & d_o \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ in } \Omega^{10},$$

$$\begin{bmatrix} L_{-1,1} & L_{0,1} & L_{1,1} \\ L_{-1,0} & L_{0,0} & L_{1,0} \\ L_{-1,-1} & L_{0,-1} & L_{1,-1} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} 0 & d_n & 0 \\ 0 & d_n + d_s & 0 \\ 0 & d_s & 0 \end{bmatrix} \text{ in } \Omega^{01},$$

so erhält man die in [ZEE90] beschriebenen Prolongationsoperatoren. In [ZEE90] werden geeignete matrixabhängige Prolongationen für allgemeinere Matrizengleichungen betrachtet, als wir es hier tun, aber im Falle einer symmetrischen L-Matrix L_k (d.h. für $L_k = (l_{ij})_{i;j=1}^{n_k,n_k}$ gilt $l_{ii} > 0$ und $l_{ij} \leq 0$ für $i \neq j$) reduziert sich die Prolongation aus [ZEE90] auf die oben beschriebene.

Fassen wir in einer leicht veränderten Betrachtungsweise zusammen, wie die letzten drei Typen von Prolongationsoperatoren gewonnen wurden:
In Punkten aus Ω_k^{00} wird die Prolongation als Identität definiert. Dann lassen sich durch Rückführung auf den eindimensionalen Fall die Gewichte der Prolongation in

den Punkten Ω_k^{10} und Ω_k^{01} bestimmen, und zwar folgendermaßen: Durch geeignetes Zeilen- und Spaltenweisen aufsummieren des 9-Punkte-Sternes definiert man eindimensionale 3-Punkte-Sterne L_k^x und L_k^y, und verwendet dann die eindimensionale Prolongation aus 114.

Wie oben beschrieben verwendet der Ansatz in [ALC81] die Sterne

$$L_k^x = \begin{bmatrix} L_{-10} & -(L_{-10}+L_{10}) & L_{10} \end{bmatrix} \text{ für } (x_i, y_j) \in \Omega_k^{10} \tag{124}$$

und

$$L_k^y = \begin{bmatrix} L_{01} \\ -(L_{0-1}+L_{01}) \\ L_{0-1} \end{bmatrix} \text{ für } (x_i, y_j) \in \Omega_k^{01}. \tag{125}$$

Ein anderer Ansatz [DEN83] (vergleiche 3.4.3) benutzt mit

$$L_m^x := \sum_{n=-1}^{1} L_{m,n} \quad m \in \{-1,0,1\} \text{ und } L_n^y = \sum_{m=-1}^{1} L_{m,n} \quad n \in \{-1,0,1\}$$

die Sterne

$$L_k^x(x_i, y_j) = \begin{bmatrix} L_{-1}^x & L_0^x & L_1^x \end{bmatrix} \text{ für } (x_i, y_j) \in \Omega_k^{10}, \tag{126}$$

$$L_k^y(x_i, y_j) = \begin{bmatrix} L_{-1}^y \\ L_0^y \\ L_1^y \end{bmatrix} \text{ für } (x_i, y_j) \in \Omega_k^{01}. \tag{127}$$

Mit Hilfe dieser 3-Punkte-Sterne ergibt sich mit 114 die Prolongation in den Punkten Ω_k^{10} und Ω_k^{01}. Damit ist P_{k-1}^k in den Punkten aus $\Omega_k^{00} \cup \Omega_k^{10} \cup \Omega_k^{01}$ festgelegt. Die Prolongation in einem Punkt aus Ω_k^{11} wird dann wieder aus der homogenen Differentialgleichung

$$(L_k \tilde{P}_{k-1}^k u_{k-1})(x_i, y_j) = 0 \tag{128}$$

berechnet.

Erinnern wir uns an dieser Stelle an Abschnitt 3.2.1 und 3.2.2, in denen wir speziell für die Modellgleichung theoretische Möglichkeiten zur Bestimmung operatorabhängiger finite Element Basisfunktionen und, damit verbunden, operatorabhängiger Prolongationen anführten. Vergleicht man die dort entwickelten Ideen mit den hier beschriebenen, so sieht man, daß die hier angeführten matrixabhängigen Prolongationen genau den dort durch Betrachtung des kontinuierlichen Falles entwickelten entsprechen. Die Randbedingungen und damit die Prolongationsgewichte in den Punkten aus $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ wurden wie hier durch Rückführung auf den eindimensionalen Fall bestimmt. Die Prolongation in den Punkten aus Ω^{11} wurde wie hier durch exaktes Lösen der homogenen Differentialgleichung mit den dann vorgegebenen Randbedingungen (hier wie dort die Lösung der eindimensionalen Probleme) bestimmt. Verschiedene Varianten der eindimensionalen Probleme führen zu den verschiedenen Prolongationen.

Für allgemeinere Differentialgleichungen als die Modellgleichung sind noch weitergehende Techniken bei der Bildung der eindimensionalen 3-Punkte-Sterne notwendig. Eine solche Technik findet man, wie bereits erwähnt, z.B. in [ZEE90].

3.5 Die Grobgitteroperatoren

Durch die im letzten Abschnitt definierten Prolongationen und Restriktionen lassen sich über die Galerkinapproximation Grobgitteroperatoren definieren, die Näherungen des Schurkomplements der Feingittermatrix darstellen.

Es gibt jetzt zwei Möglichkeiten, die Grobgitteroperatoren zu definieren:

- Der Grobgitteroperator wird als exaktes Schurkomplement der veränderten Feingittergleichungen, wie sie zur Bestimmung der Prolongationen benutzt wurden, gewählt:
$$L_{k-1} := \tilde{R}_k^{k-1} \tilde{L}_k \tilde{P}_{k-1}^k \tag{129}$$
D.h. die Galerkinapproximation wird angewandt auf defektbehaftete Feingittergleichungen. Dann gilt
$$L_{k-1} = L_{22} - L_{21}\tilde{L}_{11}^{-1}\tilde{L}_{12} = S_k - L_{21}L_{11}^{-1}\epsilon_k,$$
wobei wiederum S_k das Schurkomplement von L_k bezeichne, und es gelte $\epsilon_k := -L_{11}\tilde{L}_{11}^{-1}\tilde{L}_{12} + L_{12}$.
- Der Grobgitteroperator entsteht durch die Galerkinapproximation angewandt auf die Feingittermatrix L_k, also
$$L_{k-1} := \tilde{R}_k^{k-1} L_k \tilde{P}_{k-1}^k. \tag{130}$$
Dann gilt
$$L_{k-1} = S_k + \epsilon_k^t L_{11}^{-1}\epsilon_k.$$

In beiden Fällen ist mit den oben beschriebenen Prolongationen der entstehende Grobgitteroperator L_{k-1} wieder ein 9-Punkte-Stern, also ein lokaler Operator. Damit können die Verfahren zur Bestimmung von matrixabhängigen Prolongationen und Grobgitteroperatoren rekursiv auch für gröbere Gitter angewandt werden.

Bemerkung I: Die defektbehaftete Diskretisierung $\tilde{L}_k$ des betrachteten Problems läßt sich schreiben als
$$\tilde{L}_k = \begin{pmatrix} \tilde{L}_{11} & \tilde{L}_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{I} & 0 \\ L_{21}\tilde{L}_{11}^{-1} & \tilde{S}_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{L}_{11} & \tilde{L}_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix} =: LU$$
Damit haben wir eine unvollständige Block-LU-Zerlegung von L_k in der Form
$$L_k = LU + R_k \tag{131}$$
mit der Residuenmatrix
$$R_k = \begin{pmatrix} L_{11} - \tilde{L}_{11} & L_{12} - \tilde{L}_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{132}$$
Wir benutzten die defektbehafteten Gleichungen bisher, um Prolongationen zu bestimmen, für die galt
$$\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} \tilde{L}_k \tilde{P}_{k-1}^k = 0, \tag{133}$$
und damit näherungsweise
$$\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} L_k \tilde{P}_{k-1}^k \approx 0.$$
Genau betrachtet galt
$$\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} L_k \tilde{P}_{k-1}^k = \begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} (\tilde{L}_k + R_k)\tilde{P}_{k-1}^k = \epsilon_k \neq 0.$$
Stattdessen kann man auch eine unvollständige LU-Zerlegung der Art $L_k = LU + R_k$ betrachten, in der für die Elemente r_{ij} von R_k gelten soll $|r_{ij}| < \Delta_{ij}$, mit einer geeigneten Toleranzgrenze Δ_{ij}. Wählt man Δ_{ij} geeignet (so daß die entstehenden Matrizen L bzw. U wiederum dünn besetzt sind) und setzt dieses Vorgehen rekursiv auf die gröberen Gitter fort, und verwendet dann LU als Vorkonditionierer von L_k,

dann entsteht eine Matrix mit der Kondition $O(1)$. Sowohl die Besetzungstruktur der unvollständigen Zerlegung, als auch die Größe der Einträge in $R_k = L_k - LU$ werden durch die Toleranzgrenze, die für die einzelnen Blöcke der Matrizen verschieden gewählt wird, gesteuert. Für nähere Informationen dazu siehe [PLO93].

Bemerkung II: Bei allen bisher betrachteten Transformationen bleibt bezüglich der Punkte des Feingitters, die nicht auch im nächstgröberen Gitter enthalten sind, die Matrix L_{11} erhalten. Damit gilt, wie wir bereits erwähnten, folgendes: Ist L_k die Diskretisierung eines Konvektions-Diffusionsproblems, so ist auch nach der Transformation die Konvektion in der Matrix L_{11} weiter enthalten, d.h. zur Lösung der Gleichungen in diesen Punkten muß auch nach der Transformation ein Iterationsverfahren angewandt werden, daß für Konvektions-Diffusionsprobleme geeignet ist, wie z.B. ILU oder Gauß-Seidel in Stromrichtung. Deswegen erweitern wir die bisherigen Betrachtungen im folgenden Abschnitt, indem wir allgemeinere Transformationen als die in Abschnitt 3.3.3 eingeführte Energietransformation betrachten, die sich nicht auf eine Transformation der Grobgitterbasisfunktionen beschränken.

3.6 Die allgemeine Transformation

Bisher hatten wir als Transformationen der finite Element Basisfunktionen, die implizit ja die Prolongationen und Restriktionen enthalten, stets nur symmetrische Transformationen mit Matrizen der Form

$$T = \begin{pmatrix} I & * \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

betrachtet, mit denen wir die Steifigkeitsmatrix L_k von links und von rechts transformierten, d.h. sowohl die Basisfunktionen des Testraumes, als auch die des Ansatzraumes wurden der gleichen Transformation unterzogen. Es ist jedoch nicht notwendig, für Ansatz- und Testraum die gleichen Basisfunktionen zu verwenden. Außerdem ließen wir bisher immer die zu den Punkten in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ gehörigen Basisfunktionen unverändert, was eine ebenfalls nicht notwendige Einschränkung der vorhandenen Freiheitsgrade darstellt.

Die Forderungen, die eine Transformation erfüllen muß sind:

1. Nicht das Schurkomplement S_k der Steifigkeitsmatrix L_k soll als Grobgitteroperator entstehen, sondern ein lokaler Operator d.h. der auf dem groben Gitter entstehende diskrete Operator, soll durch z.B. einen 9-Punkte-Stern beschreibbar sein. Damit zusammenhängend sollen auch die durch die Transformation implizit beschriebenen Prolongationen und Restriktionen lokale Operatoren sein.

2. Die durch die Transformation entstehende Matrix soll Block-a-orthogonal sein, also Block-Diagonal-Gestalt haben oder zumindest Block-Dreiecksgestalt besitzen.

Betrachten wir also den allgemeinen Zugang für eine gleichzeitige Rechts- und Linkstransformation der Steifigkeitsmatrix:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & F \\ G & H \end{pmatrix} =$$

$$\left(\begin{array}{c|c} AL_{11}E + AL_{12}G & AL_{11}F + AL_{12}H \\ +BL_{21}E + BL_{22}G & +BL_{21}F + BL_{22}H \\ \hline CL_{11}E + CL_{12}G & CL_{11}F + CL_{12}H \\ +DL_{21}E + DL_{22}G & +DL_{21}F + DL_{22}H \end{array} \right). \tag{134}$$

Aus der Forderung 2 erhalten wir die Bedingungen:

$$CL_{11}E+CL_{12}G+DL_{21}E+DL_{22}G = 0 \text{ und } AL_{11}F+AL_{12}H+BL_{21}F+BL_{22}H = 0. \tag{135}$$

Durch diese allgemeine Transformation wird die Zahl der zur Verfügung stehenden Freiheitsgrade gegenüber den bisher betrachteten Transformationen wesentlich erhöht, und daher besteht die Hoffnung, durch geeignete Wahl der Freiheitsgrade, robustere und stabilere Algorithmen zu gewinnen.

Ein erster Ansatz in diese Richtung wird in [REU94], wenn auch nur implizit in der hier verwendeten Art der Darstellung, beschrieben. Dort wird eine einseitige Transformation der Art

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} L_k \begin{pmatrix} I & -L_{11}^{-1}L_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

verwendet. Das heißt, nur die Basisfunktionen des Ansatzraumes werden einer Transformation analog zu der, die wir in Abschnitt 3.3.3 beschrieben haben, unterzogen. Definiert man

$$R_1 := \begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix}, R_2 := \begin{pmatrix} 0 & I \end{pmatrix}, P_1 := \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}, P_2 := \begin{pmatrix} -L_{11}^{-1}L_{12} \\ I \end{pmatrix},$$

und

$$S_k := L_{22} - L_{21}L_{11}^{-1}L_{12}$$

(das Schurkomplement von L_k), so basiert die in [REU94] beschriebene MG-Methode auf der Zerlegung

$$(I - P_2S_k^{-1}R_2L_k)(I - P_1L_{11}^{-1}R_1L_k) = 0. \tag{136}$$

Durch Approximation von P_2 durch die erste Prolongation, die in Abschnitt 3.4.3 beschrieben wurde, und von S_k durch $\tilde{S}_k := L_{22} - L_{21}\tilde{L}_{11}^{-1}\tilde{L}_{12}$ wie ebenfalls dort beschrieben, erhält man die in [REU94] studierte MG-Methode mit der Iterationsmatrix (beschränkt auf zwei Level)

$$(I - \tilde{P}_2\tilde{S}_k^{-1}R_2L_k)(I - P_1L_{11}^{-1}R_1L_k) = 0. \tag{137}$$

In ähnlicher Weise impliziert eine allgemeinere Transformation, die die oben genannten Bedingungen erfüllt, mit den Definitionen

$$R_1 := \begin{pmatrix} A & B \end{pmatrix}, R_2 := \begin{pmatrix} C & D \end{pmatrix}, P_1 := \begin{pmatrix} E \\ G \end{pmatrix}, P_2 := \begin{pmatrix} F \\ H \end{pmatrix},$$

$M := AL_{11}E+AL_{12}G+BL_{21}E+BL_{22}G, N := CL_{11}F+CL_{12}H+DL_{21}F+DL_{22}H$

eine Iterationsmatrix

$$(I - P_2N_k^{-1}R_2L_k)(I - P_1M^{-1}R_1L_k) = 0. \tag{138}$$

So läßt sich z.B. die Energie-Transformation mit einem Glätter für die Gitterpunkte in $\Omega^{11} \cup \Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ kombinieren, indem die Transformationsmatrix

$$T = \begin{pmatrix} I & -L_{11}^{-1}L_{21} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

durch

$$T = \begin{pmatrix} A & -L_{11}^{-1}L_{21} \\ 0 & I \end{pmatrix},$$

mit einem Vorkonditionierer A für L_{11}, ersetzt wird. Dann ensteht als transformierte Matrix nämlich

$$T^t L_k T = \begin{pmatrix} A^t L_{11} A & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix}, \tag{139}$$

mit einer von rechts und von links vorkonditionierten Matrix $A^t L_{11} A$.

Bemerkung: Die bisher verwendete Betrachtungsweise, in der wir über die Galerkinapproximation Grobgitteroperatoren bestimmt haben, läßt sich auch umkehren. Nehmen wir an, es sei ein durch ein geeignetes Diskretisierungsverfahren entstehender Grobgitteroperator L_{k-1} gegeben (z.B. durch [ZEE90]).

Wie sind jetzt die Prolongation $P = \begin{pmatrix} F \\ H \end{pmatrix}$ und die Restriktion $R = \begin{pmatrix} C & D \end{pmatrix}$ bzw. die Transformationsmatrizen zu wählen, damit

$$\begin{pmatrix} * & 0 \\ 0 & L_{k-1} \end{pmatrix}, \tag{140}$$

mit

$$R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k = L_{k-1}, \tag{141}$$

durch die Transformation entsteht?

Betrachten wir dazu die allgemeine Transformation

$$T = \begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix}, \tag{142}$$

so erhalten wir die zwei Bedingungen

$$(C^t L_{11} + D^t L_{21})C + (C^t L_{12} + D^t L_{22})D = L_{k-1} \text{ und} \tag{143}$$

$$(C^t L_{11} + D^t L_{21})A + (C^t L_{12} + D^t L_{22})B = 0. \tag{144}$$

Die erste sorgt dafür, daß mit dem Galerkinansatz und der allgemeinen Prolongation $P_{k-1}^k = \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$ als Grobgitteroperator gerade L_{k-1} entsteht, die zweite sorgt für das Verschwinden der Außerdiagonalblöcke durch die Transformation $T^t L_k T$. Sind C und D durch 143 bestimmt, und ist $(C^t L_{12} + D^t L_{22})$ invertierbar, so ergibt sich aus Forderung 144

$$B = B(A, C, D) = -(C^t L_{12} + D^t L_{22})^{-1}(C^t L_{11} + D^t L_{21})A \tag{145}$$

Für $*$ ergibt sich damit

$$(A^t L_{11} + B(A,C,D)^t L_{21})A + (A^t L_{12} + B(A,C,D)^t L_{22})B(A,C,D). \tag{146}$$

Betrachten wir hier nur zwei Beispiele:

1. Betrachten wir den Spezialfall einer Transformation mit

$$T = \begin{pmatrix} A & C \\ 0 & D \end{pmatrix}. \tag{147}$$

Dann ergibt sich

$$C = -L_{11}^{-1} L_{12} D, \tag{148}$$

und als transformierte Matrix

$$T^t L_k T = \begin{pmatrix} A^t L_{11} A & 0 \\ 0 & D^t S D \end{pmatrix}. \tag{149}$$

Aus der Forderung $D^t S D = L_{k-1}$ ergibt sich dann

$$D = S^{-1/2} L_{k-1}^{-1/2}, \tag{150}$$

und damit die Prolongation zu

$$P_{k-1}^k = \begin{pmatrix} -L_{11}^{-1} L_{12} S^{-1/2} L_{k-1}^{-1/2} \\ S^{-1/2} L_{k-1}^{-1/2} \end{pmatrix}. \tag{151}$$

In einem exakten HB-MG-Algorithmus mit vorgegebener Grobgittermatrix L_{k-1} müßten also 151 als Prolongation und $R_k^{k-1} = (P_{k-1}^k)^t$ aus 151 als Restriktion ausgeführt werden. Man beachte, daß dabei auf dem groben Gitter in der Prolongation und der Restriktion nicht mehr die Identität ausgeführt wird. In einem MG-Algorithmus ist dies allerdings nicht verwendbar.

2. Transformation T mit

$$T = \begin{pmatrix} A & 0 \\ -A L_{12} L_{22}^{-1} & L_{22}^{-1/2} L_{k-1}^{1/2} \end{pmatrix} \tag{152}$$

ergibt

$$T^t L_k T = \begin{pmatrix} A^t \bar{S} A & 0 \\ 0 & L_{k-1} \end{pmatrix} \tag{153}$$

mit $\bar{S} = L_{11} - L_{12} L_{22}^{-1} L_{21}$.

Auch dieser Ansatz ist nicht auf symmetrische Transformationen beschränkt. Als ein Beispiel einer allgemeineren Transformation gemäß Gleichung 134 betrachte man die Transformation von links mit

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -L_{12} L_{22}^{-1} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

und von rechts mit

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & L_{22}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ -L_{21} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & L_{k-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}.$$

Dann ergibt sich als transformierte Matrix

$$\begin{pmatrix} A \bar{S} E & 0 \\ 0 & L_{k-1} \end{pmatrix},$$

wieder mit $\bar{S} = L_{11} - L_{12} L_{22}^{-1} L_{21}$. Man bedenke, daß für 9-Punkte-Sterne L_{22} diagonal ist. Für A und E ließen sich wieder Glätter auf den Punkten in $\Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ einsetzen. Dieses Verfahren ist rekursiv auf die groben Gitter, also als nächstes bezüglich L_{k-1}, fortsetzbar. In den Punkten aus Ω^{11} ergeben sich dann 21-Punkte-Sterne und in $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ 13-Punkte-Sterne.

Betrachten wir als Beispiel den Laplaceoperator mit (skalierten Sterne)

$${L_k}^* = [\ -1 \quad 2 \quad -1\ ]$$

und

$${L_{k-1}}^* = [\ -1 \quad 2 \quad -1\ ].$$

Dann hat $\bar{S}$ den Stern

$$\bar{S}^* = 1/2[\ -1 \quad 2 \quad -1\ ],$$

ist also wieder eine Diskretisierung des Laplaceoperators, d.h. wieder von der Ordnung $O(h^2)$. Interessant sind hierbei die entstehenden Basisfunktionen des Testraumes, die in Abbildung 19 zu sehen sind, und die durch die Transformationsmatrix

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ -L_{22}^{-1}L_{12}^t & L_{k-1}^t \end{pmatrix}$$

entstehen.

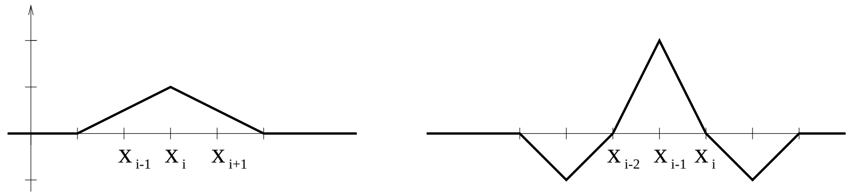

Abb. 19: Basisfunktionen des Testraumes zum Laplaceoperator, $x_i \in \Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$, $x_{i-1} \in \Omega_{k-1}$

Die Basisfunktionen in den Grobgitterpunkten werden dabei durch die vorgegebene Grobgitterdiskretisierung des Laplaceoperators bestimmt.

Ebenso wie bei der allgemeinen Transformation besteht auch hier die Hoffnung, durch geeignete Wahl der Transformation, die ja nicht notwendig symmetrisch sein muß, bezüglich der Feingitterpunkte, die nicht im nächstgröberen Gitter liegen, einen besseren Vorkonditionierungseffekt zu erzielen, so daß z.B. bei Konvektions-Diffusionsproblemen die Konvektion nicht mehr dominiert, und einfache Iterationsverfahren nicht mehr versagen.

3.7 Die Anwendung auf das Erzeugendensystem

Die Grundlagen der Erzeugendensystemtheorie wurden in [GRI91] gelegt. Dort wird gezeigt, daß sich Multilevel-Algorithmen als einfache iterative Methoden über dem Erzeugendensystem interpretieren lassen. Wendet man zum Beispiel die Gauß-Seidel Iteration auf das durch Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung mit dem Erzeugendensystem anstelle einer Basis des finite Elementraumes entstehende indefinite System an, so ist dies äquivalent zur Mehrgittermethode angewandt auf das Standardbasissystem.

3.7.1 Das Erzeugendensystem

V_k sei wieder der finite Elementraum der bezüglich Ω_k linearen Funktionen. Wir betrachten jetzt eine Menge von Funktionen E_k, die definiert ist als Vereinigung aller Hut-Basisfunktionen B_l der Level $l = 0, 1, \ldots, k$, also

$$E_k = B_0 \cup B_1 \cup \ldots \cup B_k. \tag{154}$$

E_k ist dann keine Basis, sondern nur noch ein Erzeugendensystem von V_k. Jede Gitterfunktion $u_k \in V_k$ besitzt nun eine nichteindeutige Darstellung

$$u_k = \sum_{l=1}^{k} \sum_{i=1}^{n_l} u_i^l \varphi_i^l \tag{155}$$

mit dem Koordinatenvektor $u_k^E = (u_i^l)_{l=0,\ldots,k,i=1,\ldots,n_l}$. Hier und im folgenden bezeichnen wir Darstellungen mittels des Erzeugendensystems 154 mit dem Index E.

Diese nichteindeutige Darstellung kann jedoch einfach umgewandelt werden in eine eindeutige Darstellung in der Basis B_k. Die Transformation von der Darstellung im Erzeugendensystem E_k in die Darstellung in der Basis B_k werde beschrieben durch die Transformationsmatrix S_k^E. Dann läßt sich das Gleichungssystem $L_k u_k = f_k$ in den erweiterten Raum transformieren:

$$(S_k^E)^t L_k S_k^E u_k^E = (S_k^E)^t f_k. \tag{156}$$

Die Matrix

$$L_k^E := (S_k^E)^t L_k S_k^E \tag{157}$$

wird im folgenden als erweiterte Matrix und L_k als Basismatrix bezeichnet. Dann gilt für die Blöcke von L_k^E, mit P_m^k der Standardprolongation,

$$(L_k^E)_{l,m} = R_k^l L_k P_m^k, \tag{158}$$

also z.B. im Dreilevelfall

$$\begin{pmatrix} L_k & L_k P_{k-1}^k & L_k P_{k-2}^k \\ R_k^{k-1} L_k & R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k & R_k^{k-1} L_k P_{k-2}^k \\ R_k^{k-2} L_k & R_k^{k-2} L_k P_{k-1}^k & R_k^{k-2} L_k P_{k-2}^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ u_{k-1} \\ u_{k-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_k \\ R_k^{k-1} f_k \\ R_k^{k-2} f_k \end{pmatrix}. \tag{159}$$

Man beachte, daß auf der Diagonalen die Galerkin-Grobgittermatrizen L_{k-1} bzw. L_{k-2} stehen.

3.7.2 Die Energie-Orthogonalisierung bzgl. des Erzeugendensystems

Dies läßt sich natürlich auch bezüglich anderer Basisfunktionen als den Hut-Basen und anderer Transportoperatoren als der Standardprolongation und der Standardrestriktion (z.B. der Energieprolongation) ausführen.

Beachtet man, daß mit der in Gleichung 101 definierten Energie-Prolongation und der dazu adjungierten Abbildung als Restriktion gilt

$$L_{k-1} = R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k = S_k, \tag{160}$$

so erhält man rekursiv über

$$L_{k-l} = R_k^{k-l} L_k P_{k-l}^k = R_{k-l+1}^{k-l} L_{k-l+1} P_{k-l}^{k-l+1}$$

die Beziehung

$$L_{k-l} = S_{k-l+1}. \tag{161}$$

(Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, daß diese Betrachtungen nur theoretischen Wert haben, da das Schurkomplement S_l von L_l in mehr als zwei Dimensionen nicht als Grobgitteroperator L_{l-1} in einem MG-Algorithmus eingesetzt werden kann, da es kein lokaler Operator ist!)

Durch einfaches Einsetzen sieht man außerdem

$$L_k P_{k-1}^k = \begin{pmatrix} 0 \\ S_k \end{pmatrix} \text{ und } R_k^{k-1} L_k = \begin{pmatrix} 0 & S_k \end{pmatrix} \tag{162}$$

und damit gilt rekursiv

$$L_k P_{k-l}^k = \begin{pmatrix} 0 \\ S_{k-l+1} \end{pmatrix} \text{ bzw. } R_k^{k-l} L_k = \begin{pmatrix} 0 & S_{k-l+1} \end{pmatrix}. \tag{163}$$

Verwendet man also statt der Hut-Basisfunktionen aller Level die exakten energieabhängigen Basisfunktionen aller Level und bildet daraus durch Vereinigung ein Erzeugendensystem, so erhält man für die erweiterte Matrix

$$L_k^E = \begin{pmatrix} L_k & L_k P_{k-1}^k & L_k P_{k-2}^k & \cdots \\ R_k^{k-1} L_k & R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k & R_k^{k-1} L_k P_{k-2}^k & \cdots \\ R_k^{k-2} L_k & R_k^{k-2} L_k P_{k-1}^k & R_k^{k-2} L_k P_{k-2}^k & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{164}$$

also folgende Darstellung:

$$L_k^E = \left(\begin{array}{c|c|c c} L_k & \begin{matrix} 0 \\ S_k \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ S_{k-1} \end{matrix} & \cdots \\ \hline \begin{matrix} 0 & S_k \end{matrix} & S_k & \begin{matrix} 0 \\ S_{k-1} \end{matrix} & \cdots \\ \hline \begin{matrix} 0 & S_{k-1} \end{matrix} & \begin{matrix} 0 & S_{k-1} \end{matrix} & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & S_{k-2} \end{matrix} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}\right), \tag{165}$$

bzw.

$$L_k^E = \left(\begin{array}{c|c|c c} L_k & \begin{matrix} 0 \\ L_{k-1} \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ L_{k-2} \end{matrix} & \cdots \\ \hline \begin{matrix} 0 & L_{k-1} \end{matrix} & L_{k-1} & \begin{matrix} 0 \\ L_{k-2} \end{matrix} & \cdots \\ \hline \begin{matrix} 0 & L_{k-2} \end{matrix} & \begin{matrix} 0 & L_{k-2} \end{matrix} & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & L_{k-3} \end{matrix} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}\right). \tag{166}$$

Schreiben wir $L_l, l = 0, 1, \ldots, k$ analog zu Gleichung 84 in Blockform:

$$L_l = \begin{pmatrix} (L_l)_{11} & (L_l)_{12} \\ (L_l)_{21} & (L_l)_{22} \end{pmatrix}, \tag{167}$$

so erhält man durch eine einfache Transformation mit S und S^t die Matrix L_k^E in der Blockdiagonalform

$$S^t L_k^E S = \begin{pmatrix} (L_k)_{11} & (L_k)_{12} & & & \\ (L_k)_{21} & (L_k)_{22} - L_{k-1} & & & \\ & & (L_{k-1})_{11} & (L_{k-1})_{12} & \\ & & (L_{k-1})_{22} & (L_{k-1})_{22} - L_{k-2} & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}. \tag{168}$$

Definieren wir analog zu 93

$$T_l = \begin{pmatrix} I & -(L_l)_{11}^{-1}(L_l)_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix}, l = 1, \ldots, k, \tag{169}$$

so erhalten wir

$$\begin{pmatrix} T_k & & & \\ & T_{k-1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & I \end{pmatrix}^t S^t L_k^E S \begin{pmatrix} T_k & & & \\ & T_{k-1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & I \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} (L_k)_{11} & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & \\ & & (L_{k-1})_{11} & 0 & & & \\ & & 0 & 0 & & & \\ & & & & (L_{k-2})_{11} & 0 & \\ & & & & 0 & 0 & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & L_0 \end{pmatrix} =: D^E. \tag{170}$$

Insgesamt haben wir also mit der Transformationsmatrix

$$T^E = \left(\begin{array}{c|c|c} T_k & \begin{matrix} 0 \\ -I \end{matrix} & \\ \hline & T_{k-1} & \begin{matrix} 0 \\ -I \end{matrix} \\ \hline & & \begin{matrix} T_{k-2} & & \\ & \ddots & \\ & & I \end{matrix} \end{array}\right) \tag{171}$$

$$D^E = (T^E)^t L_k^E T^E. \tag{172}$$

Transformieren wir noch in die Basisdarstellung bezüglich der hierarchischen Basis, so erhalten wir

$$\begin{pmatrix} (L_k)_{11} & & & & \\ & (L_{k-1})_{11} & & & \\ & & (L_{k-2})_{11} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & L_0 \end{pmatrix}, \tag{173}$$

also wie schon im Zwei-Level-Fall eine vollständige Entkopplung der Probleme auf den einzelnen Gittern. Selbiges hätten wir natürlich auch direkt erhalten, wenn wir die durch Diskretisierung mittels der hierarchischen Basis entstandene Matrix $\bar{L}_k$ betrachtet hätten. Wie schon im Zwei-Level-Fall erläutert, haben wir damit verbunden eine a-Orthogonalisierung des die Räume $V_l, l = 0, \ldots, k$ aufspannenden Erzeugendensystems, bzw. der Basen.

3.7.3 Block-Diagonalisierung der indefiniten Matrix durch allgemeinere symmetrische Transformationen

Durch eine Block-Diagonalisierung der Erzeugendensystemmatrix L_k^E werden die Probleme auf den verschiedenen Leveln (wie bei der energieabhängigen Transformation) entkoppelt, außerdem lassen sich durch allgemeinere Transfomationen u.a. verschiedene Mehrgitterverfahren herleiten, was wir im folgenden kurz skizzieren werden.

Die Transformationsmatrix sei gegeben durch

$$T = \begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix}. \tag{174}$$

Damit gilt

$$T^t L_k^E T = \begin{pmatrix} (A + P_{k-1}^k B)^t L_k (A + P_{k-1}^k B) & (A + P_{k-1}^k B)^t L_k (C + P_{k-1}^k D) \\ (C + P_{k-1}^k D)^t L_k (A + P_{k-1}^k B) & (C + P_{k-1}^k D)^t L_k (C + P_{k-1}^k D) \end{pmatrix}. \tag{175}$$

Um eine Blockdiagonalisierung zu erhalten, muß also folgende Kern-Bedingung erfüllt sein:

$$Bild(L_k(C + P_{k-1}^k D)) \in ker((A + P_{k-1}^k B)^t). \tag{176}$$

Gesucht ist also ein durch Anwendung von $C+P_{k-1}^k D$ auf V_{k-1} erzeugter Unterraum von V_k, so daß gilt:

$$(A^t + B^t(P_{k-1}^k)^t)L_k u = 0 \text{ für } u \in V_{k-1}. \tag{177}$$

Bemerkung: Mit Hilfe einer allgemeinen Transformation der Matrix L_k^E der Form $UL_k^E W$ können verschiedene MG-Ansätze motiviert werden: Betrachten wir nur den Zwei-Level-Fall dann ist nach [GRI91] das Gauß-Seidel-Verfahren angewandt auf die Erzeugendensystemmatrix

$$\begin{pmatrix} L_k & L_k P_{k-1}^k \\ R_k^{k-1} L_k & R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k \end{pmatrix}$$

äquivalent zum CS-Schema

1. Löse $L_k u_k = f_k$.
2. Bilde $f_k := R_k^{k-1} f_k - R_k^{k-1} L_k u_k$.
3. Löse $R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k u_{k-1} = f_{k-1}$.
4. Bilde $u_k := u_k + P_{k-1}^k u_{k-1}$.

Durch die Rechts-Transformation W (hier für den Zwei-Level-Fall notiert)

$$W = \begin{pmatrix} I & 0 \\ -\hat{R}_k^{k-1} & I \end{pmatrix} \tag{178}$$

erhält man dann z.B. die in [GRI90] beschriebene hierarchische Transformations-MG-Methode (HT-MG-Methode). Denn es gilt

$$L_k^E W = \begin{pmatrix} L_k(I - P_{k-1}^k \hat{R}_k^{k-1}) & L_k P_{k-1}^k \\ R_k^{k-1} L_k (I - P_{k-1}^k \hat{R}_k^{k-1}) & R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k \end{pmatrix}, \tag{179}$$

und damit läßt sich (analog zum CS-Schema) im zwei Level-Fall als eine mögliche Variante des HT-MG-Verfahrens ein Ablaufschema zu

1. Iteriere ν_1-mal über $L_k u_k = f_k$.
2. Bilde $\tilde{u}_{k-1} := \hat{R}_k^{k-1} u_k$.
3. Bilde die rechte Seite $\hat{f}_{k-1} := R_k^{k-1} f_k - R_k^{k-1} L_k (I - P_{k-1}^k \hat{R}_k^{k-1}) u_k$ des Grobgittersystems.
4. Setze $\hat{u}_{k-1} := \tilde{u}_{k-1}$ als Grobgitterstartwert.
5. Löse $R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k \hat{u}_{k-1} = \hat{f}_{k-1}$.
6. Bilde $u_k := \bar{u}_k + P_{k-1}^k \hat{u}_{k-1}$.
7. Iteriere ν_2-mal über $L_k u_k = f_k$.

ableiten.

4 Die Galerkinapproximation als diskretes Modellierungsverfahren

In diesem Kapitel werden wir zwischen den in den letzten beiden Kapiteln seperat betrachteten Bereichen der Modellierungsverfahren zur Bestimmung von Grobskalenoperatoren bzw. effektiver Operatoren einerseits und der im MG-Verfahren nötigen Bestimmung von diskreten Grobgitteroperatoren andererseits einen Zusammenhang herstellen. Die Diskretisierung eines kontinuierlichen Operators läßt sich – wie wir sehen werden – als Approximation des kontinuierlichen Operators auf einer durch die Gitterweite gegebenen Skala auffassen, in der die Einflüsse der Skalen kleiner als die Gitterweite in einer durch die Diskretisierung bestimmten Art und Weise herausgemittelt sind. Auf diese Art lassen sich auch die durch die Galerkinapproximation bestimmten Grobgitteroperatoren als diskrete Grobskalenoperatoren auffassen, in denen der Einfluß der herausgemittelten Skalen auf verschiedene Weise – abhängig von den verwendeten Transportoperatoren – modelliert werden. So entspricht z.B. die Galerkinapproximation mit der Standardprolongation und der Standardrestriktion für unsere Modellgleichung der artihmetischen Mittelung des Diffusionskoeffizienten, was, wie wir bereits in Kapitel 2 beschrieben haben, i.a. kein gutes Modellierungsverfahren liefert. Die matrixabhängige Galerkinapproximation hingegen modelliert die nicht auflösbaren Skalen in geeigneter Weise und führt zu besseren Approximationen der effektiven Operatoren und läßt sich im Falle der Betrachtung der Modellgleichung mit periodischem Diffusionskoeffizienten als diskretes Homogenisierungsverfahren auffassen. Vergleiche dazu auch Abbildung 1.

4.1 Die matrixabhängige Galerkinapproximation als diskretes Modellierungsverfahren zur Bestimmung von Grobskalenoperatoren

Sei eine Differentialgleichung

$$Lu = f \tag{180}$$

auf einem Gebiet Ω mit geeigneten Randbedingungen gegeben. $L : U \to F$ sei dabei wiederum ein linearer Operator von einem geeigneten Funktionenraum U in einen geeigneten Funktionenraum F. Um genaue numerische Lösungen des Problems zu erhalten, ist es erforderlich, daß alle im Problem auftretenden Größenskalen durch die Simulation aufgelöst werden. Ist dies nicht der Fall, so beschreibt die berechnete numerische Lösung die exakte kontinuierliche Lösung i.a. nur schlecht oder hat mit dieser überhaupt nichts zu tun. Darüberhinaus kann in diesem Fall die Diskretisierung selbst auf dem feinsten in einem MG-Zyklus verwendeten Gitter instabil sein. (Für eine physikalische Erläuterung im Rahmen der Turbulenzsimulation siehe z.B. [ROG84].) Wie wir schon bemerkt haben, ist in manchen Fällen der Differentialoperator L jedoch im Ort sehr schnell variierend, und eine Auflösung – selbst durch das feinste zur numerischen Behandlung zur Verfügung stehende Gitter – nicht möglich. Man denke dabei nur an die Modellgleichung 9, bei der die Schwierigkeiten durch die ortsabhängige Materialfunktion induziert werden. Überschreitet der Bereich der unterschiedlichen Größenskalen den durch die Computerkapazität „erlaubten“, müssen einige der feinsten Skalen weggelassen werden, und der Einfluß dieser vernachlässigten auf die beibehaltenen (durch die verwendeten Gitter aufgelösten) Skalen modelliert werden. Der erste Schritt in Richtung der numerischen Behandlung eines solchen Problems ist also die Bestimmung derjenigen Gleichungen, die direkt das grobskalige Verhalten des Systems beschreiben, und damit zur numerischen Simulation verwendet werden können.

Bezeichnet man mit $< . >: V \to V$ einen Mittelungsoperator in V, wie z.B. die Mittelung durch ein Konvolutionsintegral

$$< u >_l := \int u(x) G(x,l) dx,$$

mit der Normierung

$$\int G(x,l) dx = 1,$$

wobei l eine charakteristische Filterlänge bezeichne, und sei $< L >$ ein gemittelter Operator und bezeichne w die Lösung von

$$< L > w = f. \tag{181}$$

Dann gilt i.a. nicht $w =< u >$. Vielmehr ist $< u >$ die Lösung eines gemittelten Problems mit veränderter rechter Seite, nämlich die Lösung von

$$< L > w = f + \bar{\tau}(u) \tag{182}$$

mit $\bar{\tau} = \bar{\tau}(u) := Lu - < L >< u >$. Zur Bestimmung der gemittelten Lösung $< u >$ ist Gleichung 182 in dieser Form jedoch ungeeignet, da $\bar{\tau}$ von der exakten Lösung u abhängt. Stattdessen versucht man $\bar{\tau} = \bar{\tau}(u)$ durch eine andere Größe $\tau = \tau(< u >)$, die nur von der gemittelten Lösung $< u >$ abhängt, zu modellieren. Durch τ wird also der Einfluß der durch die Mittelung des Operators L verlorengegangenen feinen Skalen auf die Lösung des Problems beschrieben. In der Turbulenzsimulation wird dieses sogenannte „closure problem" bezüglich der Navier-Stokes-Gleichungen untersucht und verschiedene Modelle für die Modellierungsgröße τ betrachtet [ROG84]. Insbesondere kommen dort Modelle zum Einsatz, bei denen durch τ künstliche Viskosität induziert wird, wie dies auch bei manchen Diskretisierungsverfahren – z.B. bei der Verwendung einseitiger Differenzen – der Fall ist.

In [FUC93] wurde beobachtet, daß sich verschiedene Turbulenzmodelle als Multilevelansätze auffassen lassen, wobei folgende Beobachtung hilfreich ist (für eine ausführlichere Beschreibung siehe ebenda): Betrachtet man das FAS-Schema, das in Abschnitt 3.1.3 beschrieben wurde, so wird die Lösung des Grobgitterproblems über die Gleichung

$$L_{k-1} \hat{u}_{k-1} = R_{k-1}^k f_k + \tau_k^{k-1} \tag{183}$$

mit $\tau_k^{k-1} = L_{k-1} \hat{R}_k^{k-1} u_k - R_k^{k-1} L_k u_k$ berechnet. Vergleicht man Gleichung 183 mit Gleichung 182 und deutet man L_{k-1} als gemittelten Operator und $R_{k-1}^k f_k$ als gemittelte rechte Seite, dann läßt sich τ_k^{k-1} als diskretes Analogon zur Modellierungsgröße τ auffassen, wie wir es ja implizit schon in Abschnitt 3.1.3 getan haben, als wir τ_k^{k-1} als Fein-zu-Grob-Defektkorrektur interpretierten, die dafür sorgt, daß Grob- und Feingitterlösung zusammenfallen.

Würde man als Verfahrenskomponenten im FAS-Schema die in Abschnitt 3.3.3 eingeführten energieabhängigen Verfahrenskomponenten – wobei wir wieder die in Abschnitt 3.3.1 eingeführte Nummerierung der Gitterpunkte benutzen –

$$P_{k-1}^k = \begin{pmatrix} -L_{11}^{-1} L_{12} \\ I \end{pmatrix}, \quad R_k^{k-1} = \begin{pmatrix} -L_{21} L_{11}^{-1} & I \end{pmatrix}, \quad L_{k-1} = R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k = S_k,$$

mit S_k dem Schurkomplement der Steifigkeitsmatrix L_k (als Diskretisierung des kontinuierlichen Operators L), benutzen, und verwendet außerdem für $\hat{R}_k^{k-1}$ die triviale Injektion $\begin{pmatrix} 0 & I \end{pmatrix}$ (die keine Injektion im mathematischen Sinne darstellt, sondern eine spezielle Restriktion ist), dann gilt wegen $R_k^{k-1} L_k = \begin{pmatrix} 0 & S_k \end{pmatrix}$

$$\tau_k^{k-1} = S_k \begin{pmatrix} 0 & I \end{pmatrix} u_k - \begin{pmatrix} 0 & S_k \end{pmatrix} u_k = 0.$$

Die Defektkorrektur τ_k^{k-1} ist also gleich Null. Damit bestimmt der Grobgitteroperator $L_{k-1} = S_k$ über $L_{k-1} u_{k-1} = R_k^{k-1} f_k$ direkt die Grobgitterlösung (interpretiert als gemittelte Lösung) und stellt damit einen in idealer Weise gemittelten Operator dar. Wir wissen jedoch bereits, daß diese Verfahrenskomponenten i.a. nicht verwendet werden können, da sie keine lokalen Operatoren sind. Aber mit den in Abschnitt 3.4 vorgestellten Näherungsmethoden haben wir Näherungen der exakten energieabhängigen Verfahrenskomponenten, für die zwar τ_k^{k-1} nur näherungsweise gleich Null ist, die aber – in Abhängigkeit von der Güte der Approximation der exakten energieabhängigen Verfahrenskomponenten durch die jeweiligen Näherungen – den Einfluß der herausgemittelten Skalen in den entstehenden Grobgitteroperatoren beinhalten und modellieren. In diesem Sinne modelliert die matrix- bzw. operatorabhängige Galerkinapproximation den Einfluß der nicht auflösbaren feinen Skalen auf die beibehaltenen Skalen und läßt sich damit als diskretes Modellierungsverfahren ansehen.

4.2 Die Diskretisierung und die Galerkinapproximation als Verfahren zur Mittelung des kontinuierlichen Operators

Die Werte einer Gitterfunktion repräsentieren die kontinuierlichen Größen nur in einer gewissen Näherung, die durch irgendeine Art von Mittelung, die in der Diskretisierung vorgenommen wird, gegeben ist. (Siehe z.B. [GER92] oder [ROG84] für eine Beschreibung im Rahmen der Turbulenzmodellierung.) Betrachten wir dazu als Beispiel auf einem Gitter der Maschenweite h die zentrale Differenz

$$\Delta_h u = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}$$

als diskrete Approximation der Ableitung einer kontinuierlichen Variablen u. Dann gilt offensichtlich

$$\frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2h} \int_{x-h}^{x+h} u(\zeta) d\zeta \right).$$

D.h. die zentrale Differenz von u ist genau die Ableitung einer zweiten stetigen Variablen v mit

$$v(x) = \frac{1}{2h} \int_{x-h}^{x+h} u(\zeta) d\zeta.$$

Skalen kleiner als die Gitterweite h werden also durch die in der Diskretisierung durchgeführte Mittelung herausgefiltert. Damit ist dieser Ansatz auf Differentialgleichungen beschränkt, bei denen die (durch die Diskretisierung induzierte) Filterung des Differentialoperators keinen Informationsverlust mit sich bringt, der die numerischen Ergebnisse völlig verfälscht. Bezogen auf unsere Modellgleichung 9 ist dies dann der Fall, wenn sich der Diffusionskoeffizient innerhalb einer Masche des feinsten verwendeten Gitters nicht, oder nur wenig ändert. Ist eine so feine Diskretisierung nicht möglich, muß der Bereich der durch die Differentialgleichung gegebenen Skalen eingeschränkt werden, und, wie schon oben erwähnt, der Einfluß der feinsten Skalen (feiner als die Maschenweite) auf die durch das verwendete Gitter aufgelösten Skalen geeignet modelliert werden, wie dies für die Modellgleichung die in Abschnitt 2.3 beschriebenen Verfahren – mehr oder weniger erfolgreich – versuchen.

Die Methode der finiten Elemente bietet hier die Möglichkeit, durch Wahl anderer als der Standard-Finite-Elementbasen, andere Mittelungen in die Diskretisierung einzuführen, die im Falle unserer Modellgleichung gewichteten Mittelungen der Materialfunktion entsprechen. Diskretisierung der Differentialgleichung 180 mit der Methode der finiten Elemente (ohne Berücksichtigung von Randbedingungen) ergibt den diskretisierten Operator L_l (die Steifigkeitsmatrix), der durch

$$(L_l)_{ij} := \int_\Omega L(x)\varphi_i^l(x)\psi_j^l(x)dx$$

definiert ist, wobei φ_i^l bzw. ψ_j^l Basisfunktionen des Ansatz- bzw. Testraumes bezeichnen, die sich so direkt als Gewichtsfunktionen einer Mittelung interpretieren lassen. Andere Basisfunktionen ergeben dann andere Mittelungen.

An dieser Stelle ist es hilfreich, sich noch einmal die beiden Möglichkeiten zur Bestimmung von Grobgitteroperatoren – Galerkinapproximation und explizite Diskretisierung auf jedem Gitter – ins Gedächtnis zurückzurufen. Bei der expliziten Diskretisierung zur Bestimmung der Grobgitteroperatoren im MG-Algorithmus haben wir das Problem der Modellierung der durch das jeweilige Gitter nicht mehr auflösbaren Skalen prinzipiell ja nicht nur auf dem feinsten, sondern auf allen Gittern. Diskretisierung des Differentialoperator L auf einem Gitter der Maschenweite h_k filtert alle Skalen kleiner als die Gitterweite h_k heraus. Entsprechendes gilt für die Grobgitteroperatoren mit zugehörigen Gitterweiten $h_{k-1} = 2h_k$ usw. In diesem Fall kommen uns bei unserer Modellgleichung die in Abschnitt 2.3 vorgestellten Methoden zur näherungsweisen Bestimmung effektiver Operatoren zu Hilfe. Zum Beispiel gibt uns die Renormalisierung auf jedem Gitter Näherungen für die effektiven Diffusionskoeffizienten innerhalb jeder Masche des Gitters, in denen die Skalen kleiner als die jeweilige Gitterweite bereits herausgemittelt sind. Bezeichne D_l den renormalisieren Diffusionskoeffizienten auf dem Level l, der ja in jeder Masche des Gitters auf dem Level l konstant ist, dann lassen sich die Grobgitteroperatoren mit den gewöhnlichen Hut-Funktionen als Basen der zugehörigen linearen finite Elementräume diskretisieren, da die Modellierung des Einflußes der feinen Skalen bereits durch die Renormalisierung vorgenommen wurde. Wie dies konkret geschieht und wie andere, ebenfalls in Abschnitt 2.3 dargestellte Ideen zur Bestimmung von Verfahrenskomponenten in MG-Algorithmen benutzt werden können, werden wir in Abschnitt 4.4 genauer sehen.

Bei Bestimmung der Grobgitteroperatoren durch die Galerkinapproximation wird diese Mittelung implizit – durch die Anwendung der Prolongation bzw. Restriktion auf den Feingitteroperator – ausgeführt. Wie wir bereits gesehen haben, läßt sich die Wahl von (matrix- bzw. operatorabhängigen) Prolongationen und Restriktionen, und damit die Galerkinapproximation selbst als Wahl von (Nichtstandard-) Finite-Elementbasen interpretieren. Mit

$$R_k^{k-1} := (r_{ij})_{ij} \text{ und } P_{k-1}^k := (p_{ij})_{ij}$$

und mit $\{\varphi_j^k\}_{j=1}^{n_k}$, $\{\psi_j^k\}_{j=1}^{n_k}$ als Basen des Test- bzw. Ansatzraumes des Levels k gilt ja

$$(L_{k-1})_{il} = (R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k)_{il} = \sum_{j,m} r_{ij} p_{ml} (L_k)_{jm} = \int_\Omega L(\sum_j r_{ij}\varphi_j^k)(\sum_m p_{ml}\psi_m^k)dx,$$

und mit den durch

$$\varphi_i^{k-1} := \sum_j r_{ij}\varphi_j^k \text{ und } \psi_l^{k-1} := \sum_m p_{ml}\psi_m^k$$

definierten Basisfunktionen des Test- bzw. Ansatzraumes auf Level $k-1$ haben wir dann

$$(L_{k-1})_{il} = \int_\Omega L\varphi_i^{k-1}\psi_l^{k-1}dx, \tag{184}$$

also wiederum eine Filterung des Operators L mit den matrix- bzw. operatorabhängigen Basisfunktionen $\{\varphi_j^{k-1}\}_{j=1}^{n_{k-1}}$ bzw. $\{\psi_j^{k-1}\}_{j=1}^{n_{k-1}}$ des Levels $k-1$. Prolongation und Restriktion definieren also die matrixabhängien Basisfunktionen der gröberen Level und lassen sich deswegen (siehe Gleichung 184) nicht mehr nur als Abbildungen zwischen zwei Gitterfunktionsräumen, sondern als Teil des Diskretisierungsprozesses ansehen. Fordert man, daß der auf den groben Gittern durch die Galerkinapproximation entstehende Operator mit dem durch explizite Diskretisierung mittels $L_{k-1} = R^{k-1}LP_{k-1}$ (analog zum Diskretisierungsverfahren auf dem feinsten Gitter $L_k = R^kLP_k$) entstehenden Operator zusammenfällt, dann ergibt sich die Beziehung

$$R^{k-1}LP_{k-1} = R_k^{k-1}L_kP_{k-1}^k. \tag{185}$$

Bezogen auf die von uns als Modellgleichung benutzte Diffusionsgleichung 9 läßt sich die Galerkinapproximation mit matrixabhängigen Prolongationen und Restriktionen damit nicht nur als Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung von effektiven Grobgitteroperatoren, sondern auch als Methode zur Bestimmung von effektiven Diffusionskoeffizienten auffassen, wie wir noch genauer sehen werden.

Theoretisch wäre es ja denkbar, zur Bestimmung einer Diskretisierung auf dem feinsten in einem MG-Algorithmus verwendeten Gitter, auf einem beliebig feinen Gitter zu diskretisieren, und die entstehende Diskretisierungsmatrix dem matrixabhängigen Galerkin-Vergröberungsprozeß zu unterwerfen. Für den MG-Algorithmus werden dann die entstehenden Grobgitteroperatoren verwendet. Für unsere Modellgleichung sind die Standarddiskretisierungsschemata für das feinste Gitter i.a. stabil, betrachtet man aber statt dessen z.B. die Konvektions-Diffusionsgleichung

$$-\Delta u + a_1\frac{\partial u}{\partial x} + a_2\frac{\partial u}{\partial y} = 0, \tag{186}$$

so ergeben sich z.B. bei Diskretisierung unter Verwendung zentraler Differenzen Stabilitätsprobleme falls $h \geq \frac{2}{min(|a_1|,|a_2|)}$ für die Gitterweite h gilt, da dann die entstehende Diskretisierungmatrix nicht mehr diagonaldominant ist. So ist es z.B. für Konvektionswerte $|a_1|, |a_2| > 128$ nicht mehr möglich bei einer Gitterweite von $h = 1/64$ oder größer mit zentralen Differenzen stabil zu diskretisieren. Es wird also notwendig, auf dem feinsten Gitter andere Diskretisierungen zu wählen. Dann würde sich das oben beschriebene Verfahren der Diskretisierung auf einem beliebig feinen Gitter mit anschließendem Galerkin-Vergröberungsprozeß anbieten, um eine geeignete stabile Diskretisierung auf dem feinsten im MG-Algorithmus verwendeten Gitter zu finden. Jedoch ist dies relativ aufwendig, da die zu den feinen Gittern gehörigen Matrizen zwar berechnet werden müssen, aber im MG-Algorithmus selbst keine Verwendung finden. Deswegen werden direkt upwind-Differenzen oder statt der gewöhnlichen Hut-Funktionen veränderte FE-Basen bei der Diskretisierung auf dem feinsten Gitter verwendet, die den Einfluß der feinen, nicht auflösbaren Skalen besser modellieren, wie dies ja auf den groben Gittern durch Galerkinapproximation mit matrixabhängiger Prolongation bzw. Restriktion bzw. in analoger Weise speziell für die Modellgleichung durch die explizite Diskretisierung mit vorheriger Bestimmung der effektiven Diffusionswerte innerhalb der Maschen des jeweiligen Gitters geschieht.

Ganz allgemein definiert jeder diskrete Operator L_l auf dem Level l über die Beziehung

$$\tilde{a}_l(\varphi_i^l, \varphi_j^l) := (L_l)_{ij}, \tag{187}$$

mit φ_i^l, φ_j^l Elementen der Standardbasis des Finite-Elementraumes V_l auf Level l, eindeutig eine Energiepaarung

$$\tilde{a}_l : V_l \times V_l \to \mathrm{R}. \tag{188}$$

Entsteht L_l durch die Galerkinapproximation $L_l = R_k^l L_k P_l^k$ und bezeichne a die Energiepaarung der zugrundeliegenden Differentialgleichung, so gilt bei Verwendung der Standardprolongation und Restriktion

$$(L_l)_{ij} = a(\varphi_i^l, \varphi_j^l) \tag{189}$$

und damit $\tilde{a} = a$. Durch die matrix- bzw. operatorabhängige Prolongationen werden, wie wir bereits mehrmals gesehen haben, (Nichtstandard-) Finite-Elementbasen auf den gröberen Gittern definiert. Seien $\{\psi_i^l\}_i$ die Elemente der entstandenen Basis des Testraumes und $\{\chi_i^l\}_i$ die Elemente der Basis des Ansatzraumes auf Level l, dann gilt

$$(L_l)_{ij} = a(\psi_i^l, \chi_j^l) \tag{190}$$

und dann wegen der Definition von $\tilde{a}$ in Gleichung 187

$$\tilde{a}_l(\varphi_i^l, \varphi_j^l)) = a(\psi_i^l, \chi_j^l). \tag{191}$$

Das heißt die auf dem Level l durch die Diskretisierung mit Nichtstandard finite Element Basisfunktionen (bzw. durch die matrixabhängige Galerkinapproximation) entstehende Steifigkeitsmatrix läßt sich interpretieren als Diskretisierung einer veränderten (durch die Energiepaarung $\tilde{a}$ beschriebenen) Differentialgleichung mit (den Standard) Hut-Basisfunktionen.

Speziell für unsere Modellgleichung definiert $\tilde{a}$ dann auf jedem Gitter gemittelte Diffusionkoeffizienten, denn wenn man die Definition 68 der Energiepaarung a für unsere Modellgleichung einsetzt, und den Grobgitterdiffusionskoeffizienten

$$D_l = \begin{pmatrix} \bar{d}_{11} & \bar{d}_{12} \\ \bar{d}_{21} & \bar{d}_{22} \end{pmatrix} \tag{192}$$

des Levels l, der in jeder Masche des Gitters auf dem Level l konstant ist (analog zu den renormalisierten Grobgitterdiffusionswerten), einführt, dann ergeben sich aus Gleichung 191 auf jedem Level die Beziehungen

$$\int_\Omega (\nabla\varphi_j^l)^t D_l \nabla\varphi_i^l dx = \int_\Omega (\nabla\psi_j^l)^t D \nabla\chi_i^l dx, \quad 1 \leq i,j \leq n_l, \tag{193}$$

die (mit der Wahl geeigneter Randbedingungen, z.B. durch periodisches Fortsetzen des Diffusionskoeffizienten D) D_l bestimmen, wobei $D = D(x)$ wiederum die exakte Materialfunktion des betrachteten Diffusionsproblems bezeichnet. Damit ist die über die Galerkinapproximation gegebene Diskretisierung auf dem Level l zurückgeführt auf die explizite Dikretisierung einer Diffusionsgleichung mit veränderter Diffusionsmatrix D_l statt D (mit Hut-Funktionen als Basisfunktionen der finite Elementräume). Setzt man die Galerkinapproximation bis auf das gröbste Gitter fort, dann ist der entstehende Grobgitteroperator eine Näherung für den effektiven Operator.

Die linke Seite von Gleichung 193 läßt sich auch als explizite Diskretisierung der Modellgleichung mit lokal gemitteltem Diffusionskoeffizienten D_l auf dem Level l mit finiten Elementen und Hut-Basisfunktionen ansehen. Dann entspricht die Galerkinapproximation mit Standardprolongation und Restriktion der arithmetischen

Mittelung des Diffusionskoeffizienten, jeweils über eine Zelle des Gitters des jeweiligen Levels, d.h.

$$D_l(x) = \int_{M_i} D(x)dx \text{ für } x \in M_i,$$

wobei M_i eine Masche des Gitters auf dem Level l bezeichne. Galerkinapproximation mit energieabhängigen Prolongationen und Restriktionen hingegen entspricht der expliziten Diskretisierung mit lokal (auf jeder Gitterzelle) effektivem Diffusionskoeffizienten D_l. Denn nach Abschnitt 3.3.3 und wie in Abschnitt 4.1 beschrieben, mittelt die energieabhängige Galerkinapproximation in idealer Weise die Feinskalengleichungen und bestimmt damit Grobgitteroperatoren, die direkt das grobskalige Verhalten der Lösung beschreiben, und bestimmt außerdem über die Gleichung 193 lokal gemittelte Diffusionswerte. Gleichung 193 definiert ja direkt die Sternidentität (die Bezeichnungen sind analog zu denen in Abbildung 26)

$$\frac{1}{6h_l^2} \left[\begin{array}{c|c|c} \begin{array}{c} -(\bar{d}^1_{11} + \bar{d}^1_{22}) \\ +\frac{1}{4}(\bar{d}^1_{12} + \bar{d}^1_{21}) \end{array} & \begin{array}{c} (\bar{d}^1_{11} + \bar{d}^2_{11}) \\ -2(\bar{d}^1_{22} + \bar{d}^2_{22}) \end{array} & \begin{array}{c} -(\bar{d}^2_{11} + \bar{d}^2_{22}) \\ -\frac{1}{4}(\bar{d}^2_{12} + \bar{d}^2_{21}) \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} (\bar{d}^1_{22} + \bar{d}^3_{22}) \\ -2(\bar{d}^1_{11} + \bar{d}^3_{11}) \end{array} & \sum & \begin{array}{c} (\bar{d}^2_{22} + \bar{d}^4_{22}) \\ -2(\bar{d}^2_{11} + \bar{d}^3_{11}) \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} -(\bar{d}^3_{11} + \bar{d}^3_{22}) \\ -\frac{1}{4}(\bar{d}^3_{12} + \bar{d}^3_{21}) \end{array} & \begin{array}{c} (\bar{d}^3_{11} + \bar{d}^4_{11}) \\ -2(\bar{d}^3_{22} + \bar{d}^4_{22}) \end{array} & \begin{array}{c} -(\bar{d}^4_{11} + \bar{d}^4_{22}) \\ +\frac{1}{4}(\bar{d}^4_{12} + \bar{d}^4_{21}) \end{array} \end{array} \right] = (L_l)^*_{ij} \qquad (194)$$

im Punkte (ih_k, jh_k), aus der sich, bei Wahl geeigneter Randbedingungen oder durch periodische Fortsetzung des Diffusionskoeffizienten D, durch die Galerkinapproximation auf jedem Gitter gemittelte Diffusionswerte (ähnlich der Renormalisierung) bestimmen ließen.

Setzt man die matrixabhängige Galerkinapproximation bis auf das gröbste Gitter fort, so ist der entstehende Grobgitteroperator also eine Näherung für den effektiven Operator. Dabei ist jedoch darauf zu achten, daß der Einfluß von Randbedingungen die zur Diskretisierung des Problems nötig sind, nicht das Ergebnis auf dem gröbsten Gitter bestimmt. Dies gelingt wie gesagt z.B., indem der Diffusionskoeffizient und damit der Differentialoperator in jede Richtung periodisch fortgesetzt wird.

Betrachten wir Gleichung 191 einmal für den zweidimensionalen Fall etwas genauer. Dann läßt sich jeder Vektor durch eine einfache Drehstreckung auf jeden anderen Vektor abbilden. Also haben wir

$$\nabla\chi_i^l(x) = \frac{\|\nabla\chi_i^l(x)\|}{\|\nabla\varphi_i^l\|} \begin{pmatrix} \cos(\alpha_i(x)) & -\sin(\alpha_i(x)) \\ \sin(\alpha_i(x)) & \cos(\alpha_i(x)) \end{pmatrix} \nabla\varphi_i^l(x), \qquad (195)$$

wobei α_i den Winkel zwischen $\nabla\varphi_i^l$ und $\nabla\chi_i^l$ (also den Winkel zwischen dem Gradienten der Hut-Basisfunktion und dem Gradienten der operator- bzw. matrixabhängigen Basisfunktion) im euklidischen Skalarprodukt bezeichne. Eine entsprechende Beziehung gilt für $\nabla\varphi_i^l$ und $\nabla\psi_i^l$, mit dem Drehwinkel β_i. Bezeichnen $A_i = A_i(x)$ und $B_i = B_i(x)$ die Transformationen von $\nabla\chi_i^l$ auf $\nabla\varphi_i^l$, bzw. $\nabla\psi_i^l$ auf $\nabla\varphi_i^l$, dann ergibt Einsetzen in Gleichung 191 die Beziehung

$$\int_\Omega \nabla\varphi_j^l D_l \nabla\varphi_i^l dx = \int_\Omega \nabla\varphi_j^l A_j^t D B_i \varphi_i^l dx. \qquad (196)$$

Falls die Basen von Ansatz- und Testraum gleich sind, d.h. $\nabla\chi_i^l = \nabla\psi_i^l$ gilt, dann folgt $A_i = B_i$ und für $j = i$ gilt

$$\int_\Omega \nabla\varphi_i^l D_l \nabla\varphi_i^l dx = \int_\Omega \nabla\varphi_i^l A_i^t D A_i \nabla\varphi_i^l dx. \qquad (197)$$

$A_i^t D A_i$ entspricht einer Transformation der Materialfunktion D in ein ortsabhängiges, durch $\nabla(\varphi_i^l - \psi_i^l)$ bestimmtes Koordinatensystem, das bestimmt ist durch den Winkel zwischen den Gradienten der Standard-Finite-Elementbasis des Levels l, und der entsprechenden matrixabhängigen Basisfunktion. $A_i^t D A_i$ ist dann im allgemeinen keine Diagonalmatrix mehr, auch wenn D es ist.

4.3 Einige Anmerkungen zur Interpretation der Galerkinapproximation als diskretem Homogenisierungsverfahren

In diesem Abschnitt werden wir zeigen, daß im Eindimensionalen die durch die matrixabhängige Galerkinapproximation bestimmten Diffusionskoeffizienten und die homogenisierten Diffusionskoeffizienten gleich sind.

Im Eindimensionalen erhielten wir die operatorabhängigen FE-Basisfunktionen indem wir die lokalen homogenen Probleme mit geeigneten Randbedingungen lösten. So erhielten wir beispielsweise aus der Lösung von

$$(d(x)u(x)_x)_x = 0 \text{ auf } [x_{i-1}, x_i]$$

mit Randbedingungen $u(x_{i-1}) = 0, u(x_i) = 1$, die operatorabhängige Basisfunktion ψ_i^{k-1} auf $[x_{i-1}, x_i]$ zu

$$\psi_i^{k-1}(x) = \left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{d(s)} ds \right)^{-1} \int_{x_{i-1}}^{x} \frac{1}{d(y)} dy \text{ für } x \in [x_{i-1}, x_i] \tag{198}$$

und aus der Lösung von

$$(d(x)u(x)_x)_x = 0 \text{ auf } [x_i, x_{i+1}]$$

mit Randbedingungen $u(x_i) = 1, u(x_{i+1}) = 0$, die operatorabhängige Basisfunktion ψ_i^{k-1} auf $[x_i, x_{i+1}]$ zu

$$\psi_i^{k-1}(x) = 1 - \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{d(s)} ds \right)^{-1} \int_{x_i}^{x} \frac{1}{d(y)} dy \text{ für } x \in [x_i, x_{i+1}], \tag{199}$$

und damit insgesamt

$$\psi_i^{k-1}(x) = \begin{cases} \left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{d(s)} ds \right)^{-1} \int_{x_{i-1}}^{x} \frac{1}{d(y)} dy & \text{für } x \in [x_{i-1}, x_i], \\ 1 - \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{d(s)} ds \right)^{-1} \int_{x_i}^{x} \frac{1}{d(y)} dy & \text{für } x \in (x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für die Differenz $\chi_i^{k-1} := \psi_i^{k-1} - \varphi_i^{k-1}$ von Hut-Basisfunktion φ_i^{k-1} zu operatorabhängiger Basisfunktion ψ_i^{k-1} gilt dann auf jedem Intervall $[x_{j-1}, x_j]$ die Differentialgleichung

$$-(d(x)\chi_i^{k-1}(x)_x)_x = (d(x)\varphi_i^{k-1}(x)_x)_x, \tag{200}$$

mit Dirichlet-Null-Randbedingungen für χ_i^{k-1}.

Wählen wir als Ansatzraum die bezüglich Ω_k linearen Funktionen, mit den Hut-Funktionen φ_i^k als Basis, und die operatorabhängigen Basisfunktionen ψ_i^k als Basis des Testraumes, dann ergeben sich mit der FE-Methode die Elemente der Steifigkeitsmatrix zu

$$(L_{ij})_k = \int (\varphi_i^k)_x d(\psi_j^k)_x dx.$$

Wegen $\chi_i^{k-1} := \psi_i^{k-1} - \varphi_i^{k-1}$ läßt sich dies schreiben als

$$(L_{ij})_k = \int (\varphi_i^k)_x d(1 + (\chi_j^k)_x / (\varphi_j^k)_x)(\varphi_j^k)_x dx.$$

Dies entspricht dem in Gleichung 187 beschriebenen Energieskalarprodukt $\tilde{a}$. Damit haben wir explizit die Diskretisierung mit operatorabhängigen Basisfunktionen zurückgeführt auf eine Diskretisierung mit Hut-Basisfunktionen einer Differentialgleichung mit verändertem Diffusionskoeffizienten $d(x)(1 + (s_j^k)_x(x))$ anstelle von $d(x)$. Weil die Diskretisierung mit Hut-Basisfunktionen der lokalen (über die einzelnen Gitterzellen) arithmetischen Mittelung des Diffusionskoeffizienten entspricht, erhalten wir damit den durch die Galerkinapproximation mit operatorabhängiger Prolongation und Restriktion bestimmten Diffusionskoeffizienten des Intervalls $[x_j, x_{j+1}]$ zu

$$d^{MG-hom} = \int_{x_j}^{x_{j+1}} d\left(1 + (s_j^k)_x\right) dx.$$

Dabei bezeichnet $(s_j^k)_x := \frac{(\chi_j^k)_x}{(\varphi_j^k)_x}$ wegen $(\varphi_j^k)_x(x) = 1/h_k$ und 200 die Lösung des lokalen Problems

$$-(dw)_x = d_x \tag{201}$$

mit Null-Randbedingungen. In völliger Analogie dazu hatten wir bei der Homogenisierung nach 36 und 32

$$d^{hom} = \int_Y d(1 + w)dx$$

mit w der Lösung von

$$-(dw)_x = d_x.$$

Wegen $s_j^k(x_i) = s_j^k(x_{i+1}) = 0$ und wegen 201 gilt

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (s_j^k)_x d(1 + (s_j^k)_x)dx = s_j^k d(1 + (s_j^k)_x|_{x_i}^{x_{i+1}} - \int_{x_i}^{x_{i+1}} s_j^k(d(1 + (s_j^k)_x))_x dx = 0,$$

und deswegen auch

$$d^{MG-hom} = \int_{x_j}^{x_{j+1}} \left(1 + (s_j^k)_x\right) d\left(1 + (s_j^k)_x\right) dx,$$

in Analogie zur Darstellung der homogenisierten Diffusion in 41. Damit sind die homogenisierte Diffusion und die durch die Galerkinapproximation mit operator- bzw. matrixabhängiger Prolongation und Restriktion (die im eindimensionalen Fall ja gleich den exakten energieabhängigen Verfahrenskomponenten sind) bestimmte Diffusion gleich.

4.4 Einige Bemerkungen zur expliziten Diskretisierung der Modellgleichung mit Hilfe von Renormalisierung und Homogenisierung

Wie sich die Galerkinapproximation im Diskreten als Modellierungsverfahren zur Bestimmung effektiver Operatoren nutzen läßt, lassen sich umgekehrt die Methoden zur Bestimmung von effektiven Operatoren wie Renormalisierung und Homogenisierung dazu nutzen, matrixabhängige Verfahrenskomponenten für MG-Algorithmen zu bestimmen. Die Grobgitteroperatoren in den MG-Verfahren sollen ja gute Approximationen des Feingitteroperators und damit des kontinuierlichen Operators darstellen. Wie wir schon erwähnt haben, geben uns die in Kapitel 2 vorgestellten Näherungsmethoden zur Bestimmung effektiver Diffusionskoeffizienten für die Modellgleichung Möglichkeiten, durch explizite Diskretisierung auf jedem Gitter, Grobgitteroperatoren zu bestimmen. Vor der Diskretisierung auf jedem Gitter wird jeder Gitterzelle eine Näherung des effektiven Diffusionskoeffizienten zugewiesen und anschließend bzgl. der so entstehenden Verteilung des Diffusionskoeffizienten auf jedem Gitter direkt diskretisiert.

Der Vollständigkeit halber werden wir im folgenden kurz auf die Bestimmung von Grobgitteroperatoren durch explizite Diskretisierung auf jedem Level mit Hilfe der Methode der Finiten-Volumen eingehen, wie sie z.B. in [ALC81] benutzt wird, und dann Grobgitterdiskretisierungen mit Hilfe von Renormalisierung und Homogenisierung betrachten. Wie wir bereits wissen, sollen die Grobgitteroperatoren Näherungen des Schurkomplements der jeweiligen Feingittermatrix darstellen. Bei der Diskretisierung mit finiten Volumen bzw. über vorhergehende Renormalisierung entstehen auf den groben Gittern jedoch immer Operatoren, die keine Querableitungen enthalten, die also Diskretisierungen von kontinuierlichen Operatoren der Form

$$a\partial_{xx} + b\partial_{yy}$$

darstellen. Die Querableitung ∂_{xy} kommt nicht vor. Im allgemeinen wird dies jedoch dem grobskaligen Verhalten der Lösung des Problems nicht gerecht werden, wie wir in Kapitel 5 noch genauer sehen werden.

4.4.1 Der eindimensionale Fall

Wird die Differentialgleichung $(d(x)u(x)_x)_x) = f(x)$ z.B. mit finiten Differenzen auf dem Gitter Ω_k (vgl. Abb. 20) diskretisiert, so erhält man in x_{IF+1} den Stern

$$L_k{}^*(x_{IF+1}) = \frac{1}{h_k}\left[\begin{array}{ccc} -d^k_{IF+1} & d^k_{IF+1} + d^k_{IF+2} & -d^k_{IF+2} \end{array}\right], \tag{202}$$

mit $d^k_{IF+1} = d(x_{IF+1} - h_k/2)$.

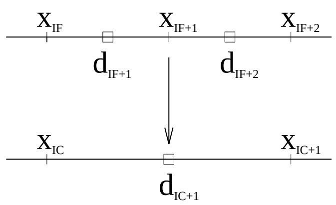

Abb. 20: 1-D: Fein- und Grobgitter

Die Forderung

$$L_k P^k_{k-1} u_k(x_l) = 0 \tag{203}$$

für $x_l \in \Omega_k \setminus \Omega_{k-1}$ liefert die matrixabhängige Prolongation (vergleiche Abbildung 20)

$$P^k_{k-1}{}^*(x_{IC}) = \left[\begin{array}{ccc} \frac{d^k_{IF}}{d^k_{IF-1}+d^k_{IF}} & 1 & \frac{d^k_{IF+1}}{d^k_{IF+1}+d^k_{IF+2}} \end{array}\right] \text{ für } x_{IC} \in \Omega_{k-1}. \tag{204}$$

(vergleiche dazu Gleichung 114) und damit über die Galerkinapproximation den Grobgitterstern

$$L_{k-1}{}^*(x_{IC}) = \frac{1}{h_{k-1}}\left[\begin{array}{ccc} -\frac{d^k_{IF-1}d^k_{IF}}{d^k_{IF-1}+d^k_{IF}} & \frac{d^k_{IF-1}d^k_{IF}}{d^k_{IF-1}+d^k_{IF}} + \frac{d^k_{IF+1}d^k_{IF+2}}{d^k_{IF+1}+d^k_{IF+2}} & \frac{d^k_{IF+1}d^k_{IF+2}}{d^k_{IF+1}+d^k_{IF+2}} \end{array}\right] \tag{205}$$

für $x_{IC} \in \Omega_{k-1}$. Damit erhalten wir den Grobgitterdiffusionskoeffizienten des Intervalls $[x_{IC}, x_{IC+1}]$ zu

$$d_{IC+1}^{k-1} = \frac{d_{IF+1}^k d_{IF+2}^k}{d_{IF+1}^k + d_{IF+2}^k}, \tag{206}$$

also das harmonische Mittel der beiden zugehörigen Feingitterwerte. Selbiges liefern auch die Renormalisierung und die Homogenisierung, die in einer Dimension ja in dem im vorigen Kapitel beschriebenen Sinne mit der matrixabhängigen Galerkinapproximation zusammenfällt. Matrixabhängige Galerkinapproximation und explizite Diskretisierung unter Zuhilfenahme der Renormalisierung oder der Homogenisierung liefern also in einer Dimension die gleichen Grobgitteroperatoren.

Dieses Ergebnis fällt direkt mit der Forderung nach Stetigkeit des Flußes, die ja durch die Forderung 203 diskret modelliert wird, zusammen. Wir führen hier die zugehörigen Überlegungen kurz aus: Die Forderung der Stetigkeit des Flußes du_x an der Stelle x_{IF+1}^k beschreiben wir diskret durch

$$d_{IF+1}^k (u_{IF+1}^k - u_{IF}^k)/h_k = d_{IF+2}^k (u_{IF+2}^k - u_{IF+1}^k)/h_k. \tag{207}$$

Den Fluß an derselben Stelle diskretisieren wir auf dem groben Gitter durch

$$d_{IC+1}^{k-1}(u_{IC}^{k-1} - u_{IC+1}^{k-1})/2h_k.$$

Mit der Forderung der Flußerhaltung beim Übergang auf das nächstgröbere Gitter erhalten wir die dann die Bedingung

$$d_{IC+1}^{k-1}(u_{IC}^{k-1} - u_{IC+1}^{k-1})/2 = d_{IF+1}^k (u_{IF+1}^k - u_{IF}^k) = d_{IF+2}^k (u_{IF+2}^k - u_{IF+1}^k).$$

Auflösen nach d_{IC+1}^{k-1} ergibt dann für die Grobgitterdiffusion ebenfalls 206.

4.4.2 Der zweidimensionale Fall

In zwei Dimension ist es i.a. nicht mehr möglich, die Prolongation in den Punkten, die nicht auch im nächstgröberen Gitter liegen, als exakte lokale Inverse der Feingittermatrix zu wählen. Analog dazu lassen sich nicht mehr die exakten effektiven Grobgitterdiffusionswerte bestimmen, um sie zur Diskretisierung zu verwenden. Jedoch haben wir mit den in Kapitel 2 vorgestellten Verfahren der Homogenisierung bzw. Renormalisierung Näherungsmethoden für die effektive Diffusion kennengelernt, die wir verwenden können.

Sei $D = diag(d_{11} \quad d_{22})$ eine Diagonalmatrix. Diskretisiert man dann die Modellgleichung 9 in zwei Dimensionen mittels finiter Volumen, so erhält man, der Notation in [ALC81] folgend, für L_k den Stern

$$L_k(x_i, y_j) = \begin{bmatrix} 0 & -A_{i,j+1/2}^k & 0 \\ -B_{i-1/2,j}^k & A_{i,j+1/2}^k + A_{i,j-1/2}^k + B_{i-1/2,j}^k + B_{i+1/2,j}^k & -B_{i+1/2,j}^k \\ 0 & -A_{i,j-1/2}^k & 0 \end{bmatrix}, \tag{208}$$

mit

$$A_{i,j+1/2}^k = \frac{1}{2}(d_{22}(x_i + h_k/2, y_j + h_k/2) + d_{22}(x_i - h_k/2, y_j + h_k/2)), \tag{209}$$

$$B_{i+1/2,j}^k = \frac{1}{2}(d_{11}(x_i + h_k/2, y_j + h_k/2) + d_{11}(x_i + h_k/2, y_j - h_k/2)). \tag{210}$$

Das Gitter Ω_k ist, mit den zugehörigen Werten der Materialfunktion D (wobei ein offensichtlicher Wechsel der Notation durchgeführt wird) in Abb. 21 zu sehen. Für

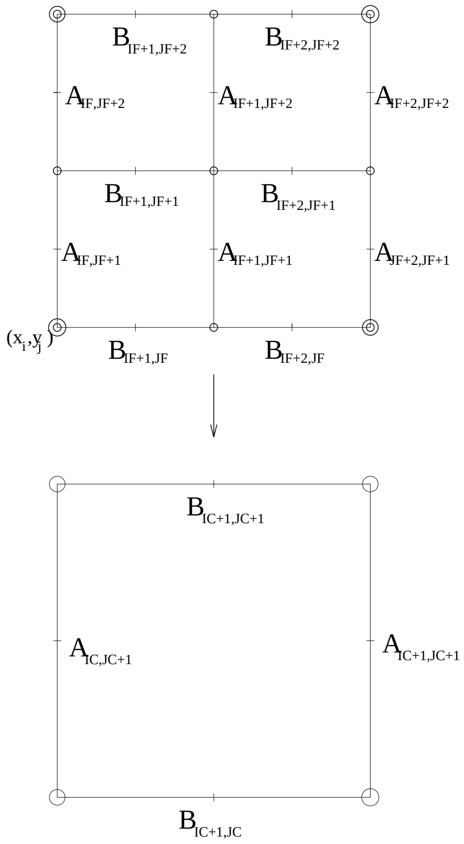

Abbildung 21: 2-D: Fein- und Grobgitter

die Diskretisierung auf dem nächstgröberen Gitter Ω_{k-1} werden wie im eindimensionalen Fall die B^{k-1}'s und die A^{k-1}'s auf dem gröberen Gitter benötigt (vgl. Abb. 21). Dazu kann man auf den eindimensionalen Fall und die dort vorliegende analytische Lösung zurückgreifen. So könnte man z.B. $B^{k-1}_{IC+1,JC}$ (siehe Abb. 21) als harmonisches Mittel der zugehörigen Feingitterwerte $B^k_{IF+1,JF}$ und $B^k_{IF+2,JF}$ – für die anderen Werte analog – definieren. Dies liefert jedoch im allgemeinen keine guten Ergebnisse.

In [ALC81] wird deswegen eine andere Wahl der Grobgitterdiffusionswerte mit Hilfe der Homogeniserung motiviert: Wie wir im Abschnitt über die Homogenisierung in einem Beispiel gesehen haben, schlägt die Theorie der Homogenisierung zur Definition der B^{k-1}'s das harmonische Mittel in x-Richtung und das arithmetische in y-Richtung vor. So wird z.B. definiert

$$\begin{aligned} B^{k-1}_{IC+1,JC} \quad := \quad & \frac{1}{2} f\left(\frac{1}{B^k_{IF+1,JF}}, \frac{1}{B^k_{IF+2,JF}}\right) + \frac{1}{4}\left(f\left(\frac{1}{B^k_{IF+1,JF+1}}, \frac{1}{B_{IF+2,JF+1}}\right)\right. \\ & \left. + f\left(\frac{1}{B^k_{IF+1,JF-1}}, \frac{1}{B_{IF+2,JF-1}}\right)\right), \end{aligned} \tag{211}$$

mit

$$f(x,y) = \frac{2xy}{x+y}$$

dem harmonischen Mittel von x und y. Analog dazu erhält man die Diffusionskoeffizienten in y-Richtung (A^{k-1}).

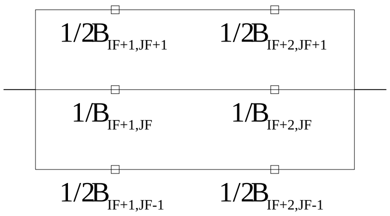

Abbildung 22: Netzwerk zur Bestimmung von genäherten effektiven Diffusionswerten

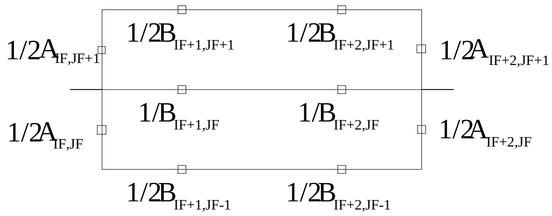

Abbildung 23: Netzwerk zur Bestimmung von genäherten effektiven Diffusionswerten

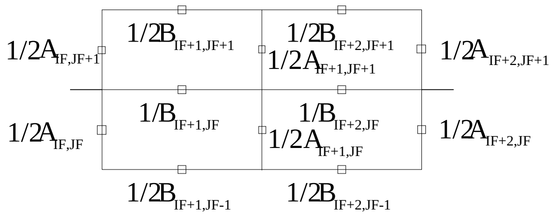

Abbildung 24: Netzwerk zur Bestimmung von genäherten effektiven Diffusionswerten

Die Wahl von 211 kann auch durch die bei der Renormalisierung verwendeten Ideen motiviert werden: Betrachtet man das in Abb. 21 zu sehende Gitter analog zur Vorgehensweise der Renormalisierung als Netzwerk mit Widerständen, so lassen sich verschiedene Ansätze zur Bestimmung der Grobgitterdiffusionswerte herleiten. Für die Bestimmung von $B^{k-1}_{IC+1,JC}$ läßt sich z.B. das Netzwerk Abb. 22 benutzen. Damit erhalten wir genau 211. Statt des Netzwerkes aus Abbildung 22 lassen sich erweiterte Netzwerke, wie z.B. die in Abbildung 23 oder 24 gezeigten, verwenden.

In ähnlicher Weise ließe sich auch direkt die Renormalisierung nutzen, um Grobgitteroperatoren zu bestimmen. Sie definiert ja auf jedem Gitter (renormalisierte) Diffusionskoeffizienten, und damit renormalisierte Operatoren, aus denen sich durch Diskretisierung wie auf dem feinsten Level Grobgitteroperatoren bestimmen lassen. Vor dem Diskretisierungsprozeß werden also auf jedem Level die renormalisierten Diffusionskoeffizienten bestimmt, wie in Abbildung 25 für zwei Level und zwei Grobgitterzellen angedeutet. Dann wird z.B. mit der finiten Elementmethode auf jedem Level diskretisiert. Wir werden u.a. genau dieses Verfahren zur Bestimmung von Grobgitteroperatoren, zusammen mit verschiedenen Prolongationen und Restriktionen in Abschnitt 5 untersuchen. Eine ähnliche Vorgehensweise wie diese wird in [EDW93] allerdings für eine cell-centered Diskretisierung vorgeschlagen.

Wie gesagt liefern all diese Verfahren, aus den zu Beginn des Abschnitts angeführten Gründen, im allgemeinen keine guten Approximationen des Feingitteroperators bzw. des kontinuierlichen Operators. Dies äußert sich auch im Konvergenzverhalten der

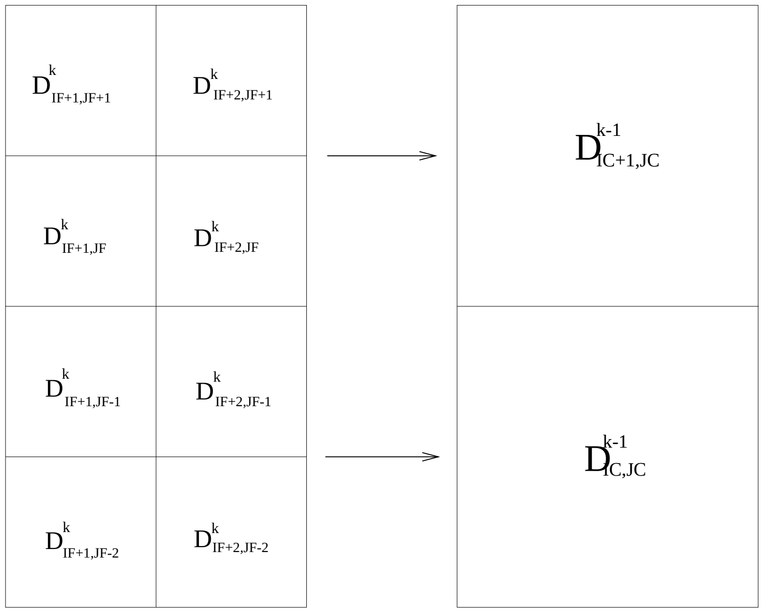

Abbildung 25: Zur Bestimmung der Grobgitterdiffusionswerte mit Hilfe der Renormalisierung

zugehörigen MG-Algorithmen.

Beschränkt man sich im MG-Verfahren auf zwei Level, so läßt sich bei periodischen Medien auch direkt der diskretisierte homogenisierte Operator als Grobgitteroperator verwenden. D.h. als Grobgitteroperator wird eine Diskretisierung von $D^{hom}\Delta$ verwendet. Für ähnliche Möglichkeiten der Bestimmung von Grobgitteroperatoren für periodische Medien mit Hilfe der Homogenisierung und Konvergenzuntersuchungen zu den entstehenden MG-Algorithmen siehe [ENG93].

5 Numerische Experimente

5.1 Das Problem

Im folgenden betrachten wir die Gleichung

$$-\nabla(D\nabla u) = f \tag{212}$$

auf dem Einheitsquadrat $\Omega = (0,1) \times (0,1)$, mit der Dirichlet-Randbedingung

$$u(x,y) = 0. \tag{213}$$

Insbesondere werden wir verschiedene Diffusionskoeffizienten $D = D(x,y)$ betrachten, der im folgenden immer eine stückweise konstante, matrixwertige Funktion sein soll (stückweise konstant innerhalb einer Masche des verwendeten feinsten Gitters), die starke Sprünge aufweist.

Für alle Probleme, die wir im folgenden behandeln werden, gehen wir also davon aus, daß die Sprünge im Diffusionskoeffizienten (bezogen auf das feinste Gitter) genau auf den Gitterlinien stattfinden, d.h, der Diffusionskoeffizient ändert sich innerhalb einer Masche des feinsten Gitters nicht.

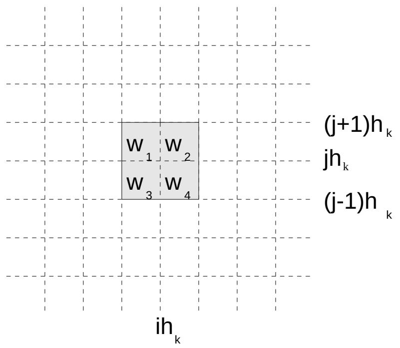

Abb. 26: Zur Diskretisierung

In Abbildung 26 umrandet die dunkle Fläche exemplarisch den Träger der Basisfunktion $\varphi_{i,j}$ zum Punkt (ih_k, jh_k). Die Einträge der Diskretisierungsmatrix sind dann bestimmt durch

$$\int_\Omega (\nabla\varphi_{i,j})^t D \nabla\varphi_{k,l} dx = \int_{supp(\varphi_{i,j}) \cap supp(\varphi_{k,l})} (\nabla\varphi_{i,j})^t D \nabla\varphi_{k,l} dx. \tag{214}$$

Bezeichnen wir den Diffusionskoeffizienten in w_s jeweils mit

$$D = \begin{pmatrix} d_{11}^s & d_{12}^s \\ d_{21}^s & d_{22}^s \end{pmatrix},$$

so ergibt sich als Stern der Diskretisierungsmatrix im Punkt (ih_k, jh_k)

$$\frac{1}{6h_l^2} \left[\begin{array}{c|c|c} \begin{array}{c} -(d_{11}^1 + d_{22}^1) \\ +\frac{1}{4}(d_{12}^1 + d_{21}^1) \end{array} & \begin{array}{c} (d_{11}^1 + d_{11}^2) \\ -2(d_{22}^1 + d_{22}^2) \end{array} & \begin{array}{c} -(d_{11}^2 + d_{22}^2) \\ -\frac{1}{4}(d_{12}^2 + d_{21}^2) \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} (d_{22}^1 + d_{22}^3) \\ -2(d_{11}^1 + d_{11}^3) \end{array} & \sum & \begin{array}{c} (d_{22}^2 + d_{22}^4) \\ -2(d_{11}^2 + d_{11}^4) \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} -(d_{11}^3 + d_{22}^3) \\ -\frac{1}{4}(d_{12}^3 + d_{21}^3) \end{array} & \begin{array}{c} (d_{11}^3 + d_{11}^4) \\ -2(d_{22}^3 + d_{22}^4) \end{array} & \begin{array}{c} -(d_{11}^4 + d_{22}^4) \\ +\frac{1}{4}(d_{12}^4 + d_{21}^4) \end{array} \end{array} \right],$$

wobei $\sum$ die mit einem negativen Vorzeichen versehene Summe der Nichtzentraleinträge des Sterns bedeutet, in diesem Fall also z.B.

$$\sum = \sum_{s+1}^{4} 2(d_{11}^s + d_{22}^s) - (d_{12}^1 + d_{21}^1 + d_{12}^4 + d_{21}^4 - d_{12}^2 - d_{21}^2 - d_{12}^3 - d_{21}^3)/4$$

Ist der Diffusionskoeffizient in x- und in y-Richtung gleich, d.h. eine skalare Funktion, so reduziert sich obiger Stern wegen $d^s = d_{11}^s = d_{22}^s$ auf

$$\frac{1}{3h_k^2} \begin{bmatrix} -d^1 & -(d^1 + d_2)/2 & -d^2 \\ -(d^1 + d^3)/2 & \sum & -(d^2 + d^4)/2 \\ -d^3 & -(d^3 + d^4)/2 & -d^4 \end{bmatrix}.$$

Wie wir in Kapitel 3 erläutert haben, konvergieren MG-Verfahren mit der Standardwahl der bilinearen Interpolation als Prolongation und der adjungierten Abbildung als Restriktion bei Anwendung auf Interfaceprobleme wie 212 nur sehr langsam, bzw. brechen gänzlich zusammen. Die durch die Galerkinapproximation entstehenden Grobgitteroperatoren approximieren den Feingitteroperator bzw. die kontinuierliche Differentialgleichung nur sehr schlecht, die Approximation der Lösung bzw. des Fehlers auf den groben Gittern ist ungenügend und die Iteration auf den groben Gittern verlangsamt die MG-Konvergenz oder zerstört sie sogar.

Bei den folgenden Experimenten verwenden wir im MG-Algorithmus verschiedene Prolongationen und Restriktionen und damit verschiedene Grobgitterdiskretisierungen.

Unser Hauptaugenmerk liegt dabei im ersten Abschnitt auf dem Konvergenzverhalten des CS-Schemas mit verschiedenen Prolongationen, Restriktionen und Grobgitteroperatoren und im zweiten auf den verschiedenen hier beschriebenen Modellierungsverfahren zur Bestimmung von Grobskalenoperatoren, die direkt die grobskalige Lösung des Problems beschreiben und dabei vor allem auf der Struktur der entstehenden Grobgitteroperatoren, und der Güte der Approximation des effektiven Operators durch die verschiedenen in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren einfacher Mittelwertbildungen, der Renormalisierung, der Homogenisierung und insbesondere der mit matrixabhängiger Galerkinapproximation gebildeten Grobgitteroperatoren. Besonderen Wert legen wir dabei auf den Zusammenhang zwischen dem Konvergenzverhalten von MG-Algorithmen und der Güte der Abschätzung der effektiven Diffusionskoeffizienten bzw. Operatoren.

Die Grobgitterdiskretisierungen sollen so gewählt werden, daß die Lösung des kontinuierlichen Problems bzw. der Lösung des diskreten Problems auf dem feinsten verwendeten Gitter möglichst gut approximiert wird. Für unser Modellproblem bieten sich, wie wir in den vorhergehenden Kapiteln gesehen haben, prinzipiell zwei duale Vorgehensweisen an:

- Die explizite Diskretisierung auf den gröberen Gittern nach dem gleichen Diskretisierungschema wie auf dem feinsten Gitter. Dazu werden vor der Diskretisierung auf jedem Gitter Näherungen für die effektive Diffusion berechnet, die dann auf den jeweiligen Gittern zur Diskretisierung verwendet werden. Die Näherungen der effektiven Diffusionskoeffizienten sorgen für die approximative Flußerhaltung beim Übergang zwischen zwei Gittern und ermöglichen dadurch mehr oder weniger gute Approximationen der Lösung durch die Grobgitteroperatoren, die dann ja Näherungen der effektiven Operatoren darstellen. Schematisch läßt sich dieses Vorgehen also folgendermaßen darstellen:

$$D_k \longrightarrow D_l, (l = k-1, k-2, \ldots, 1) \longrightarrow L_l, (l = k-1, k-2, \ldots, 1)$$

Aus der Materialfunktion werden auf den groben Gittern diskrete Diffusionskoeffizienten bestimmt, die dann direkt die Grobgitteroperatoren bestimmen.

- Die Diskretisierung L_k auf dem feinsten Gitter bestimmt die Prolongationen und Restriktionen, und damit über die Galerkinapproximation auch die Grobgitteroperatoren. Schematisch haben wir also folgende Abhängigkeiten: $L_k \longrightarrow P_{k-1}^k, R_k^{k-1}, L_{k-1} = R_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k \longrightarrow \cdots \longrightarrow L_0 = R_k^0 L_k P_0^k$

5.2 Numerische Experimente zum Konvergenzverhalten verschiedener CS-MG-Schemata

In diesem Abschnitt präsentieren wir einige numerische Beispiele, die Auskunft über das Konvergenzverhalten verschiedener in dieser Arbeit beschriebener MG-Schemata geben. Bei allen Beispielen verwenden wir das in Abschnitt 3.1.3 beschriebene CS-Schema, mit (der Einfachheit halber) alternierendem punktweisem Gauß-Seidel als Glätter und jeweils einem Vor- und einem Nachglättungsschritt. (Für Probleme, die mit diesem Glätter auftreten können siehe z.B. [GRI90]). Als gröbstes Gitter im MG-Zyklus verwenden wir immer den Level 2 (d.h. ein Gitter mit 3×3 inneren Punkten) und glätten dort ebenfalls durch alternierenden punktweisen Gauß-Seidel und zwar mit 6 Iterationen. Alle Beispiele verwenden ein feinstes Gitter mit 63×63 inneren Punkten. Immer startet der MG-Prozeß auf dem feinsten Gitter, mit einem Startwert $u \equiv 0$. Für die rechte Seite in der Differentialgleichung 212 gilt für alle Beispiele $f \equiv 1$, und als Randbedingung wird $u|_{\delta\Omega} = 0$ verwendet. Die Tiefe des MG-Algorithmus beträgt damit 5 Level. Konkret verwenden wir als Verfahrenskomponenten die folgenden Varianten:

- Die Standardprolongation und Restriktion zusammen mit den über die Galerkinapproximation definierten Grobgitteroperatoren. Das dadurch definierte Verfahren wird im folgenden mit *Standard* bezeichnet. Dieses Verfahren fällt zusammen mit einer arithmetischen Mittelung des Diffusionskoeffizienten auf jeder Zelle und expliziter Diskretisierung auf jedem Gitter mit Hut-Basisfunktionen.
- Die matrixabhängige Prolongation und Restriktion nach Dendy (siehe Abschnitt 3.4.3), mit der Galerkinapproximation angewandt auf die exakten Gleichungen (Siehe Abschnitt 3.5 für eine Beschreibung der beiden möglichen Varianten bei der Galerkinapproximation) zur Bestimmung der Grobgitteroperatoren: *D*
- Die matrixabhängigen Prolongationen und Restriktionen nach Dendy, und als Grobgitteroperatoren die durch explizite Diskretisierung der renormalisierten Differentialgleichungen mit der Methode der finiten Elemente entstandenden Operatoren (siehe Abschnitt 2.3.2 bzw. 4.4): *D Renormal*
- Selbige Grobgitteroperatoren, jedoch mit der Standardrestriktion und der matrixabhängigen Prolongation nach Dendy: *St D Renormal*

In einigen Fällen betrachten wir außerdem:

- Selbige Grobgitteroperatoren, jedoch mit der Standardrestriktion und der Standardprolongation: *St Renormal*
- Die matrixabhängige Prolongation und Restriktion nach de Zeeuw (siehe Abschnitt 3.4.3), mit der Galerkinapproximation angewandt auf die exakten Gleichungen: *Z*

- Matrixabhängige Prolongation nach Dendy zusammen mit der Standardrestriktion mit zugehöriger Petrov-Galerkinapproximation d.h.

  $$L_{k-1} = \tilde{R}_k^{k-1} L_k P_{k-1}^k,$$

  wobei P_{k-1}^k die Prolongation nach Dendy und $\tilde{R}_k^{k-1}$ die Standardrestriktion bezeichne: *St D*

Bemerkung: Bei den Verfahren *Renormal* ergibt sich folgendes Problem: Ist der Diffusionskoeffizient wie in Abbildung 27 zu sehen, mit z.B. $d_1 << d_2$ und $d_1 = 1$,

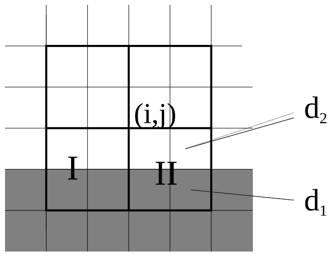

Abb. 27: Zur expliziten Diskretisierung mit Hut-Basisfunktionen auf jedem Gitter mit vorhergehender Renormalisierung des Diffusionskoeffizienten

so ergibt sich in x-Richtung als renormalisierter Diffusionskoeffizient in den Grobgitterzellen I und II des Gitters Ω_{k-1} $d_x^{k-1} \approx d_2/2$ und in y-Richtung $d_y^{k-1} \approx d_1$. Dann ergibt sich bei Diskretisierung auf dem groben Gitter Ω_{k-1} zum Punkt (i,j) ein Stern der Art

$$\begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ -d_x^{k-1} - d_y^{k-1} & 2d_x^{k-1} - 4d_y^{k-1} & -d_x^{k-1} - d_y^{k-1} \end{bmatrix},$$

also näherungsweise

$$\begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ -d_2/2 & d_2 & -d_2/2 \end{bmatrix}.$$

Damit enthält die entstehende Steifigkeitsmatrix nicht mehr nur negative Außerdiagonaleinträge, wie auf dem feinsten Gitter, und ist damit auch keine M-Matrix mehr. Das heißt bei Iterationsverfahren wie Gauß-Seidel ist die Konvergenz nicht mehr gesichert. Damit ist zu erwarten, daß die Mehrgitterverfahren, die mit so bestimmten Grobgitteroperatoren und der Gauß-Seidel-Iteration als Glätter arbeiten, bei extremen Werten des Diffusionskoeffizienten nicht konvergieren werden.

Das Konvergenzverhalten messen wir gemittelt über die Zahl der letzten 7 durchgeführten Zyklen mit

$$\rho = (|r_i|_2 / |r_{i-7}|_2)^{\frac{1}{7}}. \tag{215}$$

Dabei bezeichnet r_i den Residuumsvektor nach i Zyklen des CS-MG-Schemas. $|.|_2$ bezeichnet dabei das diskrete Analogon der L_2-Norm

$$|v|_2 = \sqrt{v^t v}. \tag{216}$$

Die Iteration wird nach dem i-ten Schritt abgebrochen, wenn das Kriterium

$$|r_i| < 10^{-8} \tag{217}$$

erfüllt ist, oder wenn 50 Zyklen durchlaufen sind. (Man beachte, daß wir das CS-Schema in der multiplizierten Form betrachten, bei der das Gleichungssystem mit dem Faktor h_k^2 versehen wird.)

Beispiel 1 ist wie in Abbildung 28 zu sehen und der Diffusionskoeffizient D ist bestimmt durch

$$D(x) = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{in } Y_{II} \\ \alpha\delta_{ij} & \text{in } Y_I \end{cases}$$

Die Sprünge des Diffusionskoeffizienten fallen also nur auf dem feinsten Gitter mit Gitterlinien zusammen und damit ist der Diffusionskoeffizient auf den gröberen Gittern nicht mehr exakt darstellbar. In Tabelle 1 sind die Ergebnisse festgehalten.

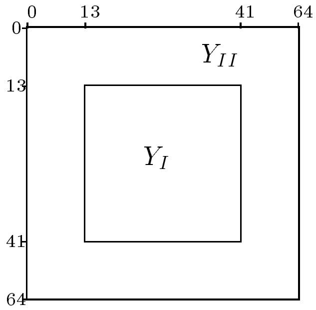

Abb. 28: Gebietseinteilung bei Beispiel 1

Tabelle 1: Konvergenzraten zu Beispiel 1

α	*Standard*	*St Renorm*	*D Renorm*	*St D Renorm*	*D*	*Z*	*St D*
10^{-4}	0.468	0.779	0.465	0.465	0.0890	0.0713	0.0982
10^{-1}	0.466	0.749	0.443	0.437	0.0834	0.0748	0.0982
10^{-2}	0.450	0.540	0.303	0.267	0.0842	0.0801	0.0979
10^{-1}	0.321	0.169	0.106	0.0711	0.0811	0.0792	0.0933
1	0.0721	0.0721	0.0721	0.0721	0.0721	0.0786	0.0721
10	0.500	0.253	0.185	0.202	0.257	0.288	0.252
10^2	0.921	*div*	0.833	0.837	0.855	0.856	0.853

Deutlich erkennbar sind die überlegenen Konvergenzeigenschaften der Verfahren D, *St* D und Z, die mit der Galerkinapproximation bzw. der Petrov-Galerkinapproximation und matrixabhängigen Transportoperatoren arbeiten. Die Konvergenzraten dieser Verfahren bleiben bei kleiner werdendem α relativ stabil. Für moderate Werte von α zeigen auch die Verfahren, die mit den aus der Renormalisierung bestimmten Grobgitterdiffusionswerten arbeiten (*Renormal*) relativ gute Konvergenzraten, die sich aber bei einer extremeren Wahl für α schnell verschlechtern und aus den oben erläuterten Gründen sogar divergieren.

Die leicht unterschiedlichen Konvergenzraten für die Laplacegleichung ($\alpha = 1$) beim Verfahren mit nach de Zeeuw gebildeten Verfahrenskomponenten erklären sich aus leicht variierten Gewichten am Rand.

Die Gebietseinteilung von *Beispiel* 2 ist Abbildung 29 zu entnehmen und ist an ein Beispiel aus [ALC81] angelehnt. Für den Diffusionskoeffizienten gilt

$$D(x) = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{in } Y_I = Y_1 \cup Y_2 \\ \alpha\delta_{ij} & \text{in } Y_{II} \end{cases}$$

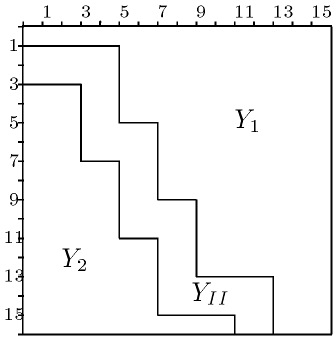

Abb. 29: Gebietseinteilung bei Beispiel 2

Y_{II} teilt Y_I in zwei disjunkte Gebiete auf, die bei entsprechender Wahl von α vollständig entkoppelt sind. Punkte in Y_1 sollten dann auch auf gröberen Gittern nicht mit Punkten aus Y_2 gekoppelt sein. Durch die mit matrixabhängigen Prolongationen gebildeten Grobgitteroperatoren wird dies bis zu einem gewissen Grad (eingeschränkt durch die fest vorgegebene Geometrie der Grobgitter) erfüllt, und so liefern die zugehörigen Verfahren D und Z auch die besten Konvergenzraten, wie es Tabelle 2 zu entnehmen ist.

Tabelle 2: Konvergenzraten zu Beispiel 2

α	*Standard*	*St Renormal*	*D Renormal*	*St D Renormal*	D	Z
10^{-4}	0.289	0.287	0.287	0.287	0.0842	0.0858
10^{-3}	0.283	0.274	0.273	0.269	0.0841	0.0860
10^{-2}	0.282	0.190	0.194	0.171	0.0827	0.0871
10^{-1}	0.229	0.102	0.0877	0.0692	0.0749	0.0873
1	0.0721	0.0721	0.0721	0.0721	0.0786	0.0721
10	0.398	0.145	0.187	0.0874	0.0865	0.117
10^2	0.605	*div*	*div*	*div*	0.203	0.181
10^3	0.634	*div*	*div*	*div*	0.234	0.193

Die Verfahren *Renormal* erweisen sich wieder für moderate Werte von α als brauchbar, wohingegen sie für extremere Werte nicht besser als die Standard-MG-Methode abschneiden oder sogar divergieren. Durch die Querschichtung des Materialkoeffizienten in diesem Beispiel werden in die Grobskalenoperatoren Querableitungen induziert, d.h. der effektive Materialkoeffizient ist auf den groben Skalen nicht mehr diagonal. Die matrixabhängigen Verfahren D und Z tragen dem Rechnung, indem sie diese Querableitungen diskret nachbilden, wie wir im nächsten Abschnitt genauer sehen werden. Die Verfahren *Renormal* und *Standard* hingegen erzeugen auch auf den groben Gittern Operatoren, die keine Querableitungen enthalten und deswegen keine guten Approximationen der effektiven Operatoren darstellen. Die Renormalisierung ergibt jedoch bessere Abschätzungen für die effektiven Diffusionskoeffizienten als das arithmetische Mittel, wie es die Standard-MG-Methode implizit auf den groben Gittern ja bildet. Daraus erklären sich die (im Falle der Konvergenz) deutlich besseren Konvergenzraten von *S Renormal* und *D Renormal* gegenüber *Standard*.

Beispiel 3 (siehe Abbildung 30) ist eine leicht Variation von Beispiel 2. Einige Teilgebiete von Y_{II} sind variabel in ihrer Breite. Damit kann sichergestellt werden, daß manche Unstetigkeitslinien des Diffusionskoeffizienten nur auf dem feinsten Gitter mit Gitterlinien zusammenfallen. Für $c = 0$ zerfällt Y_{II} in einzelne Rechtecke. Die erzielten Konvergenzraten für $c = 0$ und $c = 8$ sind Tabelle 3 zu entnehmen. Insgesamt ergibt sich dasselbe Bild wie bei Beispiel 2.

Tabelle 3: Konvergenzraten zu Beispiel 3

	Standard		*D Renormal*		*St D Renormal*		*D*	
α/c	0	8	0	8	0	8	0	8
10^{-4}	0.705	0.285	0.274	0.286	0.272	0.286	0.0645	0.0741
10^{-3}	0.701	0.287	0.258	0.271	0.253	0.264	0.0646	0.0737
10^{-2}	0.659	0.275	0.185	0.188	0.181	0.167	0.0994	0.0700
10^{-1}	0.381	0.189	0.0866	0.0884	0.0951	0.0743	0.0721	0.0909
10	0.325	0.278	0.171	0.0905	0.102	0.0838	0.130	0.103
10^2	0.588	0.421	*div*	0.242	0.788	0.214	0.213	0.178
10^3	0.635	0.421	*div*	0.367	*div*	0.361	0.229	0.192
10^4	0.637	0.429	*div*	0.388	*div*	0.388	0.228	0.192
10^5	0.637	0.429	*div*	0.390	*div*	0.390	0.212	0.188

Tabelle 4: Konvergenzraten zum Beispiel mit logarithmischer Verteilung

α	*Standard*	*St Renormal*	*D Renormal*	*St D Renormal*	*D*
10	0.215	0.108	0.110	0.0844	0.0721
100	0.585	0.496	0.802	0.579	0.222
200	0.686	0.782	*div*	0.980	0.299
500	0.769	*div*	*div*	*div*	0.409
1000	0.824	*div*	*div*	*div*	0.491

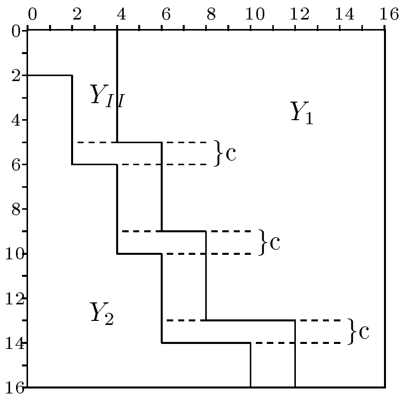

Abb. 30: Gebietseinteilung bei Beispiel 3

Beim letzten Beispiel das wir hier betrachten wollen, ist der Diffusionskoeffizient wieder innerhalb einer Masche des feinsten Gitters konstant, nimmt aber ansonsten für alle Maschen einen Zufallswert an. Tabelle 4 zeigt die Konvergenzraten für eine logarithmisch verteilte Zufallsvariable y, die durch die Transformation einer $[0, ln(\alpha)]$-rechteckverteilten Zufallsvariable x mittels

$$y = e^x \tag{218}$$

ensteht. Dadurch entstehen bedeutend größere relative Sprunghöhen als dies bei einer $[1, \alpha]$-rechteckverteilten Zufallsvariable der Fall ist. Wiederum zeigt sich das überlegene Konvergenzverhalten des Verfahrens D, das mit matrixabhängigen Transportabbildungen als Näherungen der exakten energieabhängigen Verfahrenskomponenten und der Galerkinapproximation arbeitet. Die Verfahren *Renormal* erweisen sich für größere α wieder als unbrauchbar.

Insgesamt sehen wir, daß die mit matrixabhängigen Verfahrenskomponenten und der Galerkinapproximation arbeitenden Verfahren sich dem mit anderen Verfahrenskomponenten arbeitenden Algorithmen als überlegen erweisen. Zurückzuführen ist dies u.a. darauf, daß die durch die matrixabhängige Galerkinapproximation entstehenden Grobgitteroperatoren den Einfluß der durch das Gitter nicht mehr auflösbaren Skalen besser modellieren und damit bessere Approximationen des kontinuierlichen Operators liefern und das Verhalten der kontinuierlichen, exakten, grobskaligen Lösung besser wiederspiegeln. Wie wir noch sehen werden, ergibt sich damit ein direkter Zusammenhang zwischen dem Konvergenzverhalten der MG-Algorithmen und der Güte der Beschreibung der effektiven Operatoren durch die im Algorithmus verwendeten Grobgitteroperatoren.

Zur Illustration sind in Abbildung 31 numerische Lösungen zu den Beispiel $1-3$ mit $\alpha = 10^{-2}$ bzw. $\alpha = 10^{2}$, $f \equiv 1$ und Dirichlet-Null-Randbedingungen (wie oben) zu sehen. In Beispiel 3 ist dabei $c = 0$ gewählt.

5.3 Numerische Experimente zum MG-Homogenisierungsverfahren

In diesem Abschnitt wenden wir uns der Interpretation der Galerkinapproximation als diskretem Homogenisierungsverfahren zu. Wir werden anhand einiger Beispiele beschreiben, wie sich konkret Näherungen effektiver Operatoren und effektiver Diffusionskoeffizienten aus der matrixabhängigen Galerkinapproximation ergeben. Außerdem werden wir diese vergleichen mit den Ergebnissen einfacher Mittelwertbildungen, wie dem arithmetischen Mittel, wie es ja auch durch die Galerkinapproximation die die Standardtransportabbildungen verwendet, implizit gebildet wird, dem geometrischen Mittel und dem harmonischen Mittel, dem renormalisierten Diffusionskoeffizienten und, im Falle periodischer Medien, dem homogenisierten Diffusionskoeffizienten.

Dabei werden wir bei der matrixabhängigen Galerkinapproximation (wenn nicht anders angegeben) die in Abschnitt 3.4.3 beschriebenen matrixabhängigen Prolongationen und Restriktionen nach Dendy verwenden. Erinnern wir uns: Diese Prolongationen berechneten wir als exakte energieabhängige Prolongationen zu einer veränderten (defektbehafteten) Diskretisierung, die sich von der jeweiligen exakten Diskretisierungsmatrix in den zu den Punkten aus $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ gehörigen Gleichungen unterschied. Der Fehler relativ zur exakten energieabhängigen Prolongation wird also in den Punkten aus $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ induziert. In den Punkten aus Ω^{11} sind die Prolongationen ja wieder als exakte lokale Inverse der Steifigkeitsmatrix gewählt, wie es in Abschnitt 3.4.3 beschrieben ist. Es wird sich zeigen, daß die matrixabhängige Galerkinapproximation von allen betrachteten Approximationsmethoden zur näherungsweisen Bestimmung des effektiven Diffusionskoeffizienten in allen betrachteten Beispielen die besten Näherungen liefert. Darüberhinaus wird es möglich sein, den durch den in den Punkten aus $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ bei der matrixabhängigen Galerkinapproximation (gegenüber der exakten energieabhängigen Galerkinapproximation) induzierten Fehler als Differenz der Lösung des Problems mit durch die Galerkinapproximation bestimmtem (MG-homogenisiertem) Diffusionskoeffizienten gegenüber der durch die Homogenisierung bestimmten Lösung sichtbar zu machen.

Im folgenden werden wir das durch die Galerkinapproximation mit matrixanhängigen Verfahrenskomponenten bestimmte Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung von effektiven Operatoren der Kürze halber als MG-Homogenisierungverfahren bezeichnen.

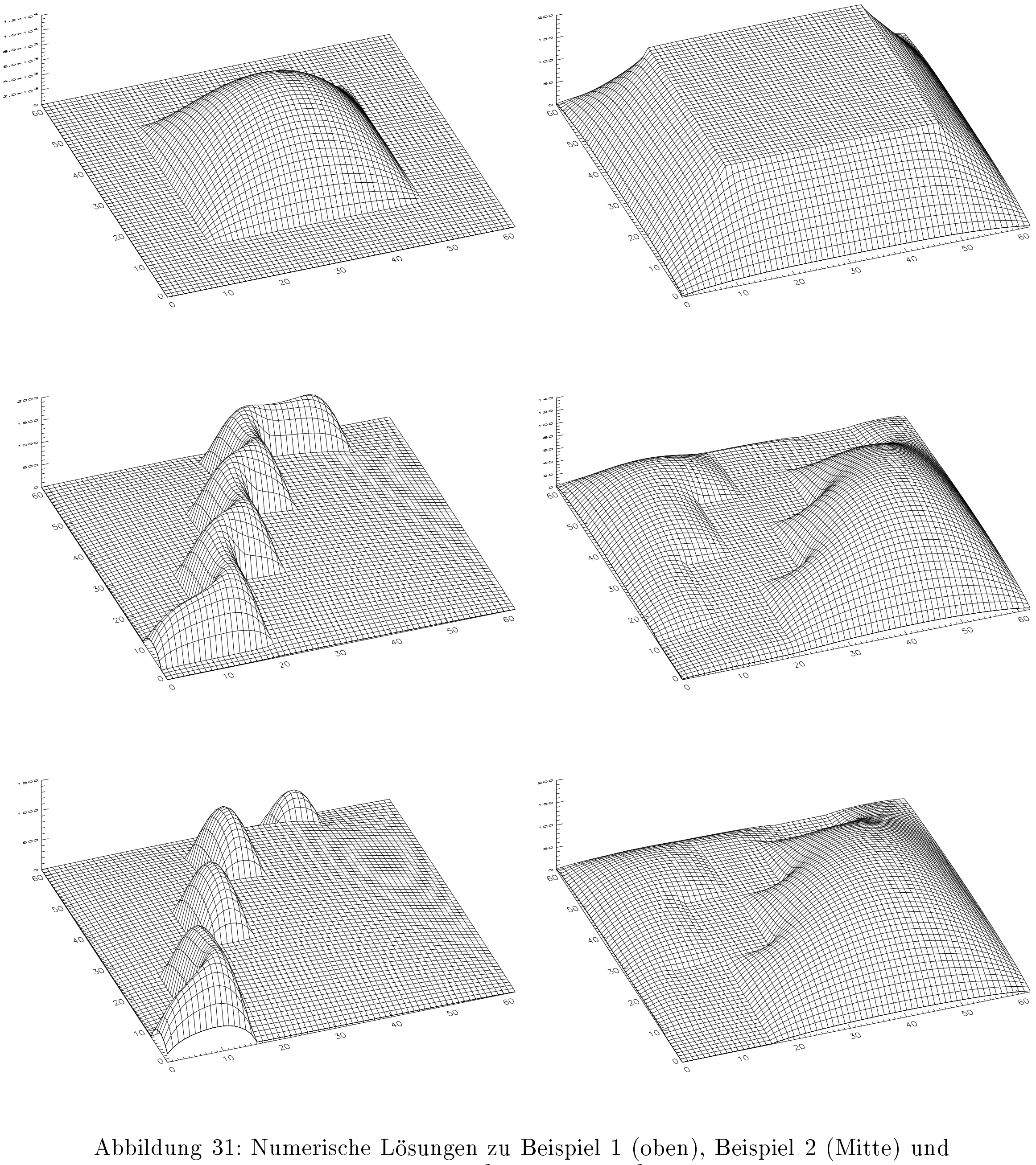

Abbildung 31: Numerische Lösungen zu Beispiel 1 (oben), Beispiel 2 (Mitte) und Beispiel 3 mit $c = 0$ (unten); $\alpha = 10^{-2}$ links, $\alpha = 10^{2}$ rechts; $f \equiv 1$

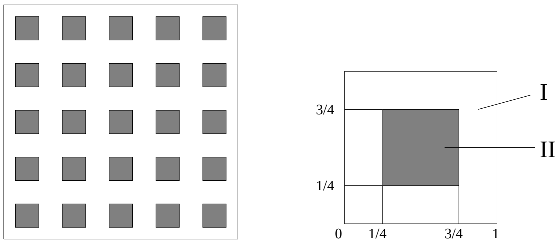

Abbildung 32: Gebietseinteilung bei Problem 1, links Ω, rechts die Standardzelle Y

5.3.1 Beispiele zur MG-Homogenisierung periodischer Medien

Problem 1: Ein einfaches Modell poröser Medien Das erste Beispiel das wir betrachten wollen, tritt wie wir bereits gesehen haben z.B. bei der Beschreibung poröser Medien auf (vergleiche Abschnitt 2). Auch bei der Beschreibung eines elastischen zylindrischen Stange mit verstärkenden Fasern treten ähnliche Probleme auf. Die prinzipielle Struktur des Diffusionskoeffizienten ist Abbildung 32 zu entnehmen. Sei

$$\epsilon_n := \frac{1}{2^n}. \tag{219}$$

Dann werde $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ in 2^{2n} gleiche Quadrate von der Seitenlänge ϵ_n eingeteilt. Der Diffusionskoeffizient werde durch die Standardhomotopie durch die Werte in der Standardzelle erklärt. Der Diffusionskoeffizient D^{ϵ_n} habe auf der Standardzelle Y folgende Gestalt:

$$D^{\epsilon}(y) = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{in } Y_{II} \\ \alpha\delta_{ij} & \text{in } Y_I \end{cases}$$

wobei die Bereiche Y_I bzw. Y_{II} aus der Abbildung 32 zu ersehen sind. Bezogen auf poröse Medien handelt sich dabei also um die Bereiche der Matrix bzw. der Kanäle.

Bei der Homogenisierung des Problems wird ϵ_n dem Grenzwertprozeß $\epsilon \searrow 0$ unterworfen, was bedeutet, daß die Zahl der Kanäle zunimmt, jedoch das Verhältnis des von den Kanälen beanspruchten Volumens zu dem von der Matrix eingenommenen konstant bleibt – in diesem Fall 3/1.

Schon in der Einleitung hatten wir ein ähnliches Beispiel herangezogen, um daran die Notwendigkeit geeigneter Mittelungsprozeduren zur Bestimmung von Grobskalengleichungen abzulesen. Denn um eine einigermaßen sinnvolle numerische Approximation der Lösung des Problems

$$-\nabla(D^{\epsilon_n}\nabla u_\epsilon) = f \tag{220}$$

zu erhalten, muß in Abhängigkeit von ϵ genügend fein diskretisiert werden, und damit ist schon aus Speicherplatzgründen der Folge der kleiner werdenden ϵ_n schnell eine Grenze gesetzt. So ist z.B. zur Diskretisierung des Problem mit einem 8×8 Muster des Diffusionskoeffizienten ($n = 4$) mindestens ein Gitter mit 31×31 inneren Punkten notwendig, um die Struktur der Materialfunktion aufzulösen.

Beispiel 1 hat mehrere spezielle Eigenschaften. Eine davon ist, daß der (exakte) homogenisierte Operator von der Form

$$L^{hom} = \gamma\Delta \tag{221}$$

ist, wobei $\gamma = \gamma(\alpha)$ eine Konstante ist, die wir im folgenden als „homogenisierten Koeffizienten“ d^{hom} beizeichnen wollen. Aus der Theorie der Homogenisierung

[BEN87] und Abschnitt 2.3.3 folgt

$$\max_{x\in\Omega} |u_\epsilon(x) - u(x)| \to 0 \text{ für } \epsilon \to 0$$

mit u der Lösung des homogenisierten Problems $L^{hom}u = f$. Arithmetisches, geometrisches und harmonisches Mittelung ergeben ja per Definition Vielfache des Laplaceoperators als Abschätzungen für den effektiven Operator und aufgrund der symmetrischen Struktur des Problems ergibt sich auch durch die Renormalisierung ein in x- und y-Richtung gleicher Diffusionskoeffizient, also ebenfalls ein Operator der Form $\alpha\Delta$. Selbiges gilt natürlich auch für die durch den matrixabhängigen Galerkinvergröberungsprozeß gebildeten Näherungen. Die durch die Galerkinapproximation mit den nach dem Verfahren von Dendy gebildeten matrixabhängigen Prolongationen, durch die Renormalisierung, durch arithmetisches, geometrisches und harmonisches Mittel bestimmten Koeffizienten bezeichnen wir im folgenden mit $d^{MG-hom}, d^{ren}, d^{arith}, d^{geo}$ und d^{harm}, respektive.

Unterwirft man also die, durch die wie in 3.1.2 beschriebene Diskretisierung mittels finiter Elemente entstehende Steifigkeitsmatrix dem Galerkinvergröberungsprozeß, so streben die entstehenden Grobgittersterne gegen ein Vielfaches der finite Element-Diskretisierung des Laplaceoperators

$$\frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -8 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \tag{222}$$

Zur Verdeutlichung betrachten wir folgendes Beispiel: Diskretisiert man das Problem mit 8×8 Muster des Diffusionskoeffizienten ($n = 4, \alpha = 10$) auf einem Gitter mit 31×31 inneren Punkten, und unterwirft man die entstehende Steifigkeitsmatrix dem matrixabhängigen Galerkinvergröberungsprozeß, mit nach dem Verfahren von Dendy bestimmten Prolongationen und Restriktionen (P_{matr}), bzw. dem Vergröberungsprozeß mit Standardprolongation und Restriktion (P_{bil}), dann entwickelt sich der zum Punkt $(0.5, 0.5)$ gehörige Stern wie folgt:

h	$P_{matr}^t L P_{matr}$	$P_{bil}^t L P_{bil}$
1/32	$\begin{bmatrix} -10/3 & -10/3 & -10/3 \\ -10/3 & 80/3 & -10/3 \\ -10/3 & -10/3 & -10/3 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -10/3 & -10/3 & -10/3 \\ -10/3 & 80/3 & -10/3 \\ -10/3 & -10/3 & -10/3 \end{bmatrix}$
1/16	$\begin{bmatrix} -0.51808 & -5.66471 & -0.51808 \\ -5.66471 & 24.73118 & -5.66471 \\ -0.51808 & -5.66471 & -0.51808 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -7.75/3 & -11.125/3 & -7.75/3 \\ -11.125/3 & 75.5/3 & -11.125/3 \\ -7.75/3 & -11.125/3 & -7.75/3 \end{bmatrix}$
1/8	$\begin{bmatrix} -1.80474 & -3.09139 & -1.80474 \\ -3.09139 & 19.58455 & -3.09139 \\ -1.80474 & -3.09139 & -1.80474 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -6.9085/3 & -9.4375/3 & -6.9085/3 \\ -9.4375/3 & 65.375/3 & -9.4375/3 \\ -6.9085/3 & -9.4375/3 & -6.9085/3 \end{bmatrix}$
1/4	$\begin{bmatrix} -2.12640 & -2.44806 & -2.12640 \\ -2.44806 & 18.29789 & -2.44806 \\ -2.12640 & -2.44806 & -2.12640 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -7.5390/3 & -8.1719/3 & -7.5390/3 \\ -8.1719/3 & 62.8437/3 & -8.1719/3 \\ -7.5390/3 & -8.1719/3 & -7.5390/3 \end{bmatrix}$

Beide Sterne streben offensichtlich gegen Vielfache des Diskretisierungssterns des Laplaceoperators. Wie wir schon mehrfach bemerkt haben, konvergiert die symmetrische Galerkinapproximation mit der bilinearen Interpolation als Prolongation gegen die Diskretisierung von $d^{arith}\Delta$.

Um den Grenzwert des Galerkinvergröberungsprozeßes zu erhalten, helfen uns folgende allgemeine [GRI90] entnommene Betrachtungen: Diskretisierungen durch 9-Punkte-Sterne lassen sich als Vektoren des R^9 auffassen, z.B. durch die Abbildung

$$\begin{bmatrix} l_7 & l_8 & l_9 \\ l_4 & l_5 & l_6 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{bmatrix} \longrightarrow (z_i) \in \mathrm{R}^9.$$

Als Basis des R^9 könnten wir etwa die Einheitsvektoren oder die durch die Diskretisierung mittels bilinearer finiter Elemente entstehenden Vektoren verwenden. Stattdessen betrachten wir die sich mittels der Produktbildung aus der Basis

$$\{s_1 = [\begin{array}{ccc} 1 & -2 & 1 \end{array}], s_2 = [\begin{array}{ccc} -1 & 0 & 1 \end{array}], s_3 = [\begin{array}{ccc} 0 & 1 & 0 \end{array}]\}$$

des 3-Punkte-Sterns ergebenden 9-Punkte-Sterne

$$h_k \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} \approx s_{22} = s_2 s_2 = [\begin{array}{ccc} 1 & -2 & 1 \end{array}] \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$2h_k^3 \frac{\partial^3}{\partial x \partial y^2} \approx s_{12} = s_1 s_2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad 2h_k^3 \frac{\partial^3}{\partial x^2 \partial y} \approx s_{21} = s_2 s_1 = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \end{bmatrix}$$

$$h_k^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \approx s_{20} = s_2 s_0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad h_k^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \approx s_{02} = s_0 s_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$2h_k \frac{\partial}{\partial x} \approx s_{10} = s_1 s_0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad 2h_k \frac{\partial}{\partial y} \approx s_{01} = s_0 s_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$4h_k^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \approx s_{11} = s_1 s_1 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad id \approx s_{00} = s_0 s_0 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

als Basis.

Betrachten wir die parametrisierte Prolongation

$$P_{k-1}^{k}{}^* = \begin{bmatrix} p_1 p_4 & p_4 & p_2 p_4 \\ p_1 & 1 & p_2 \\ p_1 p_3 & p_3 & p_2 p_3 \end{bmatrix} \tag{223}$$

mit $p_1 + p_2 = 1$ und $p_3 + p_4 = 1$, bei der die Diagonalgewichte als das Produkt der beiden zugehörigen Gewichte für die x- und y-Richtung berechnet werden, und betrachten wir den allgemeinen Stern

$$L_k{}^* = c_{20} s_{20} + c_{02} s_{02} + c_{10} s_{10} + c_{01} s_{01} + c_{22} s_{22} + c_{21} s_{21} + c_{12} s_{12} + s_{11} c_{11}, \tag{224}$$

so erhält man z.B. für unser, mithilfe bilinearer finiter Elemente diskretisiertes Modellproblem, dessen Operator durch den mittels der Himmelsrichtungen indizierten Stern

$$L_k{}^* = \begin{bmatrix} l_{NW} & l_N & l_{NO} \\ l_W & l_M & l_O \\ l_{SW} & l_S & l_{SO} \end{bmatrix} \tag{225}$$

gegeben sei, die Koeffizienten

$$\begin{array}{ll} c_{22} = \frac{3}{4}(l_{NO} + l_{NW} + l_{SO} + l_{SW}) & c_{11} = \frac{1}{4}(l_{NO} + l_{SW} - l_{SO} - l_{NW}) \\ c_{12} = \frac{1}{4}(l_{NO} + l_{SO} - l_{NW} - l_{SW}) & c_{21} = \frac{1}{4}(l_{NO} + l_{NW} - l_{SO} - l_{SW}) \\ c_{20} = \frac{3}{4}(l_{NO} + l_{NW} + l_{SO} + l_{SW}) & c_{02} = \frac{3}{4}(l_{NO} + l_{NW} + l_{SO} + l_{SW}) \\ c_{10} = \frac{3}{4}(l_{NO} + l_{SO} - l_{SO} - l_{NW}) & c_{01} = \frac{3}{4}(l_{NO} + l_{NW} - l_{SO} - l_{SW}) \end{array} \tag{226}$$

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß 223 schon eine sehr spezielle Wahl für eine Prolongation darstellt und keineswegs alle durch matrixabhängige Verfahren entstehenden Prolongationen erfaßt. Obige Prolongation ergibt sich, wenn nacheinander ein Vergröberungsschritt in x-Richtung mit dem Stern

$$\begin{bmatrix} p_1 & 1 & p_2 \end{bmatrix}$$

und ein Vergröberungsschritt in y-Richtung mittels

$$\begin{bmatrix} p_4 \\ 1 \\ p_3 \end{bmatrix}$$

oder umgekehrt durchgeführt wird. Für nähere Informationen siehe [GRI90].

Dann läßt sich die symmetrische Galerkinvergröberung $(P_{k-1}^k)^t L_k P_{k-1}^k$ angewandt auf einen Stern der Form

$$L_k{}^* = c_{20}s_{20} + c_{02}s_{02} + c_{10}s_{10} + c_{01}s_{01} + c_{22}s_{22} + c_{21}s_{21} + c_{12}s_{12}$$

durch die Abbildung

$$\begin{pmatrix} c_{20} \\ c_{02} \\ c_{10} \\ c_{01} \\ c_{22} \\ c_{12} \\ c_{21} \end{pmatrix} \to A \begin{pmatrix} c_{20} \\ c_{02} \\ c_{10} \\ c_{01} \\ c_{22} \\ c_{12} \\ c_{21} \end{pmatrix}, \tag{227}$$

mit der Matrix A (siehe [GRI90])

$$\begin{pmatrix} 2(p_1^2+p_2^2) & & & & & & \\ & 2(p_3^2+p_4^2) & & & & & \\ & & 2 & & & & \\ & & & 2 & & & \\ p_3p_4(p_1^2+p_2^2) & p_1p_2(p_3^2+p_4^2) & & & (p_1^2+p_2^2)(p_3^2+p_4^2) & & \\ & & p_3p_4 & & & p_3^2+p_4^2 & \\ & & & p_1p_2 & & & p_1^2+p_2^2 \end{pmatrix}$$

beschreiben.

Bei fortlaufender Galerkinvergröberung mittels Standardprolongation erhält man über diese Abbildungsvorschrift die zugehörigen Grobgitteroperatoren.

Man sieht, daß selbst wenn man mit einem 5-Punkte-Stern, d.h. mit $c_{22} = c_{12} = c_{21} = c_{11} = 0$ auf dem feinsten Gitter diskretisiert, auf den gröberen Gittern 9-Punkte-Sterne entstehen.

Allerdings gilt obige Abbildungsvorschrift offensichtlich im allgemeinen nur für Punkte, die nicht direkt benachbart zu einem Randpunkt sind, d.h. die nicht auf Punkte auf dem Rand zugreifen, da sich sonst die jeweils gewählten Randbedingungen auswirken. D.h. sie gilt nur für $\Omega = \mathrm{R}^2$ bzw. für nicht am Rand liegende Punkte.

Aufgrund der symmetrischen Struktur des hier vorliegenden Problems ist klar, daß sich auf den groben Gittern Operatoren bilden, die nur aus Linearkombinationen von s_{20}, s_{02}, s_{22} bestehen. Ab einem bestimmten Level ist die Struktur des Diffusionskoeffizienten nicht mehr erkennbar, und in allen Punkten des Grobgitters ergeben sich die gleichen Sterne. Man erhält also einen Stern der Form

$$\begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_1 \\ l_3 & l_4 & l_3 \\ l_1 & l_2 & l_1 \end{bmatrix}.$$

Damit reduziert sich die matrixabhängige Prolongation auf die Standardprolongation mit bilinearer Interpolation und obige Abbildungsvorschrift reduziert sich auf

$$\begin{pmatrix} c_{20} \\ c_{02} \\ c_{22} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ 1/8 & 1/8 & 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{20} \\ c_{02} \\ c_{22} \end{pmatrix}.$$

Aufgrund der Symmetrie des Gebietes im Punkte $(0.5, 0.5)$ ist $c_{20} = c_{02}$, und es ergibt sich für c_{22} die Folge

$$c_{22}^{k+1} = \frac{1}{4} c_{20}^{k} + c_{22}^{k} = \sum_{l=1}^{k+1} (\frac{1}{4})^{l} c_{20} + (\frac{1}{4})^{k+1} c_{22}.$$

Wegen

$$j = \sum_{l=1}^{\infty} (\frac{1}{4})^{l} = \frac{1}{4}(1 + j) = \frac{1}{3}$$

konvergiert die Folge gegen

$$\frac{1}{3} c_{20}.$$

Als Grenzwertstern ergibt sich also

$$c_{20}(s_{20} + s_{02} + \frac{1}{3} s_{22}) = \frac{c_{20}}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -8 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \tag{228}$$

c_{20} wiederum berechnet sich, wie man aus der Definition von s_{20}, s_{02}, s_{22} leicht ersieht, durch

$$c_{20} = l_3 + 2 l_1. \tag{229}$$

Z.B. ergibt sich aus dem durch die matrixabhängige Galerkinapproximation in jedem Punkt des Grobgitters enstehenden Stern

$$\begin{bmatrix} -2.1264051808406 & -2.4480694037146 & -2.1264051808406 \\ -2.4480694037146 & 18.2978983382205 & -2.4480694037146 \\ -2.1264051808406 & -2.4480694037146 & -2.1264051808406 \end{bmatrix}$$

c_{20} zu -6.70088, und damit der Grenzwertstern

$$\frac{-6.70088}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -8 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Dieser diskrete Operator entspricht dem kontinuierlichen (MG-homogenisierten) Operator

$$-6.70088 \Delta$$

und wir erhalten den MG-homogenisierten Diffusionskoeffizienten

$$d^{MG-hom} = 6.70088.$$

Die Ergebnisse der so durchgeführten Berechnungen sind für zwei Werte von α in Tabelle 5 zusammengefaßt. Die Werte für d^{hom} sind [AMA91] entnommen.

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß die so gewonnenen Werte für die MG-homogenisierte Diffusion nicht von der Gitterweite des verwendeten feinsten Gitters abhängen, wenn nur dafür gesorgt ist, daß die Sprunglinien des Diffusionskoeffizienten mit Gitterlinien des feinsten verwendeten Gitters zusammenfallen. Dies ist auf die spezielle Wahl Geometris des Problems (Ω wird in 2^{2n} Quadrate eingeteilt und wir verwenden Gitter mit $(2^s - 1)$ inneren Punkten) und auf die Beobachtung zurückzuführen, daß wenn auch auf einem gröberen Gitter (bezeichnet mit l) der Diffusionskoeffizient noch vollständig aufgelöst werden kann, die durch die Galerkinapproximation entstehende Grobgitterdiskretisierung auf dem Level l der direkten Diskretisierungen mit Hut-Basisfunktionen auf diesem Level entspricht. Dies ist klar, wenn man bedenkt, daß die matrixabhängige Prolongation sich auf die Standardprolongation reduziert, solange die Sprunglinien des Diffusionskoeffizient auch auf dem nächstengröberen Gitter noch mit Gitterlinien zusammenfallen. Und die Galerkinapproximation mit Standardprolongation und Restriktion erzeugt in diesem Fall als Grobgitteroperatoren ja genau die Steifigkeitsmatrizen, die auch durch direkte Diskretisierung mit den Hut-Basisfunktionen auf dem jeweiligen Level entstehen würden. Diskretisiert man jedoch statt mit finiten Elementen mit der Methode der finiten Volumen, wie in Abschnitt 4.4 kurz beschrieben, dann gilt dies nicht mehr. Man erhält dann ja auf dem feinsten Gitter keine 9-Punkte-Sterne für den Feingitteroperator, sondern 5-Punkte-Sterne, die auf den gröberen Gittern durch die Galerkinapproximation i.a. in 9-Punkte-Sterne umgewandelt werden. Dann stimmen die durch die Galerkinvergröberung erhaltenen Grobgitterdiskretisierungen (9-Punkte-Sterne) nicht mehr mit einer direkten Diskretisierung auf einem gröberen Gitter (5-Punkte-Sterne) überein. Vielmehr ergibt sich dann eine Abhängigkeit des Ergebnisses des Grenzwertprozesses der MG-Homogenisierung von der Feinheit der Diskretisierung auf der Einheitszelle einer Periode des Diffusionskoeffizienten. Deswegen werden wir weiterhin die MG-Homogenisierung nur auf Diskretisierungen, die durch die Methode der finiten Elemente, wie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben, entstanden sind, untersuchen.

Für allgemeinere Probleme mit einem Diffusionskoeffizient, der nicht innerhalb der Maschen des feinsten Gitters konstant ist, sind die durch die Galerkinapproximation bestimmten Näherungen der effektiven Operatoren natürlich von der Auflösung des Diffusionskoeffizienten durch das feinste verwendete Gitter abhängig. Theoretisch müßte i.a. ja so fein diskretisiert werden, daß der Diffusionskoeffizient vollständig aufgelöst wird, was i.a. natürlich nicht möglich ist Für reale Probleme z.B. aus der „reservoir"-Simulation, in denen die Daten des Diffusionskoeffizienten nur an diskreten Punkten vorliegen, stellt sich jedoch dieses Problem gar nicht.

Aus Tabelle 6 kann man den Fehler der jeweiligen Näherungsverfahren relativ zur durch die Homogenisierung vorgeschlagenen Näherung ablesen.

Tabelle 5: Zu Problem 1: Vergleich der Näherungen für die effektive Diffusion

α	d^{hom}	d^{MG-hom}	d^{ren}	d^{arith}	d^{geo}	d^{harm}
10	6.52	6.70088	6.16712	7.75	5.6234	3.0769
100	59.2	61.73646	54.24763	75.25	31.6228	3.8835

Tabelle 6: Zu Problem 1: Fehler der Näherungen für die effektive Diffusion relativ zur Näherung durch die Homogenisierung

α	d^{MG-hom}	d^{ren}	d^{arith}	d^{geo}	d^{harm}
10	2.8	5.4	18.9	13.8	52.8
100	4.2	8.4	27.1	46.7	93.3

Den Tabellen ist zu entnehmen, daß der durch die matrixabhängige Galerkinapproximation bestimmte Diffusionswert bei weitem die beste Abschätzung liefert. Auch der Wert der Renormalisierung ist noch relativ nahe am Wert der homogenisierten Diffusion, wohingegen die anderen Abschätzungen unbrauchbare Ergebnisse liefern. Dabei ist das harmonische Mittel noch die beste dieser einfachen Mittelungen. Dies ist allerdings allein auf die konkrete hier vorgenommene Wahl der Werte des Diffusionskoeffizienten zurückzuführen und keineswegs allgemein so, wie wir im nächsten Beispiel sehen werden.

Einen graphischen Vergleich der Ergebnisse der verschiedenen Verfahren erhalten wir, indem wir die entstehenden Probleme

$$d^{hom}\Delta u = f, \quad d^{MG-hom}\Delta u = f, \quad d^{ren}\Delta u = f, \quad d^{arith}\Delta u = f$$

mit einer beliebigen rechten Seite $f \not\equiv 0$ und beliebigen Randbedingungen auf einem Gebiet Ω numerisch lösen und miteinander vergleichen. Für $\epsilon_n \searrow 0$ konvergiert die zugehörige Lösung des exakten Problems 220 gegen die Lösung des homogenisierten Problems. Wir vergleichen deswegen die Ergebnisse der verschiedenen Verfahren auch mit denen der numerischen Lösung des exakten Problems mit verschiedenen Mustern, d.h. verschiedenen ϵ_n's. Als konkretes Beispiel wählten wir $\Omega = (0,1) \times (0,1)$, $f \equiv 1$, $\alpha = 100$ und homogene Dirichlet Randbedingungen, und diskretisierten jeweils auf einem Gitter mit Maschenweite $h = 1/128$. Die Höhenlinen der jeweiligen Lösung sind in den Abbildungen 33 und 34 zu sehen.

Man sieht, wie die Muster der Höhenlinien der Lösungen zu den Problemen mit exaktem Diffusionskoeffizienten mit kleiner werdendem ϵ_n dem der Höhenlinien des homogenisierten Problems immer ähnlicher werde. Die Lösungen des Problems mit renormalisiertem bzw. MG-homogenisiertem Diffusionskoeffizienten scheinen nahe bei der Lösung des homogenisierten Problems und damit an der exakten Lösung des Problems mit z.B. 16×16 Muster zu liegen, wohingegen die Näherung durch das arithmetische Mittel offensichtlich unbrauchbar ist. Deutlicher wird dies, wenn wir Schnitte durch die jeweiligen Lösungen miteinander vergleichen. In Abbildung 35 sind solche Schnitte durch die Lösungen zum exakten Problem mit 16×16 Muster, zum Problem mit renormalisiertem, MG-homogenisiertem Diffusionskoeffizienten, und zum Problem mit arithmetischer Mittelung des Diffusionskoeffizienten zu sehen. Die Lösung des homogenisierten Problems fällt fast exakt mit der Lösung des exakten Problems mit 16×16 Muster des Diffusionskoeffizienten zusammen, die zum MG-homogenisierten Problem weist einen relativ kleinen Fehler relativ zur Lösung des homogenisierten Problems auf, wohingegen die Lösungen zum Problem mit renormalisiertem Diffusionskoeffizienten bzw. die zum Problem mit arithmetischer Mittelung sichtbar schlechte Approximationen darstellen. Von diesen beiden stellt – wie zu erwarten war – die Lösung zum renormalisierten Problem noch die weit bessere Approximation dar.

Der Fehler des MG-homogenisierten Diffusionskoeffizienten gegenüber dem homogenisierten Koeffizienten erklärt sich – wie zu Beginn des Abschnitts bereits angedeutet – dadurch, daß ja in der matrixabhängigen Galerkinapproximation nicht die exakte Energieprolongation verwendet wird, sondern nur Näherungen, die die

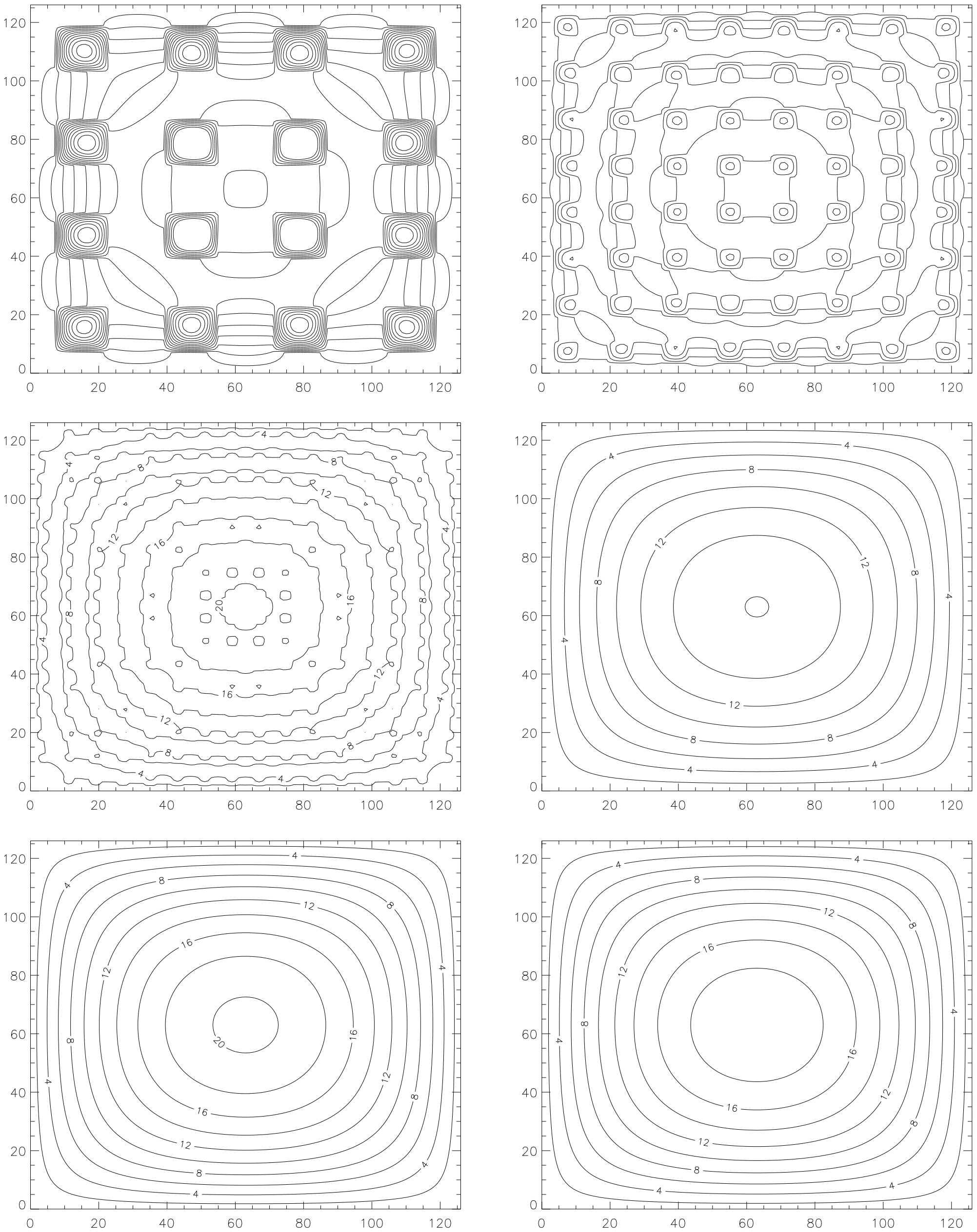

Abbildung 33: Zu Problem 1: Höhenlinien der numerischen Lösungen zum Problem mit exaktem Diffusionskoeffizienten mit 4×4 (oben links), 8×8 (oben rechts) und 16×16 Muster (Mitte links), der numerischen Lösung des mit dem arithmetischen Mittel des Diffusionskoeffizienten gebildeten Problems (Mitte rechts) des homogenisierten (links) und des MG-homogenisierten Problems, $\alpha = 100$

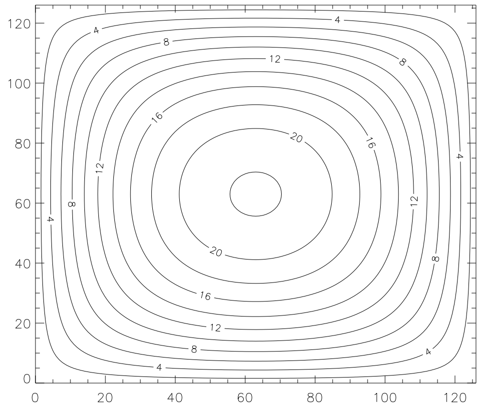

Abbildung 34: Zu Problem 1: Höhenlinien der Lösung des renormalisierten Problems, $\alpha = 100$

Lokalität der Grobgitteroperatoren bewahren. Die hier zur Bestimmung des MG-homogenisierten Diffusionskoeffizienten verwendete Näherung für die Energieprolongation verwendet in den Punkten aus Ω^{10} und Ω^{01} des jeweiligen Gitters nicht die exakten in der Steifigkeitsmatrix des jeweiligen Levels gespeicherten Gleichungen, sondern leicht veränderte (defektbehaftete) Gleichungen. Es gilt also nicht $(\begin{array}{cc} I & 0 \end{array}) L_k P^k_{k-1} = 0$, wie dies mit der Energieprolongation der Fall wäre. Der durch diese Näherungen induzierte Fehler ist in Abbildung 35 als Abweichung der Lösung des MG-homogenisierten Problems gegenüber der Lösung des homogenisierten Problems zu sehen.

Problem 2: Eine Variation von Problem 1 Dieses Problem ist vom gleichen Typ wie das gerade betrachtete, weist jedoch eine etwas andere Gebietseinteilung auf . Die genaue Struktur ist Abbildung 36 zu entnehmen. Der Diffusionskoeffizient ist diesmal

$$D^\epsilon(y) = \begin{cases} \alpha\delta_{ij} & \text{in } Y_{II} \\ \delta_{ij} & \text{in } Y_I \end{cases}$$

Die Ergebnisse sind in Tabelle 7 und 8 festgehalten. Die Werte für d^{hom} sind [KES79] entnommen. In den Daten der Renormalisierung tritt ein sytematischer Fehler auf, weil eine Diskretisierung des Differentialoperators des Diffusionsproblems, bei der die Sprunglinien der Materialfunktion auf Gitterlinien liegen, nur mit einer nicht ganzen Zahl von Perioden des Diffusionskoeffizienten im betrachteten Gebiet Ω möglich ist, weil wir ja, um den MG-Vergröberungs-Prozeß und die Renormalisierung bis auf das gröbste Level ausführen zu können, mit $(2^s - 1)^2$ inneren Punkten diskretisieren. Das heißt das Verhältnis s von Material mit dem Diffusionswert α zu dem mit Diffusionswert 1 ist nicht genau 8/1. Deswegen sind in den Tabellen 7 und 8 bei der Renormalisierung jeweils zwei Werte angegeben und in Klammern das zugehörige tatsächliche Verhältnis s. Die Werte zum Wert $s = 8$ sind, wie man den in der Tabelle angegebenen Werten entnehmen kann, noch kleiner als die zu $s = 8.288$ und $s = 8.070$ angegebenen.

Auch hier ist deutlich zu sehen, daß die MG-Homogenisierung relativ zu den Ergebnissen der Homogenisierung die besten Werte liefert. Die Renormalisierung liefert ebenfalls Ergebnisse deren Fehler kleiner als 5% sind, wohingegen die einfachen Mittelungsverfahren, wie arithmetisches Mittel und harmonisches Mittel sich wieder als ungeeignet erweisen.

Tabelle 7: Zu Problem 2: Vergleich der Näherungen für die effektive Diffusion

α	d^{hom}	d^{MG-hom}	d^{ren} $s=8.288$	d^{ren} $s=8.070$	d^{arith}	d^{geo}	d^{harm}
10	1.22490	1.2330266	1.17763	1.18235	2	1.63	1.11
1	1	1	1	1	1	1	1
1/10	0.83276	0.840957	0.81291	0.80897	0.9	0.97551	0.5
1/18	0.81777	0.827687	0.79327	0.78898	0.89506	0.91384	0.34615
1/30	0.80978	0.820127	0.78257	0.77809	0.89259	0.86341	0.23684
1/40	0.80670	0.818012	0.77839	0.77384	0.89166	0.83625	0.1875
1/50	0.80482	0.816383	0.77583	0.77124	0.89111	0.81577	0.15517
1/114	0.80055	0.812675	0.76996	0.76526	0.88986	0.74439	0.07377

Tabelle 8: Zu Problem 2: Fehler der Näherungen der effektiven Diffusion relativ zum Ergebnis der Homogenisierung

α	d^{MG-hom}	d^{ren} $s=8.288$	d^{ren} $s=8.070$	d^{arith}	d^{geo}	d^{harm}
10	0.66	3.86	3.47	63.28	33.06	9.34
1	0	0	0	0	0	0
1/10	0.98	2.38	2.86	8.07	17.14	39.76
1/18	1.22	3.00	3.52	9.45	11.75	57.67
1/30	1.28	2.99	3.91	10.65	6.62	70.75
1/40	1.40	3.60	4.17	10.53	3.66	76.76
1/50	1.44	3.60	4.17	10.72	1.36	80.72
1/114	1.51	3.82	4.41	11.16	7.02	90.79

Problem 3: Layered medium Betrachten wir als nächstes einen Diffusionskoeffizienten wie wir ihn schon in Abschnitt 2.3.3 als Beispiel zur Homogenisierung in ähnlicher Form behandelt haben. Die genaue Gebietseinteilung kann man Abbildung 37 entnehmen. D ist also von x_2 unabhängig. Die Sterndarstellung des Operators L_k in einem beliebigen Punkt hat damit die Form

$$L_k{}^* = \begin{bmatrix} L_{-1} & (L_{-1}+L_1)/2 & L_1 \\ L_{-1} & -4(L_{-1}+L_1) & L_1 \\ L_{-1} & (L_{-1}+L_1)/2 & L_1 \end{bmatrix}. \tag{230}$$

Betrachtet man nun z.B. die nach [DEN83] gebildeten matrixabhängigen Prolongationen, die in den Punkten aus $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$ aus eindimensionalen Anteilen des 9-Punkte Sternes von L_k gebildet werden, so ergibt sich das Prolongationsmolekül

$$P_{k-1}^{k}{}^* = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}p_1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}p_2 \\ p_1 & 1 & p_2 \\ \frac{1}{2}p_1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}p_2 \end{bmatrix}. \tag{231}$$

Denn das Problem zerfällt in zwei eindimensionale Teilprobleme, und der eindimensionale Anteile des Operators L_k in x_2-Richtung hat die Form

$$L_k^{y*} = \begin{bmatrix} 3(L_{-1}+L_1)/2 \\ -3(L_{-1}+L_1) \\ 3(L_{-1}+L_1)/2 \end{bmatrix} = 3(L_{-1}+L_1)/2 \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

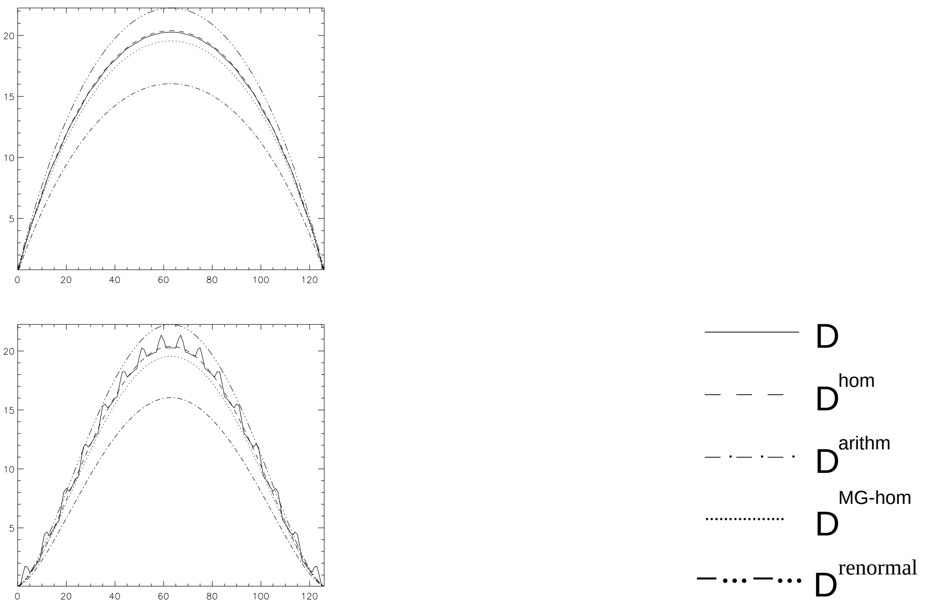

Abbildung 35: Zu Problem 1: Querschnitte durch die numerischen Lösungen zu den Problemen mit exaktem Diffusionskoeffizienten mit 16×16 Muster, zum Problem mit homogenisiertem, MG-homogenisiertem, renormalisiertem Diffusionskoeffizienten und des Problems mit arithmetischer Mittelung des Diffusionskoeffizienten durch den Mittelpunkt des Gebietes längs $x_1 = 0.5$ (oben) und diagonal längs $x_1 = x_2$ (unten)

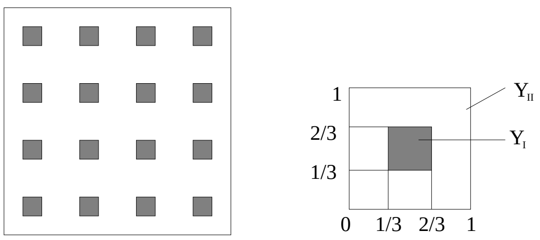

Abbildung 36: Gebietseinteilung bei Problem 2, rechts eine Periode des Diffusionskoeffizienten

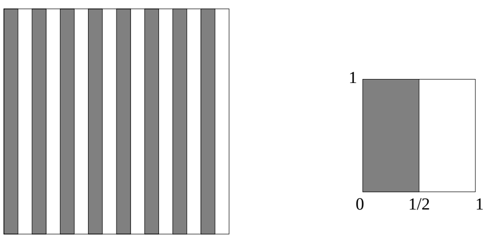

Abbildung 37: Zu Problem 3: Layered medium mit Längsschichtung, rechts eine Periode des Diffusionskoeffizienten

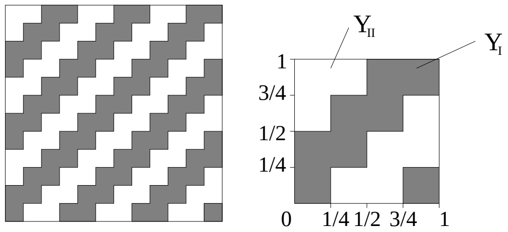

Abbildung 38: Zu Problem 4: Medium mit Querschichtung

Die gewichtete Prolongation reduziert sich in x_2-Richtung also auf die Standardinterpolation. In x_2-Richtung mittelt die Galerkinapproximation mit matrixabhängiger Prolongation und Restriktion also wie die arithmetische Mittelung. Und in x_1-Richtung ergibt sich wie im eindimensionalen Fall, das harmonische Mittel des Diffusionskoeffizienten (vergleiche Abschnitt 4.4.1).

Homogenisierung und die Approximation des effektiven Diffusionskoeffizienten durch die matrixabhängige Galerkinapproximation liefern also in diesem Fall die gleichen Ergebnisse – das arithmetische Mittel in x_2-Richtung und das harmonische Mittel in x_1-Richtung –, wie ein Vergleich mit Beispiel 2 aus Abschnitt 2.3.3 zeigt.

Problem 4: Medium mit Querschichtung Als ein weiteres Beispiel für ein periodisches Medium betrachten wir das in Abbildung 38 zu sehende Muster für den Diffusionskoeffizienten D, das ein poröses Medium bei dem verschiedene Materialien schräg aufeinandergeschichtet sind, beschreibt. Es gelte

$$D(y) = \begin{cases} 1 & \text{in } Y_I \\ \alpha & \text{in } Y_{II} \end{cases}$$

Dieses Beispiel wurde ausgewählt, um eine Schichtung des Diffusionskoeffizienten in einem 45^0 Winkel zu erzeugen. Daraus resultiert offensichtlich ein effektiver Operator, der Querableitungen enthält. Es ist klar, daß der Hauptteil der Diffusion entlang der Achse $x_1 = x_2$ stattfindet.

In den folgenden Betrachtungen ist immer $\alpha = 8$ gewählt.

Diskretisiert man das Problem mit $\alpha = 8$ auf einem Gitter der Maschenweite $h = 1/256$, und einer Periodenlänge des Diffusionskoeffizienten von $8/256$ (die Sprunglinien des Diffusionskoeffizienten fallen also mit Gitterlinien zusammen), dann ergeben sich mit der Galerkinapproximation, wobei wieder der Index *matr* die matrixabhängige Prolongation nach Dendy und der Index *bil* die bilineare Prolongation bezeichne, für den Punkt $(0.5, 0.5)$ die folgenden Sterne $(0.5, 0.5)$ ist in der Berechnung nicht genau Symmetriemittelpunkt):

h	$P^t_{matr}LP_{matr}$	$P^t_{bil}LP_{bil}$
1/256	$\begin{bmatrix} -8/3 & -1.5 & -1/3 \\ -8/3 & 12 & -1/3 \\ -8/3 & -1.5 & -1/3 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -8/3 & -1.5 & -1/3 \\ -8/3 & 12 & -1/3 \\ -8/3 & -1.5 & -1/3 \end{bmatrix}$
1/128	$\begin{bmatrix} -2.11319 & -1.75666 & -1.06939 \\ -4.09831 & 11.25571 & -0.15305 \\ -1.06939 & -0.49905 & -0.49664 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -8/3 & -6.25/3 & -1.5 \\ -8.875/3 & 12 & -0.125/3 \\ -1.5 & -2.75/3 & -1/3 \end{bmatrix}$
1/64	$\begin{bmatrix} -0.70267 & -1.84585 & -1.45863 \\ -2.98388 & 9.94062 & -0.31935 \\ -1.45863 & -0.4689 & -0.70267 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1.5 & -2.375 & -1.5 \\ -2.8125 & 12 & -1.875 \\ -1.5 & -0.625 & -1.5 \end{bmatrix}$
1/16	$\begin{bmatrix} -0.62524 & -0.89526 & -1.75028 \\ -1.18869 & 8.918964 & -1.18869 \\ -1.75028 & -0.895260 & -0.62524 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1.5 & -1.5 & -1.5 \\ -1.5 & 12 & -1.5 \\ -1.5 & -1.5 & -1.5 \end{bmatrix}$
1/4	$\begin{bmatrix} -0.62401 & -0.897712 & -1.74906 \\ -1.19114 & 8.923867 & -1.19114 \\ -1.74906 & -0.897712 & -0.62401 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1.5 & -1.5 & -1.5 \\ -1.5 & 12 & -1.5 \\ -1.5 & -1.5 & -1.5 \end{bmatrix}$

Deutlich ist zu sehen, wie unter Verwendung der matrixabhängigen Prolongation Querableitungen entstehen und somit die entstehenden Grobgitterdiffusionswerte ihre Diagonalität verlieren. Die Galerkinapproximation mit den Standardverfahrenskomponenten hingegen erzeugt, wie man sieht, durch wiederholte Vergröberung die finite Elementdiskretisierung von $-d^{arith}\Delta = -4.5\Delta$. Der durch die matrixabhängige Galerkinapproximation entstehende Stern

$$\begin{bmatrix} -0.62401 & -0.897712 & -1.74906 \\ -1.19114 & 8.923867 & -1.19114 \\ -1.74906 & -0.897712 & -0.62401 \end{bmatrix}$$

verändert sich auch bei einem weiteren Vergröberungsschritt nicht mehr, d.h. es handelt sich auf 6 Stellen genau um den Fixpunkt der Vergröberung mit matrixabhängiger Prolongation und damit um die Sterndarstellung des MG-homogenisierten Operators. Der Prolongationsoperator ist dann konstant

$$\begin{bmatrix} 0.1870 & 0.5 & 0.3130 \\ 0.5 & 1 & 0.5 \\ 0.3130 & 0.5 & 0.1870 \end{bmatrix}.$$

Dies stellt im übrigen ein Beispiel für einen Prolongationoperator dar, der nicht durch die in Abschnitt 5.3.1 eingeführte parametrisierte Prolongation dargestellt werden kann.

Stellt man den Stern des MG-homogenisierten Operators in der in Abschnitt 5.3.1 eingeführten Basis des 9-Punkte-Sterns dar, so erhält man mit den dortigen Bezeichnungen die Sterndarstellung

$$-0.4987(s_{22} + 6s_{20}) - 0.5467(s_{22} + 6s_{02}) - 0.5626s_{11}$$

und damit wegen

$$h_k\frac{\partial^2}{\partial x^2} \approx \frac{1}{6}(s_{22} + 6s_{20}), \quad h_k\frac{\partial^2}{\partial y^2} \approx \frac{1}{6}(s_{22} + 6s_{02}) \text{ und } h_k\frac{\partial^2}{\partial xy} \approx \frac{1}{4}s_{11}$$

Tabelle 9: Zu Problem 4: Konvergenzraten des CS-Schemas mit verschiedenen Verfahrenskomponenten

Periodenlänge desDiff.koeffizienten	*Standard*	*D Renormal*	*St Renormal*	*D*
$8h$	0.478	0.394	0.401	0.220
$16h$	0.450	0.274	0.277	0.193
$32h$	0.387	0.159	0.280	0.154
$64h$	0.314	0.113	0.205	0.103

den kontinuierlichen MG-homogenisierten Operator

$$L^{MG-hom} = -2.99\frac{\partial^2}{\partial x^2} - 3.28\frac{\partial^2}{\partial y^2} - -1.13\frac{\partial^2}{\partial xy} - 1.13\frac{\partial^2}{\partial yx}. \tag{232}$$

Daraus resultiert dann der MG-homogenisierte Diffusionskoeffizient zu

$$D^{MG-hom} = \begin{pmatrix} 2.99 & 1.13 \\ 1.13 & 3.28 \end{pmatrix}.$$

Für den homogenisierten Diffusionskoeffizienten ergibt sich nach [SAN93]

$$D^{hom} = \begin{pmatrix} 3.09 & 0.93 \\ 0.93 & 3.09 \end{pmatrix}.$$

An dieser Stelle wollen wir noch einmal an den im letzten Abschnitt bereits angeklungenen Zusammenhang zwischen der Modellbildung im Sinne der Berechnung effektiver Koeffizienten, und effektiver Operatoren einerseits und dem Konvergenzverhalten von MG-Verfahren andererseits zurückkommen. Die Standard-MG-Methode verwendet ja implizit über die Galerkinapproximation zur Bestimmung der Grobgitteroperatoren die über die arithmetische Mittelung des Diffusionskoeffizienten definierten Grobgitterwerte und die im letzten Abschnitt mit *D Renormal* bzw. *S Renormal* bezeichneten Methoden verwenden die durch die Renormalisierung bestimmten Grobgitterdiffusionswerte. Jetzt sehen wir, daß die dadurch definierten Grobgitteroperatoren keine guten Näherungen der effektiven Operatoren darstellen können, schon aus dem Grund, weil sie die Enstehung von Außerdiagonalelementen in den Grobgitterdiffusionswerten, und damit die Enstehung von Querableitungen im effektiven Operator nicht modellieren können. Dies sollte sich auch im Konvergenzverhalten der jeweiligen MG-Methode niederschlagen. Erste Anhaltspunkte dazu kann man bereits aus dem im letzten Abschnitt betrachteten „staircase“ Problem ersehen. Wir lösten das Diffusionsproblem $-\nabla D \nabla u = f$ mit quergeschichtetem Diffusionskoeffizienten mit verschiedenen Periodenlängen der Materialfunktion auf einem Gebiet $\Omega = (0,1) \times (0,1)$, mit $\alpha = 8$ auf einem Gitter der Maschenweite $h = 1/128$, wieder mit homogenen Dirichlet Randbedingungen und der rechten Seite $f \equiv 1$, wie bei den Experimenten im letzten Abschnitt. Auch sonst gelten die Bezeichnungen vom letzten Abschnitt. Es ergaben sich die in Tabelle 9 zusammengefaßten Ergebnisse. Die Konvergenzraten der matrixabhängigen Verfahren erweisen sich als bei weitem am günstigsten. Man bedenke dabei, daß bei einer Periodenlänge des Diffusionskoeffizienten von $8h$ spätestens nach drei Vergröberungsschritten die Struktur des Diffusionskoeffizienten nicht mehr erkennbar ist, und dann auf diesen groben Gittern der Grobgitteroperator bei der Galerkinapproximation mit den Standardtransportoperatoren bzw. bei den Methoden *Renormal* ein Vielfaches des Laplaceoperators ist. Bei der matrixabhängigen Galerkinapproximation hingegen ist zwar auch die genaue Struktur des Diffusionskoeffizineten nicht mehr erkennbar, aber die Hauptrichtung der Diffusion wird durch die Grobgitteroperatoren gut wiedergegeben. Daraus erklären sich die resultierenden unterschiedlich guten Konvergenzraten.

Einen direkten optischen Vergleich der Ergebnisse der verschiedenen Verfahren zur Bestimmung effektiver Operatoren erhalten wir wieder, indem wir die Lösungen der entstehenden Probleme wie bei Beispiel 1 miteinander vergleichen. Wir erhalten ja durch die Homogenisierung, die MG-Homogenisierung, die Renormalisierung und z.B. die arithmetische Mittelung Näherungen des effektiven Operators. Bezeichnen wir diese mit $L^{hom}, L^{MG-hom}, L^{arith}$ und L^{ren}, dann lösen wir also die Probleme

$$L^{hom}u = f, \quad L^{MG-hom}u = f, \quad L^{ren}u = f, \quad L^{arith}u = f$$

mit

$$L^{hom} = -\nabla D^{hom}\nabla, \quad L^{MG-hom} = -\nabla D^{MG-hom}\nabla, \quad L^{ren} = -2.44\Delta \text{ und}$$

$$L^{arith} = -4.5\Delta,$$

wobei $f \not\equiv 0$ die rechte Seite bezeichne. Konkret wählten wir $\alpha = 8$, $f \equiv 1$ und ein Gitter der Maschenweite $h = 1/128$. Als Vergleichsmöglichkeit berechneten wir außerdem die numerische Lösung zum exakten Problem mit einer Peridenlänge des Diffusionskoeffizienten von $8h$. Abbildung 39 zeigt die Höhenlinien der numerischen Lösungen. Man sieht, daß Homogenisierung und MG-Homogenisierung die besten Ergebnisse liefern, wohingegen Renormalisierung und arithmetische Mittelung die benötigten Querableitungen im effektiven Operator nicht nachbilden können.

Deutlicher wird dies wieder durch Schnitte durch die Lösungen, die in Abbildung 40 zu sehen sind. Die Lösung des homogenisierten Problems ist dort nicht mit aufgenommen, da sie mit der Lösung des exakten Problems fast zusammen fällt.

5.3.2 MG-Homogenisierung von Zufallsverteilungen

In diesem Abschnitt wollen wir die MG-Homogenisierung auf Probleme mit nichtperiodischem Diffusionskoeffizienten anwenden.

Als erstes verwenden wir eine Rechteckverteilung auf einem Intervall $[a, b]$ $(a, b > 0)$. Wir werden wieder die durch die MG-Homogenisierung berechneten Näherungswerte für die effektive Diffusion mit den durch andere Näherungsmethoden gewonnenen Werten vergleichen. Der Diffusionskoeffizient soll wieder innerhalb einer Masche des feinsten verwendeten Gitters konstant sein, sonst aber für alle Maschen einen Zufallswert annehmen. In Tabelle 10 sind die Ergebnisse von Renormalisierung, und zum Vergleich arithmetischem, geometrischem und harmonischem Mittel zu sehen. Zur Bestimmung des Wertes der MG-Homogenisierung wurde folgendermaßen vorgegangen: Der Diffusionskoeffizient sei auf einem Gitter mit 257×257 Punkten gegeben. Durch Diskretisierung des entstehenden DIffusionsproblems auf diesem Gitter und anschließender Bestimmung der Grobgitteroperatoren durch die Galerkinapproximation erhalten wir auf dem gröbsten Gitter, das nur noch aus einem einzigen inneren Punkt besteht, einen effektiven Operator, der jedoch von den bei der Diskretisierung gewählten Randbedingungen mitbestimmt ist. Um diesen Einfluß der Randbedingungen auf das Ergebnis der MG-Homogenisierung auszuschalten, wählen wir als Näherung des effektiven Operators den zum mittleren Punkt des betracheteten Gitters gehörenden Stern auf dem zweitgröbsten Gitter, das aus noch 9 inneren Punkten besteht. Bezeichnen wir diesen wieder mit

$$\begin{bmatrix} l_7 & l_8 & l_9 \\ l_4 & l_2 & l_6 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{bmatrix},$$

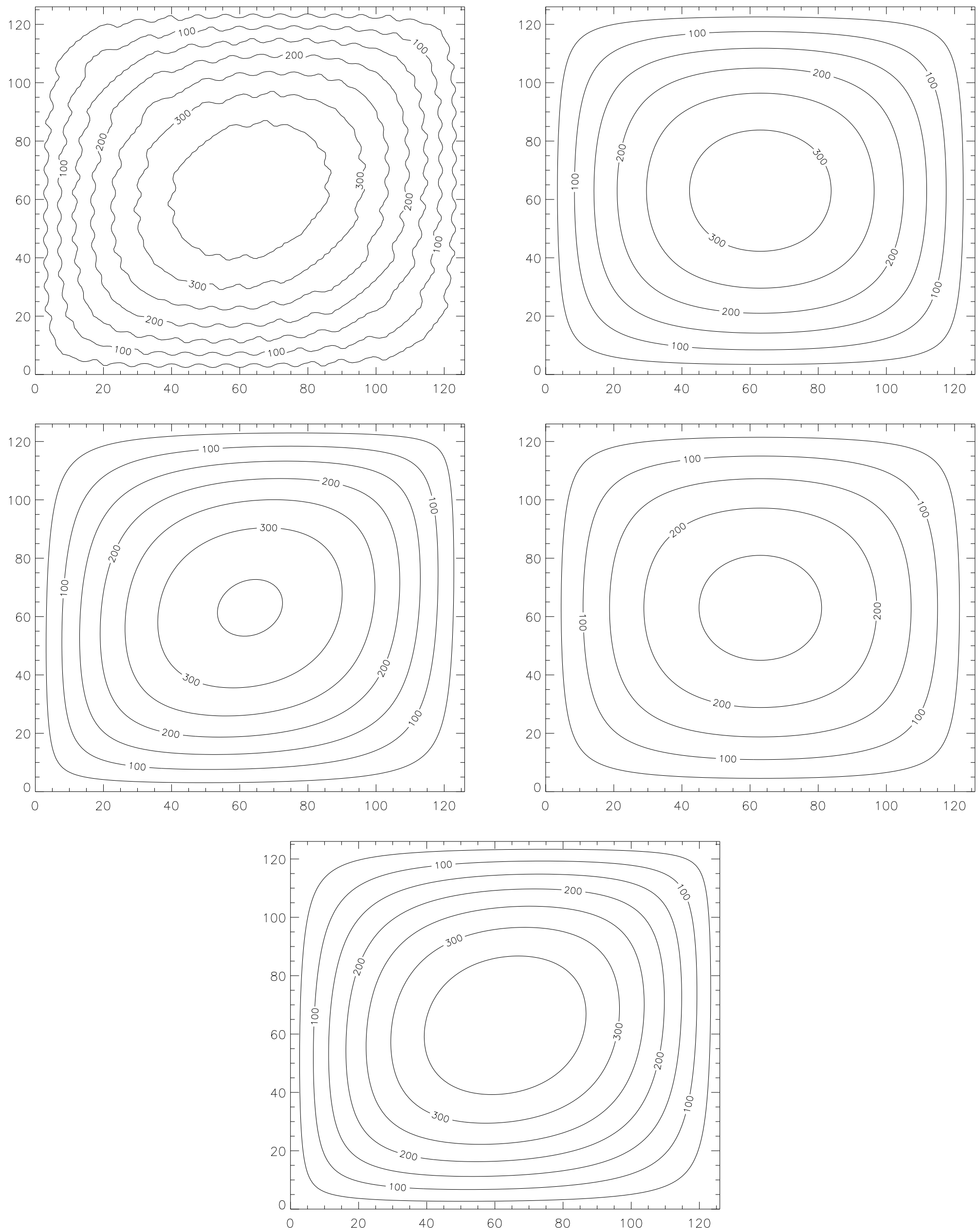

Abbildung 39: Zu Problem 4: Höhenlinien der numerischen Lösung des Problems mit exaktem Diffusionskoeffizienten mit einer Periodenlänge der Materialfunktion von $8h$ (oben links), der Lösung des renormalisierten Problems (oben rechts), des MG-homogenisierten Problems (mitte links), des Problems mit arithmetischer Mittelung (mitte rechts) und des homogensierten Problems (unten), $\alpha = 8$

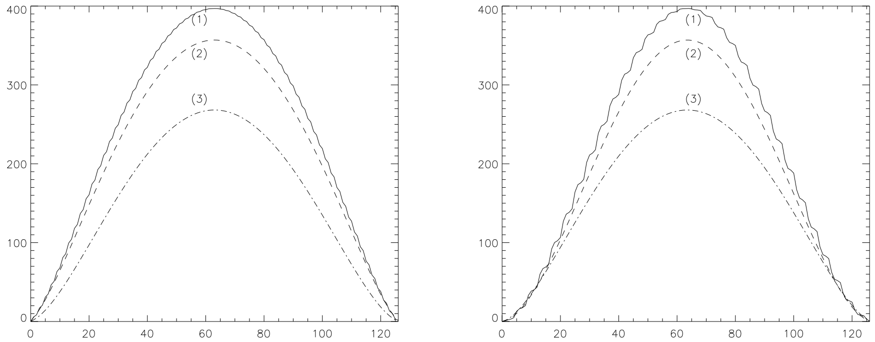

Abbildung 40: Zu Problem 4: Schnitt durch die numerischen Lösungen, längs $x_1 = 0.5$ (links), diagonal längs $x_1 = x_2$ (rechts); (1) exakte Lösung zum Problem mit Periodenlänge $4h$, (2) Lösung zum MG-homogenisierten Problem, (3) Lösung zum Problem mit arithmetischer Mittelung des Diffusionskoeffizienten

Tabelle 10: Resultate für Randomdiffusionskoeffizienten mit Rechtecksverteilung

$[a, b]$	$[1, 9]$	$[1, 99]$
arithm. Mittel	5.0	50.0
geom. Mittel	4.357	38.168
harm. Mittel	3.641	21.327
Renormalisierung	4.28	37.9
MG-Homogenisierung	4.61	44.09

dann definieren wir die MG-homogenisierte Diffusion ähnlich wie in Abschnitt 5.3.1 als

$$d^{MG-hom} = (2l_1 + 2l_3 + 2l_7 + 2l_9 + l_2 + l_4 + l_6 + l_8)/12/3.$$

In Abbildung 41 sind wieder Schnitte durch die Lösungen der entstehenden (gemittelten, renormalisierten, MG-homogenisierten) Probleme (mit den gleichen Daten, wie in den letzten Abschnitten) zu sehen. Man sieht, daß der MG-homogenisierte Operator bei weitem die beste Approximation der Lösung zum Problem mit exaktem zufallsverteiltem Diffusionskoeffizienten liefert. Genauer gesagt fällt die Lösung des MG-homogenisierten Problems fast mit der Lösung des exakten Problems zusammen.

In den Abbildungen 42 und 43 sind Schnitte durch die Lösungen von Problemen mit logarithmischen Zufallsverteilungen (vgl. Abschnitt 5.2) zu sehen. Wiederum liefert die MG-Homogenisierung weit bessere Resultate als die Renormalisierung.

Insgesamt sehen wir also, daß die matrixabhängige Galerkinapproximation sich nicht nur als Verfahrenskomponente in MG-Algorithmen einsetzen läßt, sondern sich auch zur Bestimmung approximativer effektiver Operatoren eignet. Die Einflüsse der auf den jeweiligen Gittern nicht mehr auflösbaren Skalen auf die beibehaltenen Skalen werden geeignet modelliert und die entstehenden Grobgitteroperatoren beschreiben das Verhalten der grobskaligen Lösung des Problems besser, als dies durch einfache Mittelungsverfahren oder auch durch die Renormalisierung geschieht. Dies zeigt sich sowohl im Konvergenzverhalten der MG-Algorithmen die mit matrixabhängigen Verfahrenskomponenten arbeiten, als auch in der Approximation der effektiven Operatoren bzw. des effektiven Diffusionskoeffizienten durch die verschiedenen Verfahren.

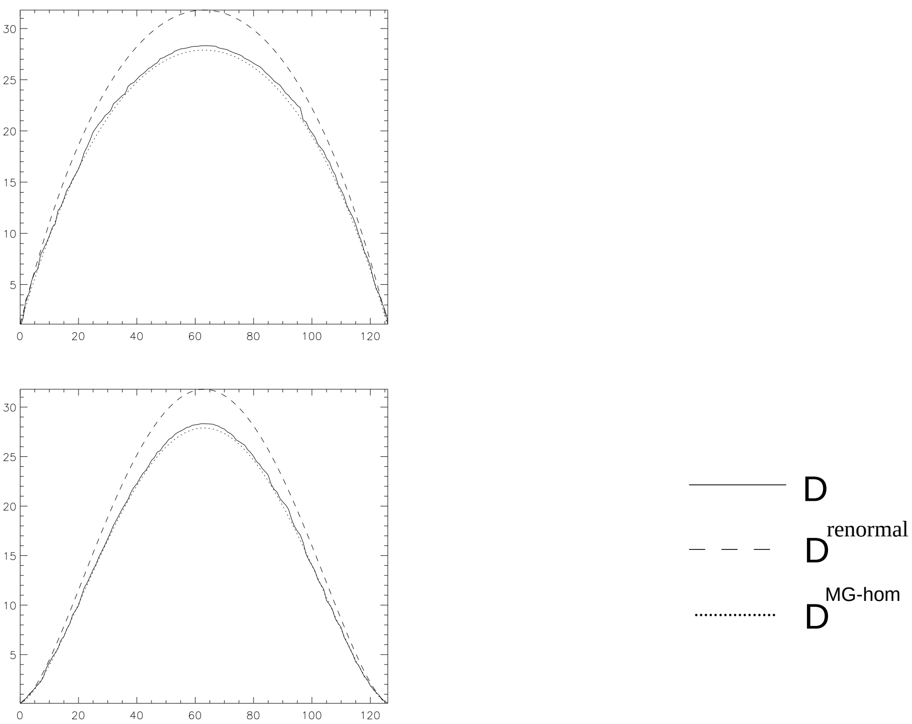

Abbildung 41: Schnitte durch die Lösungen zum Problem mit gleichverteiltem Diffusionskoeffizienten auf $[1, 9]$: längs $x_1 = 0,5$ (oben), digonal längs $x_1 = x_2$ (unten)

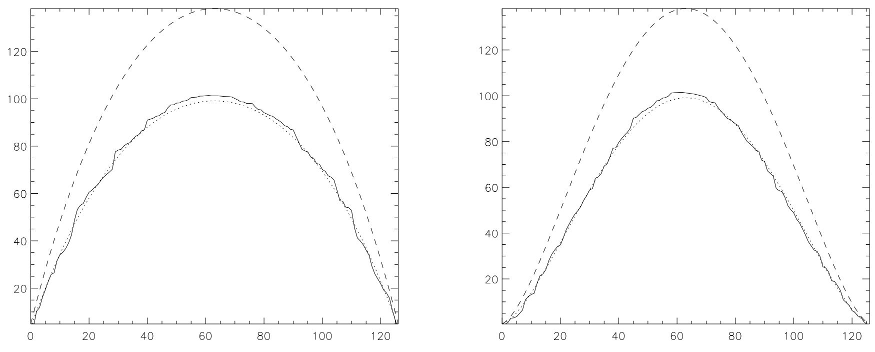

Abbildung 42: Schnitte durch die Lösungen zum Problem mit logarithmischer Verteilung des Diffusionskoeffizienten auf $[1, 99]$: längs $x_1 = 0,5$ (links), diagonal längs $x_1 = x_2$ (rechts); die Legende ist wie in Abbildung 41

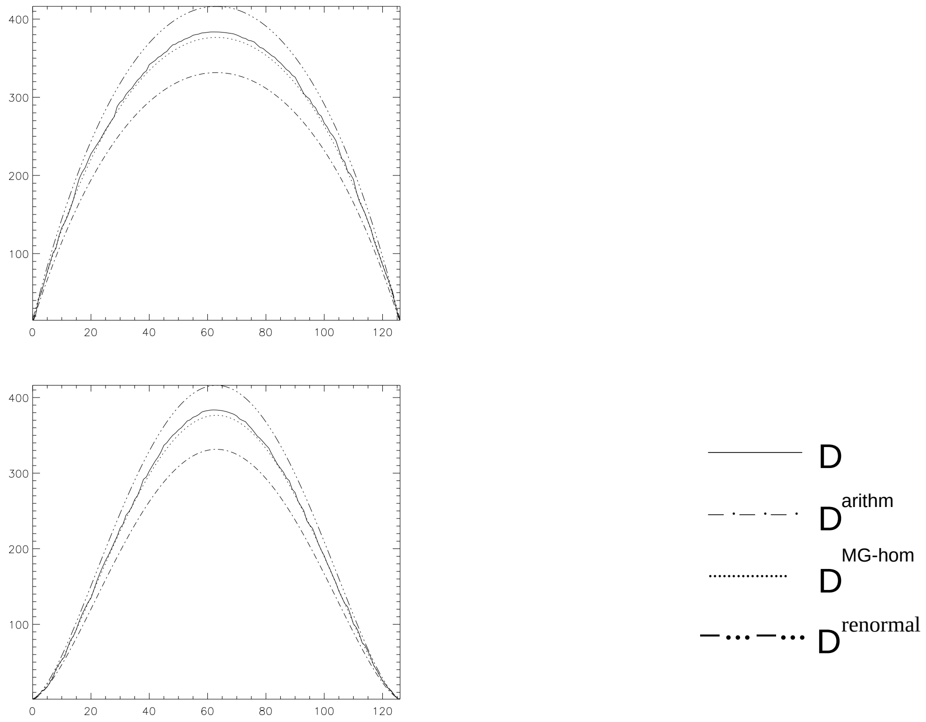

Abbildung 43: Schnitte durch die Lösungen zum Problem mit logarithmischer Verteilung des Diffusionskoeffizienten auf $[1, 9]$: längs $x_1 = 0.5$ (oben), längs $x_1 = x_2$ (unten)

6 Schlußbemerkungen

In dieser Arbeit haben wir matrix- bzw. operatorabhängige Verfahrenskomponenten für MG-Algorithmen, die fest vorgegebe Grobgitter verwenden, als Näherungen der exakten energieabhängigen Komponenten, die durch eine a-orthogonale Aufspaltung der zugrundeliegenden FE-Räume entstanden, beschrieben. Die durch den hierarchischen Zugang entstehenden Transportabbildungen und Diskretisierungen sind den üblicherweise verwendeten Operatoren, wie der bilinearen Interpolation als Prolongation und der adjungierten Abbildung als Restriktion, überlegen. Bei der Diffusiongleichung mit stark variierendem Diffusionskoeffizienten führt die Verwendung von Standard-Transportabbildungen zu Problemen, die die Konvergenz verschlechtern. Hauptursache der Beeinträchtigung der Konvergenz ist die ungenügende Approximation des Verhaltens der grobskaligen Lösungen des kontinuierlichen Problems bzw. des Feingitterproblems durch die Grobgitterdiskretisierungen. Damit zusammenhängend interpolieren die Prolongationsoperatoren Knicke im Lösungsverlauf nicht in ausreichender Weise. Diese Probleme werden durch die energieabhängigen Verfahrenskomponenten vermieden.

Ausgehend von der hierarchischen Transformation der finite Element Räume betrachteten wir außerdem mögliche Verallgemeinerungen, die sich nicht auf eine Transformation der Grobgitterräume beschränken. Eventuell lassen sich dadurch robustere Multilevelverfahren konstruieren, und Probleme, die auch mit den energieabhängigen Verfahrenskomponenten nicht befriedigend gelöst werden können, beseitigen. Als ein Beispiel wurde hier die Konvektion-Diffusions-Gleichung angeführt, bezüglich der auch nach der energiabhängigen hierarchischen Transformation in den Feingitterpunkten einfache Glätter wie Gauß-Seidel i.a. nicht ausreichen. In diese Richtung, wie auch im Hinblick auf die Anwendung dieser Ideen bezüglich des Erzeugendensystems, ist weitere Arbeit nötig.

Wir haben beschrieben, wie sich die Bestimmung von Grobgitteroperatoren auf regulären orthogonalen Gittern als Verfahren zur Bestimmung von effektiven Operatoren interpretieren läßt. Wie bei den in Abschnitt 2.3 vorgestellten Näherungsverfahren (Renormalisierung, einfache Mittelwertbildungen, Homogenisierung) ergeben verschiedene Verfahrenskomponenten (Prolongation und Restriktion) bei der Galerkinapproximation verschiedene (und damit verschieden gute) Näherungen. Die Galerkinapproximation mit der Standardprolongation und Restriktion als Analogon zur arithmetischen Mittelung des Diffusionskoeffizienten ist dabei keine gute Näherung, was sich auch im Konvergenzverhalten der MG-Algorithmen, die diese Verfahrenskomponenten benutzen, äußert (Abschnitt 5.2). Die energieabhängigen Prolongationen und Restriktionen mitteln in idealer Weise über die Galerkinapproximation die Feinskalengleichungen und liefern uns in der energieabhängigen Basis die Bestapproximation des Feingitterproblems auf dem jeweiligen Gitter. Wie wir gesehen haben, sind die exakten energieabhängigen Verfahrenskomponenten aufgrund der Nichtlokalität der entstehenden Grobgitteroperatoren im allgemeinen nicht verwendbar. Jedoch stehen uns mit den in Abschnitt 3.4 vorgestellten Näherungen für die energieabhängigen Verfahrenskomponenten Methoden zur Verfügung, die lokale Prolongationen und Grobgitteroperatoren erzeugen und näherungsweise effektive Operatoren bestimmen. Speziell für die Diffusionsgleichung, die wir in der ganzen Arbeit als Modellgleichung betrachteten, ergab sich damit ein den einfachen Mittelungen und auch der Renormalisierung überlegenes Modellierungsverfahren, das sich für periodische Diffusionskoeffizienten als diskretes Homogenisierungsverfahren interpretieren läßt. Der in der Approximation der exakten energieabhängigen Verfahrenskomponenten begangene Fehler zeigte sich dann in mehreren numerischen Berechnungen als Approximationsfehler der Lösung des MG-homgenisierten Problems gegenüber der Lösung des homogenisierten Problems. Wie sich die Näherungen der energieabhängigen Verfahrenskomponenten auf die Güte der Approximation der effektiven Operatoren auswirken und wie gut die durch verschiedene Verfahren erzielten Näherungen sind, untersuchten wir in Kapitel 5 anhand mehrerer Beispiele.

Darüberhinaus beschrieben wir, wie sich umgekehrt Modellierungsverfahren zur approximativen Bestimmung von effektiven Diffusionskoeffizienten, wie die Renormalisierung, auch bei der Diskretisierung gewinnbringend einsetzen lassen.

In mehreren numerischen Experimenten zur Diffusionsgleichung wurde das Konvergenzverhalten mit verschiedenen Verfahrenskomponenten arbeitender CS-Schemata miteinander verglichen. Ebenso wurden numerische Experimente bezüglich der Diffusionsgleichung mit periodischem und mit zufallsverteiltem Diffusionskoeffizienten durchgeführt, um die Ergebnisse verschiedener Verfahren zur Bestimmung effektiver Operatoren und effektiver Diffusionskoeffizienten mit den durch die Galerkinapproximation erzielten Ergebnissen zu vergleichen. Wie beim Konvergenzverhalten der zugehörigen MG-Verfahren erwiesen sich die Varianten mit matrixabhängigen Verfahrenskomponenten als weit überlegen und bieten damit weit bessere Abschätzungen der effektiven Operatoren und der effektiven Diffusion als dies die Renormalisierung vermag.

Im Rahmen dieser Arbeit konnte mangels Inputdaten kein Diffusionsproblem mit Diffusionswerten der Materialfunktion aus realen Messungen, z.B. aus Bodenuntersuchungen, behandelt werden. Hier und in Bezug auf kompliziertere Differentialgleichungen als die Diffusionsgleichung ist im Hinblick auf die Anwendbarkeit der Galerkinapproximation als Modellierungsverfahren zur Bestimmung grobskaliger Operatoren noch viel Arbeit zu leisten.

An dieser Stelle möchte ich mich bei Thomas Grauschopf für die Überlassung und Erklärung seines Codes zur Multilevelvorkonditionierung bedanken, auf dessen Datenstruktur sich die verschiedenen im Rahmen dieser Arbeit implementierten MG-Algorithmen stützen. Außerdem möchte ich mich recht herzlich bei Florian Meier und Thomas Gerstner für ihre Hilfe und ihre Ratschläge bedanken. Besonderer Dank gilt meinem Betreuer Dr. habil. Michael Griebel, der mir durch seine Anregungen, Ideen und Erklärungen, für die er sich immer viel Zeit nahm, entscheidend geholfen hat.

Literatur

[ALC81] Alcouffe R.E., Brandt A., Dendy J.E., Painter J.W.: *The multi-grid method for the diffusion equation with strongly discontinuous coefficients*, SIAM J. Sci. Stat. Comput. Vol. 2, 1981, S. 430-454.

[AMA91] Amaziane B., Bourgeat A., Koebbe A.J.: *Numerical simulation and homogenization of two-phase flow in heterogeneous porous media*, Transport in porous media 6, S.519-547, 1991.

[ARB89] Arbogast T.: *Analysis of the simulation of single phase flow through a naturally fractured reservoir*, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 26, No. 1, S.12-29, 1989.

[ARB90] Arbogast T., Douglas J., Hornung U.: *Derivation of the double porosity model of single phase flow via homogenization theory*, SIAM J. Math Anal., Vol. 21, No. 4, S.823-836, 1990.

[AXE89] Axelsson O., Vassilevski P.S.: *Algebraic multilevel preconditioning methods. I*, Numer. Math. 56, S.157-177, 1989.

[AXE90] Axelsson O., Vassilevski P.S.: *Algebraic Multilevel Preconditioning Methods, II*, Siam J. Numer. Anal., Vol. 27, No. 6, S. 1569-1590, Dec. 1990.

[AXE91] Axelsson O., Vassilevski P.S.: *Construction of variable preconditioners for inner-outer iteration methods*, Report 9107, Department of Math., Katholische Universität Nijmegen, Niederlande, 1991.

[BAB76] Babuska I.: *Homogenization ans its Application. Mathematical and Computational Problems*, Num. Sol. of Part. Diff. Eqn.-III, B. Hubbard, ed., Academic Press, N.Y., S. 89-116, 1976.

[BAN87] Bank R., Dupont T., Yserentant H.: *The hierarchical basis multigrid method*, Numer. Math. No. 52, S. 427-458, 1988.

[BEH83] Behie A., Forsyth P.A. Jr.: *Multi-Grid Solution of Three-Dimensional Problems with Discontinuous Coeffizients*, Appl. Math. and Comp. 13, S. 229-240, 1983.

[BEN87] Bensoussan A., Lions J.L., Papanicolaou G.: *Asymtotic Analysis for Periodic Structure*, North-Holland, Amsterdam, 1987.

[BPX90] Bramble J.H., Pasciak J.E., Xu J.: *Parallel multilevel preconditioners*, Math. Comput. 55, S. 1-22, 1190.

[BRA77] Brandt A.: *Multi-Level adaptive solutions to boundary-value problems*, Math. Comput., Vol. 31, No. 138, S. 333-390, 1977.

[BRA82] Brandt A., McCormick S.F., Ruge J.: *Algebraic multigrid (AMG) for automatic algorithm design and problem solution. A preliminary report.* Report, Inst. Comp. Studies, Colorado State University, Ft. Collins, CO, 1982.

[BRA84] Brandt A.: *Multigrid techniques: 1984 guide with applications to fluid dynamics*, GMD-Studien Nr.85, Bonn, 1984.

[DEN82] Dendy J.E.: *Black box multigrid for nonsymmetric problems*, Appl. Math. Comput., Vol. 13, S. 261-283, 1983.

[DEN83] Dendy J.E.: *Black box multigrid*, J. Comp. Phys., Vol. 48, S. 366-386, 1982.

[EDW93] Edwards M.G., Rogers C.F.: *Multigrid and renormalization for reservoir simulation*, Multigrid methods, Vol. IV, Springer Lectures in Math., Springer-Verlag, 1993.

[ENG93] Engquist B., Luo E.: *Multigrid methods for differential equations with highly oscillatory coefficients*, Copper Mountain Conference 1993.

[FUC93] Fuchs L.: *Turbulence Modelling as a Multi-Level Approach*, Multigrid Methods, Vol. IV, Springer Lectures in Math., Springer-Verlag, 1993.

[FUH93] Fuhrmann J., Gärtner K.: *On matrix data structures and the stability of multigrid algorithms*, Multigrid Methods, Vol. IV, Springer Lectures in Math., Springer-Verlag, 1993.

[FUH94] Fuhrmann, J.: *Zur Verwendung von Mehrgitterverfahren bei der numerischen Behandlung elliptischer Differentialgleichungen mit variablen Koeffizienten*, Aachen: Shaker, 1995 (Berichte aus der Mathematik)
Zugl.: Chemnitz-Zwickau, Techn. Univ., Diss., 1994.

[GER92] Germano M.: *Turbulence: The filtering approach*, J. Fluid Mech., Vol. 238, S. 325-336, 1992.

[GRI90] Griebel M.: *Zur Lösung von Finite-Differenzen und Finite-Element Gleichungen mittels der Hierarchischen-Transformations-Mehrgitter-Methode*, Dissertation an der TU-München, Institut für Informatik, zugleich: SFB-Bericht Nr.342/4/90 A, Technische Universität München, 1990.

[GRI91] Griebel M.: *Multilevel algorithms considered as iterative methods on indefinite systems*, SFB-Bericht Nr. 324/20/91 A, Technische Universität München, 1991.

[GRI95] Griebel M., Oswald P.: *On the abstract theory of additive and multiplicative Schwarz algorithms*, Numer. Math. 70, S. 163-180, 1995.

[GRO92] Großmann Ch., Roos H.-G.: *Numerik partieller Differentialgleichungen*, Teubner, Stuttgart, 1992.

[HAC82] Hackbusch W., Trottenberg U., (eds.): *Multigrid methods*, Proceedings, Köln-Porz, 1981, Lecture Notes in Mathematics 960, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1982.

[HAC85] Hackbusch W.: *Multigrid methods and applications*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1985.

[HOR90] Hornung U.: *Diffusion Models for fractured media*, J. of math. Anal. and Appl. 147, S.69-80, 1990.

[KES79] Kesavan S.: *Homogenization of Elliptic Eigenvalue Problems: Part 2*, Appl. Math. Optim. 5, S. 153-167, 1979.

[KIN89] King P.R.: *The use of renormalization for calculating effective permeability*, Transport in porous media 4, S.37-58, 1989.

[KIR73] Kirkpatrick S.: Rev. Mod. Phys. 45, 574.

[LAN60] Landau L.D., Lifschitz E.M.: *Electridynamics of continuous media*, Pergamon Press, Oxford, 1960.

[NGU89] Nguetseng G.: *A general convergence result for a functional related to the theory of homogenization*, SIAM J. Math. Anal., Vol. 20, S.608-623, 1989.

[PAL80] Sanchez-Palencia E.: *Non-homogenious media and vibration theory*, Lecture Notes in Physics 127, Springer-Verlag, 1980.

[PES92] Peszynska M.: *Flow through fissured media: Mathematical analysis and numerical approach*, Dissertation, Universität Augsburg, 1992.

[PLO93] van der Ploeg A., Botta E.F.F., Wubs F.W.: *Grid-independent Convergence Based on Preconditioning Techniques*, Multigrid Methods, Vol. IV, Springer Lectures in Math., Springer-Verlag, 1993.

[REU93a] Reusken A.: *Multigrid with matrix-dependent transfer operators for convection-diffusion problems*, Multigrid Methods, Vol. IV, Springer Lectures in Math., Springer-Verlag, 1993.

[REU93b] Reusken A.: *Multigrid with matrix-dependent transfer operators for a singular perturbation problem*, Computing 50, S.199-211, 1993.

[REU94] Reusken A.: *Fourier analysis of a robust multigrid method for convection-diffusion equations*, GAMM Seminar Meisdorf, Oktober 1994, to appear in Computing.

[ROG84] Rogallo R.S., Moin P.: *Numerical simulation of turbulent flows*, Ann. Rev. Mech. 16: S. 99-137, 1984.

[RUG86] Ruge J., Stüben K.: *Algebraic Multigrid (AMG)*, Arbeitspapiere der GMD 210, Juni 1986.

[SAN93] Santosa F., Vogelius M.: *First-Order Correctors to the Homogenized Eigenvalues of a Periodic Composite Medium*, Siam J. Appl. Math., Vol. 53, No. 6, S. 1636-1668, Dec. 1993.

[SHO91] Showalter R.E., Walkington N.J.: *Diffusion of fluid in a fissured medium with microstructure*, SIAM J. Math. Anal., Vol. 22, No. 6, S.1702-1722, 1991.

[SHW91] Showalter R.E., Walkington N.J.: *Micro-structure models of diffusion in fissured media*, J. of Math. Anal. and Appl. 155, S.1-20, 1991.

[STU82] Stüben K., Trottenberg U.: *Multigrid methods: fundamental algorithms, model problem analysis and applications*, in [HAC82], S.1-176.

[STU83] Stüben K.: *Algebraic Multigrid (AMG): Eperiences and Comparisons*, Appl. Math. Comput. 13, S. 419-452, 1983.

[TAR] Tartar L.: *Incompressible fluid flow in a porous medium – Convergence of the homogenization process*, Appendix zu [PAL80].

[WAG93] Wagner Ch.: *Ein robustes Mehrgitterverfahren für Diffusions-Transport-Probleme in der Bodenphysik*, Preprint 93-70, Universität Heidelberg, Dez. 1993.

[WAR60] Warren J.E., Price H.S.: SPEJ, 153, September 1963.

[XU92] Xu J.: *Iterative methods by space decomposition and subspace correction*, SIAM Review 34, S. 581-613, 1992.

[YSE83] Yserentant H.: *On the multilevel splitting of finite element spaces*, Numer. Math. Vol. 49, S.379-412, 1986.

[YSE93] Yserentant H.: *Old and new convergence proofs for multigrid methods*, Acta Numerica 1993, Cambridge Univ. Press, New York, S. 285-326.

[ZEE90] De Zeeuw P.M.: *Matrix-dependent prolongations and restrictions in a blackbox multigrid solver*, J. of Comp. and Appl. Math. 33, S.1-27, 1990.