

Fakultät für Mathematik und Informatik
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Diplomarbeit

**Numerische Lösung von
Eigenwertproblemen unsymmetrischer
partieller Differentialoperatoren**

Antje Westenberger

Betreut durch:
Prof. Dr. Rolf Rannacher

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Das Eigenwertproblem	5
2.1	Motivation	5
2.2	Problemstellung	6
2.2.1	Die variationelle Formulierung	6
2.2.2	Die Finite-Elemente-Diskretisierung	8
2.3	Das Spektrum kompakter Operatoren	8
2.4	Normalität und Entartung	11
2.4.1	Ein Beispiel für Entartung	13
3	Lösung von Eigenwertproblemen mit dem Arnoldi-Algorithmus	17
3.1	Motivation und Herleitung des Arnoldi-Algorithmus	18
3.1.1	Komplexe Arithmetik	20
3.2	Orthogonalitätsverlust beim Arnoldi-Algorithmus	21
3.2.1	Der Householder-Arnoldi	21
3.2.2	Numerischer Vergleich von Arnoldi-modifiziertem Gram-Schmidt und Householder-Arnoldi	23
3.3	Berechnung der Eigenwerte	26
3.4	Berechnung der Eigenvektoren	29
3.4.1	Der komplexe Fall	30
3.4.2	Ein alternativer Test auf Entartung	31
3.5	Anwendung auf partielle Differentialgleichungen	31
3.6	A priori Fehlerabschätzung	32
3.7	A posteriori Fehlerabschätzung	33
3.7.1	Herleitung des a posteriori Fehlerschätzers	33
3.7.2	Ein Abbruchkriterium	35
4	Numerische Tests	39
4.1	Die Konvektions-Diffusions-Gleichung	39
4.1.1	Praktische Anwendung des a posteriori Fehlerschätzers	44
4.1.2	Lokale Gitterverfeinerung	49
4.1.3	Test des Abbruchkriteriums	54
4.2	Ein gekoppeltes System	60

4.3	Die Burgers-Gleichung	62
4.3.1	Freier Ein- und Ausströmrand	63
4.3.2	Freier Ausströmrand	71
4.3.3	A posteriori Fehlerschätzung bei Entartung im Kontinuierlichen . .	78
4.3.4	A posteriori Fehlerschätzung bei Entartung im Diskreten	82
4.3.5	Einfluss der Viskosität	83
5	Zusammenfassung und Ausblick	87
A	QR-Zerlegung mit Spaltenpivoting	89
	Abbildungsverzeichnis	91
	Tabellenverzeichnis	93
	Literaturverzeichnis	95

1 Einleitung

Eigenwertprobleme haben ihren Ursprung in vielen verschiedenen Anwendungsbereichen. Sie lassen sich grob in zwei Klassen einteilen:

Am häufigsten treten Eigenwertprobleme *symmetrischer* Operatoren auf. Diese ergeben sich oft bei der Analyse von *Schwingungen*, beispielsweise bei den Eigenschwingungen einer Membran oder in der Quantenmechanik. Spektralanalysen sind zum Beispiel bei der Konstruktion von Brücken und Gebäuden von entscheidender Bedeutung. Symmetrische Eigenwertprobleme sind in vielerlei Hinsicht “gutartig”.

Zum anderen resultieren einige Anwendungen in Eigenwertproblemen *unsymmetrischer* Operatoren. Ein Beispiel hierfür sind Eigenwertprobleme in der *hydrodynamischen Stabilitätsanalyse*. Hier treten einige Schwierigkeiten auf, die bei symmetrischen Eigenwertproblemen nicht vorkommen; beispielsweise sind rechts- und linksseitige Eigenfunktionen im Allgemeinen verschieden und es können komplexe Eigenwerte auftreten, was einige Modifikationen der üblicherweise reellen Algorithmen erfordert. Außerdem kann es zu *Entartung* des Eigenwertproblems kommen, das heißt, die Eigenvektoren spannen den betrachteten Raum nicht auf, es müssen *Hauptvektoren* hinzugenommen werden.

Diese Arbeit behandelt die numerische Lösung insbesondere von unsymmetrischen Eigenwertproblemen, da die Anwendung in der hydrodynamischen Stabilität als Motivation zugrunde gelegt wird. Die numerische Lösung von Eigenwertproblemen beginnt typischerweise bei der *Diskretisierung* des Ausgangsproblems mit einem Finite-Elemente-Verfahren. Für die Lösung des endlichdimensionalen diskreten Eigenwertproblems wird in der vorliegenden Arbeit der *Arnoldi-Algorithmus* unter Einbeziehung von Mehrgitterverfahren verwendet.

Um die Güte der berechneten Eigenwerte abzuschätzen, werden *a posteriori Fehlerschätzer* mit Hilfe dual gewichteter Residuen verwendet. Diese liefern eine Strategie zur lokalen Gitterverfeinerung sowie ein Abbruchkriterium für den Algorithmus.

Der Aufbau der Arbeit ist wie folgt: In Kapitel 2 wird die Diskretisierung des Eigenwertproblems beschrieben, die benötigten Definitionen und Notationen geklärt sowie einige Eigenschaften entarteter Probleme beschrieben.

Kapitel 3 beschreibt zunächst die numerische Vorgehensweise: Verschiedene Varianten des Arnoldi-Algorithmus werden hergeleitet und einander gegenübergestellt. Die Berechnung der Eigenvektoren mit einem speziellen QR-Verfahren wird beschrieben. Außerdem werden a priori und insbesondere a posteriori Fehlerschätzer angegeben und hieraus ein Abbruchkriterium des Arnoldi-Algorithmus hergeleitet.

In Kapitel 4 werden schließlich die beschriebenen Methoden und Verfahren praktisch überprüft. Hierbei werden zunächst zwei verschiedene Varianten des Arnoldi-Algorithmus verglichen. Dann werden drei Beispiele für Eigenwertprobleme partieller Differentialoperatoren numerisch gelöst, wobei die unsymmetrischen Probleme zunächst skalar, dann gekoppelt und schließlich entartete Systeme sind. Die Fehlerabschätzung und die daraus resultierende lokale Gitterverfeinerung sowie das Abbruchkriterium werden praktisch überprüft.

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Prof. Dr. Rannacher für zahlreiche wertvolle Anregungen und spannende Diskussionen. Insbesondere möchte ich mich ganz herzlich bei Herrn Dipl.-Math. Winnifried Wollner für die andauernde Unterstützung, intensive Betreuung und Hilfestellung bedanken. Schließlich danke ich den Mitarbeitern der AG Numerik für ihre Hilfsbereitschaft und für das angenehme Arbeitsklima.

Bezeichnungen

$ \cdot $	Die euklidische Norm einer komplexen Zahl.
$\ \cdot\ $	Die L^2 -Norm.
(\cdot, \cdot)	Das L^2 -Skalarprodukt.
$\mathbf{A}_h, \mathbf{M}_h$	Matrizen, z.B. hier Steifigkeits- und Massematrix.
$\text{ran}(T)$	Der Wertebereich eines Operators T .
$\text{ker}(T)$	Der Kern eines Operators T .
$\text{Eig}_a(\lambda) = \cup_{\nu \in \mathbb{N}} \text{ker}\{\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}\}^\nu$	Der algebraische Eigenraum zum Eigenwert λ von \mathbf{A} .
$\text{Eig}_g(\lambda) = \text{ker}\{\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}\}$	Der geometrische Eigenraum zum Eigenwert λ von \mathbf{A} .
$m_a(\lambda) = \dim\{\text{Eig}_a(\lambda)\}$	Die algebraische Vielfachheit des Eigenwerts λ .
$m_g(\lambda) = \dim\{\text{Eig}_g(\lambda)\}$	Die geometrische Vielfachheit des Eigenwerts λ .
$\alpha(\lambda)$	Der Defekt des Eigenwerts λ .

2 Das Eigenwertproblem

2.1 Motivation

Eigenwertprobleme haben unter anderem wichtige Anwendungen in der linearen Stabilitätsanalyse. Wir betrachten das stationäre Navier-Stokes-Problem auf einem beschränkten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2$ oder $d = 3$:

$$\begin{aligned} -\nu \Delta v + v \cdot \nabla v + \nabla p &= f, \\ \nabla \cdot v &= 0 \quad \text{in } \Omega, \\ u &= 0 \quad \text{auf } \partial\Omega, \end{aligned}$$

mit Geschwindigkeitsfeld v , Druck p , Viskosität ν und bekannter Volumenkraft f . Dieses besitzt für beliebige Reynolds-Zahl $Re = 1/\nu$ bei homogenen Dirichlet-Randbedingungen eine Lösung, die jedoch für große Reynolds-Zahl nicht stabil unter kleinen Störungen ist (siehe [Ran08b]). Es stellt sich also die Frage, wann eine “mathematische” stationäre Lösung auch physikalisch realisiert wird. Im Experiment sieht man, dass mit wachsender Reynolds-Zahl ein Umschlag zu instationärem bis chaotischem Verhalten (“Turbulenz”) stattfindet. Die Frage ist nun, wann es zu solcher Turbulenz kommt und ob der Umschlag durch das mathematische Modell beschrieben wird.

Die *lineare Stabilitätstheorie* betrachtet das linearisierte Eigenwertproblem, das in schwacher Formulierung lautet:

$$\begin{aligned} \nu(\nabla v, \nabla \varphi) + (v \cdot \nabla \hat{v}, \varphi) + (\hat{v} \cdot \nabla v, \varphi) - (p, \nabla \cdot \varphi) &= \lambda(v, \varphi) \quad \forall \varphi \in H_0^1(\Omega)^d, \\ (\nabla \cdot v, \chi) &= 0 \quad \forall \chi \in L^2(\Omega), \end{aligned}$$

mit einer *Basislösung* $\hat{v} \in H_0^1(\Omega)^d$. Falls für alle Eigenwerte dieses Problems $\text{Re}(\lambda) > 0$ gilt, so ist jede stationäre Lösung bedingt (das heißt gegenüber hinreichend kleinen Störungen) exponentiell stabil, andernfalls ist sie instabil ([Ran08b]). Dies gilt jedoch nur,

falls das Eigenwertproblem *normal* ist. Im Folgenden wird es also erstens von Bedeutung sein, ob der kleinste Eigenwert positiven Realteil hat, und zweitens, wie man den *Defekt* eines Eigenwerts bestimmen kann.

2.2 Problemstellung

2.2.1 Die variationelle Formulierung

In der vorliegenden Arbeit legen wir die Bezeichnungen und Notationen aus [Ran08a] zugrunde.

Wir wollen zunächst das Eigenwertproblem formulieren und gehen hierfür wie in [BO73] vor: Sei L ein Differentialoperator zweiter Ordnung in Divergenzform auf einem glatt berandeten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ oder 3),

$$L = - \sum_{i,j=1}^d \partial_i a_{ij}(x) \partial_j + \sum_{i=1}^d b_i(x) \partial_i + c(x), \quad (2.1)$$

mit Koeffizienten a_{ij} , b_i und c aus $C^\infty(\overline{\Omega})$ und $a_{ij} = a_{ji}$. Wir nehmen an, dass L *gleichmäßig elliptisch* sei, das heißt, es existiere eine Konstante $a_0 > 0$, so dass

$$\operatorname{Re} \sum_{i,j=1}^d a_{ij}(x) \xi_i \xi_j \geq a_0 \sum_{i=1}^d \xi_i^2$$

für alle reellen ξ_1, \dots, ξ_d und alle $x \in \Omega$.

Das Eigenwertproblem in *klassischer Formulierung* lautet:

$$\begin{aligned} \text{Finde } \lambda \in \mathbb{C}, u \neq 0 \quad \text{mit} \quad Lu = \lambda u \quad \text{in } \Omega, \\ B_j u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \quad (j = 1, \dots, m), \end{aligned} \quad (2.2)$$

wobei $\{B_j\}$ geeignete Randoperatoren seien. Diese müssen so beschaffen sein, dass die Funktionen, die diese Randbedingungen erfüllen, einen Vektorraum bilden; beispielsweise sind keine inhomogenen Dirichlet-Randbedingungen erlaubt.

Wir bezeichnen mit Γ_D den Teil des Gebietsrandes $\partial\Omega$, auf dem *Dirichlet-Randbedingungen* gestellt sind, analog mit Γ_N denjenigen mit *Neumann-Randbedingungen*. Für $m \in \mathbb{N}$ seien $H^m(\Omega)$ die üblichen (komplexen) Sobolev-Räume mit den Normen $\|\cdot\|_m$ sowie

$H^0(\Omega) := L^2(\Omega)$ und $H_0^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$ der Unterraum der Funktionen, die auf $\partial\Omega$ verschwinden. Sei im Folgenden

$$V := H_0^1(\Omega; \Gamma_D) := \{v \in H^1(\Omega) : v = 0 \text{ auf } \Gamma_D\}.$$

Durch Multiplikation von (2.2) mit Testfunktionen, Integration über Ω sowie partielle Integration erhält man eine Sesquilinearform $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$, welche bei homogenen Dirichlet-Randbedingungen die Form

$$a(u, \varphi) = \int_{\Omega} \left\{ \sum_{i,j=1}^d a_{ij}(x) \partial_i u \overline{\partial_j \varphi} + \sum_{i=1}^d b_i(x) \partial_i u \overline{\varphi} + c(x) u \overline{\varphi} \right\} dx$$

hat.

Sei $b := \max_{1 \leq i \leq d; x \in \Omega} |b_i(x)|$. Wir können ohne Einschränkung annehmen, dass $\operatorname{Re} c \geq a_0/2 + b^2/2a_0$, da das Addieren einer Konstanten zu c nur einen "Shift" des Eigenwerts zur Folge hat. Unter dieser Voraussetzung ist die Sesquilinearform *koerziv*, es gilt:

$$\operatorname{Re} a(v, v) \geq \frac{1}{2} a_0 \|v\|_1^2, \quad v \in V \quad (2.3)$$

(siehe [BO73]). Aufgrund der Beschränktheit der Koeffizienten ist die Sesquilinearform *beschränkt* auf $H^1(\Omega) \times H^1(\Omega)$: Es existiert eine Konstante $a_1 > 0$ mit

$$|a(v, w)| \leq a_1 \|v\|_1 \|w\|_1, \quad v, w \in V. \quad (2.4)$$

Die *variationelle Formulierung* der Eigenwertaufgabe lautet nun:

$$\text{Finde } \lambda \in \mathbb{C}, 0 \neq u \in V \quad \text{mit} \quad a(u, \varphi) = \lambda(u, \varphi) \quad \forall \varphi \in V, \quad (2.5)$$

wobei mit $(u, \varphi) = \int_{\Omega} u \overline{\varphi} dx$ das L^2 -Skalarprodukt bezeichnet sei.

Das zugehörige *adjungierte Eigenwertproblem* lautet:

$$\text{Finde } \lambda^* \in \mathbb{C}, 0 \neq u^* \in V \quad \text{mit} \quad a(\varphi, u^*) = \overline{\lambda^*}(\varphi, u^*) \quad \forall \varphi \in V. \quad (2.6)$$

Hierbei heißt u auch *rechtsseitige* oder *primale*, u^* *linksseitige* oder *duale* Eigenfunktion. Die Eigenwerte des adjungierten Problems (2.5) sind gerade die konjugiert komplexen

Eigenwerte des primalen Problems (2.6), das heißt, es gilt

$$\lambda^* = \bar{\lambda} \quad (2.7)$$

(siehe zum Beispiel [Wer07], Seite 256).

2.2.2 Die Finite-Elemente-Diskretisierung

Die Eigenwertprobleme (2.5) und (2.6) werden nun mit einem Galerkin-Verfahren diskretisiert. Hierfür wählt man einen geeigneten endlichdimensionalen Unterraum $V_h \subset V$, wobei mit h im Folgenden die Gitterweite bezeichnet sei. Dann lautet die *diskrete Formulierung* von (2.5) sowie (2.6):

$$\text{Finde } \lambda_h \in \mathbb{C}, 0 \neq u_h \in V_h \quad \text{mit} \quad a(u_h, \varphi_h) = \lambda_h(u_h, \varphi_h) \quad \forall \varphi_h \in V_h. \quad (2.8)$$

$$\text{Finde } \lambda_h^* \in \mathbb{C}, 0 \neq u_h^* \in V_h \quad \text{mit} \quad a(\varphi_h, u_h^*) = \bar{\lambda}_h^*(\varphi_h, u_h^*) \quad \forall \varphi_h \in V_h. \quad (2.9)$$

Stellt man u_h bezüglich einer geeigneten Basis $\{\varphi_h^{(i)}\}_{i=1,\dots,n}$ von Ansatzfunktionen dar, so erhält man mit den Koeffizientenvektoren \mathbf{u} von u_h sowie \mathbf{u}^* von u_h^* die äquivalente Matrixdarstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_h \mathbf{u} &= \lambda_h \mathbf{M}_h \mathbf{u}, \\ \overline{\mathbf{A}_h}^T \mathbf{u}^* &= \lambda_h^* \overline{\mathbf{M}_h}^T \mathbf{u}^*, \end{aligned} \quad (2.10)$$

wobei \mathbf{A}_h die Steifigkeitsmatrix mit Koeffizienten $(\mathbf{A}_h)_{ij} = a(\varphi_h^{(j)}, \varphi_h^{(i)})$ und \mathbf{M}_h die Massematrix mit Koeffizienten $(\mathbf{M}_h)_{ij} = (\varphi_h^{(j)}, \varphi_h^{(i)})$ sind. Dies ist ein sogenanntes *verallgemeinertes* (algebraisches) Eigenwertproblem.

2.3 Das Spektrum kompakter Operatoren

Wir wollen im Folgenden einige Aspekte der Riesz-Schauder-Theorie kompakter Operatoren beschreiben; für eine detailliertere Darstellung sei auf einführende Lehrbücher der Funktionalanalysis verwiesen (zum Beispiel [Wer07], Seite 255 ff.).

In diesem Abschnitt sei stets X ein Banachraum und $T : X \rightarrow X$ ein stetiger linearer Operator, wir schreiben hierfür $T \in L(X)$. T heißt *kompakt*, falls das Bild jeder

beschränkten Menge unter T relativkompakt ist (das heißt, der Abschluss des Bildes ist kompakt). Äquivalent hierzu ist: Für eine beschränkte Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset X$ enthält $(Tx_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine konvergente Teilfolge. Mit I sei die Identität auf X bezeichnet.

Definition 2.1. Sei $T \in L(X)$.

- (a) $\rho(T) := \{\mu \in \mathbb{C} : (T - \mu I)^{-1} \text{ existiert in } L(X)\}$ heißt die *Resolventenmenge* von T .
- (b) $\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$ heißt das *Spektrum* von T .
- (c) $\sigma_p(T) := \{\mu \in \mathbb{C} : T - \mu I \text{ nicht injektiv}\}$ heißt das *Punktspektrum* von T , seine Elemente heißen *Eigenwerte* von T .
- (d) $\sigma_c(T) := \{\mu \in \mathbb{C} : T - \mu I \text{ injektiv, nicht surjektiv, mit dichtem Bild}\}$ heißt das *stetige Spektrum* von T .
- (e) $\sigma_r(T) := \{\mu \in \mathbb{C} : T - \mu I \text{ injektiv, ohne dichtes Bild}\}$ heißt das *Restspektrum* von T .

Es gilt $\mathbb{C} = \rho(T) \sqcup \sigma(T) = \rho(T) \sqcup \sigma_p(T) \sqcup \sigma_c(T) \sqcup \sigma_r(T)$, wobei mit \sqcup die disjunkte Vereinigung bezeichnet sei.

Mit diesen Vorbereitungen zitieren wir den folgenden zentralen Satz über das Spektrum kompakter Operatoren:

Satz 2.1. Sei X ein Banachraum und $T \in L(X)$ kompakt.

- (a) Falls $\mu \in \sigma(T) \setminus \{0\}$, so ist $\mu \in \sigma_p(T)$.
- (b) Das Spektrum $\sigma(T)$ ist höchstens abzählbar mit Null als einzigem möglichen Häufungspunkt.
- (c) Der Kern von $T - \mu I$ ist endlichdimensional. Es existiert eine kleinste Zahl $p \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ mit $\ker(T - \mu I)^p = \ker(T - \mu I)^{p+1}$, und es ist $\ker(T - \mu I)^{p+r} = \ker(T - \mu I)^p$ für alle $r > 0$. Weiter ist $X = \text{ran}(T - \mu I)^p + \ker(T - \mu I)^p$. Beide Unterräume sind invariant unter T und haben trivialen Durchschnitt.

Dabei heißt ein Unterraum $M \subset X$ *invariant* unter T , falls $TM \subset M$ gilt.

Beweis. Siehe [Wer07], Satz VI.2.1, Lemma VI.2.2 und Theorem VI.2.5. □

Korollar 2.2 (Fredholm'sche Alternative). *Sei $T \in L(X)$ kompakt und $\mu \in \mathbb{K} \setminus \{0\}$, $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder \mathbb{C} . Entweder besitzt die homogene Gleichung*

$$Tx - \mu x = 0$$

nur die triviale Lösung, und in diesem Fall ist die inhomogene Gleichung

$$Tx - \mu x = y$$

für alle $y \in X$ eindeutig lösbar, oder es existieren $m = \dim \ker(T - \mu I)$ ($< \infty$) linear unabhängige Lösungen der homogenen Gleichung.

Beweis. Dies ist eine Umformulierung der Aussage, dass jedes $\mu \neq 0$ entweder in der Resolventenmenge $\rho(T)$ oder im Punktspektrum $\sigma_p(T)$ liegt. \square

Wir wollen nun diese Ergebnisse auf die konkrete Problemstellung aus Abschnitt 2.2.1 anwenden. Für $f \in L^2(\Omega)$ lässt sich die folgende Randwertaufgabe formulieren:

$$\text{Finde } u \in V \quad \text{mit} \quad a(u, \varphi) = (f, \varphi) \quad \forall \varphi \in V, \quad (2.11)$$

wobei nun $V = H_0^1(\Omega)$ oder $V = H^1(\Omega)$ gelte. Aufgrund der Voraussetzungen (2.3) und (2.4) besitzt dieses Problem für jede rechte Seite eine eindeutige Lösung u (vergleiche [BO73]). Die Zuordnung

$$f \mapsto Tf := u \quad (2.12)$$

definiert einen linearen Operator $T : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$, der als “ L^2 -Inverse” des Operators L aus (2.1) bezeichnet werden kann.

Nach dem Rellich'schen Auswahlssatz ist die Einbettung $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$ kompakt und somit auch T ein kompakter Operator. Wir setzen voraus, dass T außerdem für $f \in H^s(\Omega)$ die Regularitätsbedingung

$$\|Tf\|_{s+2} \leq C_s \|f\|_s$$

mit einer Konstanten C_s erfülle. Die von Null verschiedenen Eigenwerte μ_j von T sind gerade die inversen Eigenwerte

$$\mu_j = 1/\lambda_j$$

von L . Nach der Spektraltheorie kompakter Operatoren besitzt also der ursprüngliche Operator L aus (2.1) höchstens abzählbar viele Eigenwerte, die sich im Endlichen nicht häufen können:

$$|\lambda_1| \leq \dots \leq |\lambda_j| \leq \dots$$

Wir werden im Folgenden stets den kompakten inversen Operator T betrachten und auch das inverse Eigenwertproblem lösen, dessen Eigenwerte dann wieder zurückinvertiert werden.

2.4 Normalität und Entartung

Eigenwertprobleme spielen eine entscheidende Rolle in der hydrodynamischen Stabilitätsanalyse, wie bereits in Kapitel 2.1 erwähnt. Hierfür ist es von entscheidender Bedeutung, ob das Eigenwertproblem *normal* ist.

Für die Definition von Normalität sind zunächst einige grundlegende Notationen nötig. Wir bezeichnen den *geometrischen Eigenraum* des Eigenwerts λ zum Matrix-Eigenwertproblem $\mathbf{A}u = \lambda u$ ($\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$) mit

$$\text{Eig}_g(\lambda) = \ker\{\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\},$$

er wird von den Eigenvektoren aufgespannt. Im Unterschied hierzu wird der *algebraische Eigenraum*

$$\text{Eig}_a(\lambda) = \cup_{\nu \in \mathbb{N}} \ker\{\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\}^\nu$$

von einer *Jordanbasis* $\{\varphi_j, j = 1, \dots, \dim\{\text{Eig}_a(\lambda)\}\}$ aufgespannt; diese besteht aus Eigenvektoren, $L\varphi_i - \lambda\varphi_i = 0$, und *Hauptvektoren*, $L\varphi_i - \lambda\varphi_i = \varphi_{i-1}$. Die *algebraische* und *geometrische Vielfachheit* werden bezeichnet mit

$$m_a(\lambda) = \dim\{\text{Eig}_a(\lambda)\},$$

$$m_g(\lambda) = \dim\{\text{Eig}_g(\lambda)\}.$$

Ein Matrix-Eigenwertproblem $\mathbf{A}u = \lambda u$ mit $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ heißt *normal*, falls gilt:

$$\mathbf{A}\overline{\mathbf{A}}^T = \overline{\mathbf{A}}^T \mathbf{A}.$$

Nach dem Spektralsatz für normale Matrizen ist hierzu äquivalent, dass eine unitäre Matrix \mathbf{Q} existiert mit

$$\overline{\mathbf{Q}}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} = \text{diag}(\lambda_i)_{i=1, \dots, n};$$

es existiert in diesem Fall eine Orthonormalbasis des \mathbb{C}^n aus Eigenvektoren von \mathbf{A} (siehe zum Beispiel [Bos08], Seite 268). Insbesondere besitzt die Matrix \mathbf{A} eine triviale Jordan-Normalform und es gilt für alle Eigenwerte, dass die algebraische Vielfachheit gleich der geometrischen ist:

$$m_a(\lambda_i) = m_g(\lambda_i).$$

Wir wollen nun diese Konzepte auf den unendlichdimensionalen Fall (2.2) übertragen und betrachten hierfür den Operator $T : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ aus (2.12). Ein Operator $T^* : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ heißt der zu T *adjungierte Operator*, falls

$$(Tx, y) = (x, T^*y) \quad \forall x, y \in L^2(\Omega).$$

Der Operator T heißt *normal*, falls er mit seinem adjungierten Operator T^* vertauscht,

$$TT^* = T^*T.$$

Man definiert analog zum endlichdimensionalen Fall die geometrische und algebraische Vielfachheit eines Eigenwerts μ von T als Dimension des geometrischen beziehungsweise algebraischen Eigenraums,

$$\begin{aligned} m_g(\mu) &= \dim\{\text{Eig}_g(\mu)\} = \dim\{\ker\{T - \mu I\}\}, \\ m_a(\mu) &= \dim\{\text{Eig}_a(\mu)\} = \dim\{\cup_{\nu \in \mathbb{N}} \ker\{T - \mu I\}^\nu\}. \end{aligned}$$

Dass dies wohldefiniert ist, folgt aus Satz 2.1. Aus [GW78] übernehmen wir die folgende Definition:

Definition 2.2. Ein Eigenwert μ_i heißt *entartet*, falls die algebraische Vielfachheit von μ_i echt größer als die geometrische ist:

$$m_a(\mu_i) > m_g(\mu_i).$$

Andernfalls heißt er *nicht-entartet*. Ein Eigenwertproblem heißt entartet, falls es einen entarteten Eigenwert besitzt.

Definition 2.3. Der *Defekt* eines Eigenwerts μ ist definiert als die kleinste Zahl $\alpha = \alpha(\mu) \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, für die gilt:

$$\ker\{(T - \mu I)^{\alpha+\nu}\} = \ker\{(T - \mu I)^{\alpha+1}\}, \quad \nu \in \mathbb{N}.$$

Die Existenz einer solchen Zahl $\alpha \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ folgt wiederum aus Satz 2.1. Offensichtlich ist ein Eigenwert genau dann entartet, wenn für den Defekt $\alpha(\mu) > 0$ gilt. Der algebraische Eigenraum wird wie im Endlichdimensionalen von einer *Jordanbasis* $\{\varphi_j, j = 1, \dots, m_a(\mu)\}$ aufgespannt, bestehend aus Eigenvektoren, $T\varphi_i - \mu\varphi_i = 0$, und Hauptvektoren, $T\varphi_i - \mu\varphi_i = \varphi_{i-1}$. Die Existenz eines solchen Hauptvektors ist also äquivalent zur Entartung des Eigenwertproblems, da in diesem Fall offensichtlich $\alpha(\mu) > 0$ erfüllt ist.

2.4.1 Ein Beispiel für Entartung

Die Normalität des Eigenwertproblems ist von entscheidender Bedeutung in der hydrodynamischen Stabilität. Wir sind also insbesondere daran interessiert, entartete Eigenwerte entdecken zu können. Hierbei ergibt sich folgendes Problem:

Die Entartung eines Eigenwerts ist nicht stabil gegenüber kleinen Störungen, wie man sich an folgendem Beispiel verdeutlicht (vergleiche [Heu02]). Betrachte die Matrix \mathbf{A} und die gestörte Matrix \mathbf{A}_ε mit

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_\varepsilon = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ \varepsilon & \lambda \end{pmatrix}.$$

Der entartete Eigenwert λ von \mathbf{A} spaltet sich in die beiden nicht-entarteten Eigenwerte $\lambda_\varepsilon^\pm = \lambda \pm \sqrt{\varepsilon}$ auf. Man betrachtet die Menge $\Sigma(\mathbf{A}) := \{\lambda_\varepsilon^\pm\}$ als Approximation desselben Eigenwerts λ , der algebraischen Vielfachheit entsprechend gezählt. In diesem Sinn ist die algebraische Vielfachheit stabil unter kleinen Störungen, während die geometrische Vielfachheit instabil ist.

Allgemein spaltet sich ein Eigenwert λ mit algebraischer Vielfachheit $m_a(\lambda) \geq 2$ bei numerischer Berechnung normalerweise in eine Gruppe von einzelnen Eigenwerten $\{\lambda_h^{(i)}, i = 1, \dots, m_a(\lambda)\}$ auf. Diese sind aufgrund von Rundungsfehlern im Allgemeinen nicht-entartet.

In Bezug auf die hydrodynamische Stabilität ist der Fall $\Sigma(\mathbf{A}) \subset \mathbb{C}_+ := \{z \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} z > 0\}$ interessant. Wir wollen den kritischsten Eigenwert, also denjenigen mit kleinstem Realteil,

berechnen. Die entscheidende Frage ist somit: Wie lässt sich *a posteriori* feststellen, ob der approximierte Eigenwert λ entartet (und somit das zugehörige Eigenwertproblem nicht normal) ist?

Die Idee ist folgende: Betrachte wieder obiges Beispiel. Sei λ_ε einer der beiden approximierenden Eigenwerte von \mathbf{A}_ε mit zugehörigem rechts- und linksseitigem Eigenvektor u_ε und u_ε^* . Es existieren zugehörige rechts- und linksseitige Eigenvektoren u und u^* von \mathbf{A} mit $\|u - u_\varepsilon\| \rightarrow 0$ und $\|u^* - u_\varepsilon^*\| \rightarrow 0$ für $\varepsilon \rightarrow 0$. Im vorliegenden Beispiel ist $m_a(\lambda) = 2$, aber $m_g(\lambda) = 1$, so dass ein Hauptvektor w existiert mit

$$\mathbf{A}w - \lambda w = u.$$

Daraus folgt sofort, dass $(u, u^*) = 0$ gelten muss wegen

$$(u, u^*) = (\mathbf{A}w, u^*) - (\lambda w, u^*) = (w, \mathbf{A}^*u^*) - (w, \bar{\lambda}u^*) = 0,$$

da $\bar{\lambda} = \lambda^*$. Umgekehrt folgt aus $(u, u^*) = 0$ die Entartung des Eigenwertproblems, denn in diesem Fall gilt

$$u \in \ker(\mathbf{A}^* - \lambda^*\mathbf{I})^\perp = \text{im}(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$$

und damit die Existenz eines Hauptvektors.

Bemerkung 2.1. Im allgemeinen Fall ist es wichtig, $(u, u_i^*) = 0$ für *alle* linear unabhängigen Eigenfunktionen u_i^* ($i = 1, \dots, m_g(\lambda)$) zu zeigen: Aus $(u, u^*) = 0$ für *eine* adjungierte Eigenfunktion u^* folgt noch nicht die Orthogonalität von u zum ganzen adjungierten Eigenraum.

Im obigen Beispiel gilt $u_\varepsilon \rightarrow u$ und $u_\varepsilon^* \rightarrow u^*$ für $\varepsilon \rightarrow 0$. Normiert man nun die approximativen Eigenvektoren zu $\|u_\varepsilon\| = 1$ und $(u_\varepsilon, u_\varepsilon^*) = 1$, so muss also wegen $(u, u^*) = 0$

$$\|u_\varepsilon^*\| \rightarrow \infty$$

gelten für $\varepsilon \rightarrow 0$. Dies ist beim vorliegenden Beispiel tatsächlich der Fall (siehe [Heu02]). Die Norm des approximativen linksseitigen Eigenvektors u_ε^* ist also nach Normierung $\|u_\varepsilon\| = (u_\varepsilon, u_\varepsilon^*) = 1$ ein Indikator für die Entartung eines Eigenwertproblems. Analog hierzu kann man $\|u_\varepsilon\| = \|u_\varepsilon^*\| = 1$ normieren und testen, ob

$$(u_\varepsilon, u_\varepsilon^*) \rightarrow 0$$

für $\varepsilon \rightarrow 0$ gilt. Letztere Vorgehensweise ist mathematisch sinnvoller, da auch bei Entartung exakte und approximative Eigenfunktionen auf eins normiert werden können, wohingegen das Skalarprodukt verschwinden kann.

Dieses Kriterium werden wir in Kapitel 4 praktisch überprüfen.

3 Lösung von Eigenwertproblemen mit dem Arnoldi-Algorithmus

Wir betrachten im Folgenden das allgemeine Matrix-Eigenwertproblem:

$$\text{Finde } \lambda \in \mathbb{C}, 0 \neq \mathbf{u} \in \mathbb{C}^n \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u},$$

mit einer regulären Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Zum Lösen dieser Eigenwertaufgabe lässt sich beispielsweise das QR-Verfahren verwenden, was jedoch zwei große Nachteile hat. Zum einen ist die Matrix (insbesondere die Steifigkeits- und Massematrix von partiellen Differentialgleichungen) häufig zu groß. Zum anderen ist das QR-Verfahren sehr aufwändig, es sind $\mathcal{O}(n^3)$ Rechenoperationen pro Schritt nötig. Außerdem werden durch das QR-Verfahren alle Eigenwerte einer Matrix berechnet, was häufig gar nicht nötig beziehungsweise sinnvoll ist, da man in der Praxis meistens nur an einigen bestimmten Eigenwerten interessiert ist, beispielsweise an den kleinsten. Insbesondere falls \mathbf{A} eine große, dünnbesetzte Matrix ist und nur einige extreme Eigenwerte berechnet werden sollen, stellt das *Arnoldi-Verfahren* eine lohnende Alternative dar.

Durch den Arnoldi-Algorithmus wird \mathbf{A} sukzessive auf obere Hessenberg-Form gebracht. Die erhaltene Hessenberg-Matrix ist bei richtiger Durchführung des Algorithmus deutlich kleiner als \mathbf{A} . Beides führt dazu, dass danach das QR-Verfahren viel billiger angewendet werden kann, der Aufwand ist jetzt nur noch $\mathcal{O}(k^2)$, wobei mit k die Dimension der Hessenberg-Matrix bezeichnet sei (vergleiche [PFTV86], Seite 369-376). Das QR-Verfahren liefert die Eigenwerte der Hessenberg-Matrix als Approximation an die Eigenwerte von \mathbf{A} .

Die zugehörigen Eigenvektoren erhält man dann mit einer speziellen QR-Zerlegung für singuläre Matrizen. Hierbei ist bei komplexen Eigenwerten entweder komplexe Arithmetik nötig, oder man identifiziert \mathbb{C} mit \mathbb{R}^2 und kann mit einigen Modifikationen der Algorithmen weiterhin ausschließlich reelle Arithmetik verwenden. Darauf werden wir im Folgenden näher eingehen.

3.1 Motivation und Herleitung des Arnoldi-Algorithmus

Wir wollen im Folgenden das Arnoldi-Verfahren motivieren. Es gehört zu den Krylow-Raum-Methoden, wir betrachten also Krylow-Räume $K_j = \text{span} \{ v_1, \mathbf{A}v_1, \dots, \mathbf{A}^{j-1}v_1 \}$ für $j = 1, \dots, k$ mit einem normierten Startvektor $v_1 \in \mathbb{R}^n$. Zur Herleitung nehmen wir zunächst an, dass mit $\{ v_1, \dots, v_j \}$ eine Orthonormalbasis des j -ten Krylow-Raums vorliegt. Wie ist nun v_{j+1} zu wählen, so dass $\{ v_1, \dots, v_{j+1} \}$ eine Orthonormalbasis von K_{j+1} bildet?

Wir machen für v_{j+1} mit Gram-Schmidt den Ansatz

$$\tilde{v}_{j+1} = \mathbf{A}v_j - \sum_{i=1}^j (\mathbf{A}v_j, v_i)v_i,$$

und erhalten mit Normierung

$$v_{j+1} := \frac{\tilde{v}_{j+1}}{\|\tilde{v}_{j+1}\|}.$$

Bei zu kleinem $\|\tilde{v}_{j+1}\|$ ist die Normierung nicht mehr sinnvoll; statt dessen bricht man das Verfahren bei $\|\tilde{v}_{j+1}\| < TOL$ vorzeitig ab, wobei TOL eine vorgegebene Toleranzgrenze ist. In den Berechnungen in Kapitel 4 wurde jeweils $TOL = 10^{-8}$ gesetzt.

Man sieht, dass die Vektoren $\{v_i\}_{i=1}^j$ tatsächlich die Krylowräume K_j aufspannen, denn wegen

$$\tilde{v}_{j+1} = \underbrace{\mathbf{A}v_j}_{\in K_{j+1}} - \underbrace{\sum_{i=1}^j (\mathbf{A}v_j, v_i)v_i}_{\in K_j} \in K_{j+1}$$

ist $\tilde{v}_{j+1} \in K_j$ genau dann, wenn $\mathbf{A}v_j \in K_j$.

Wir erhalten zusammenfassend den *Arnoldi-Algorithmus* 3.1 (vergleiche [Mei08]). Nach k Schritten des Algorithmus erhält man eine obere Hessenberg-Matrix \mathbf{H}_k mit

$$(\mathbf{H}_k)_{ij} = \begin{cases} h_{ij} & \text{aus dem Arnoldi-Algorithmus} & \text{für } i \leq j + 1, \\ 0 & & \text{für } i > j + 1 \end{cases} \quad (3.1)$$

und eine $(n \times k)$ -Matrix $\mathbf{V}_k := (v_1, \dots, v_k)$. Man rechnet leicht nach, dass damit

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{V}_k^T \mathbf{A} \mathbf{V}_k \quad (3.2)$$

Algorithmus 3.1 Arnoldi-Algorithmus

```

 $\tilde{v}_1 \neq 0, \quad v_1 := \frac{\tilde{v}_1}{\|\tilde{v}_1\|},$ 
for  $j = 1$  to  $k$  do
  for  $i = 1$  to  $j$  do
     $h_{ij} := (v_i, \mathbf{A}v_j),$ 
  end for
   $w_j := \mathbf{A}v_j - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i,$ 
   $h_{j+1,j} := \|w_j\|,$ 
  if  $h_{j+1,j} < TOL$  then
    break
  end if
   $v_{j+1} := \frac{w_j}{h_{j+1,j}}.$ 
end for

```

gilt.

In der Theorie gilt $h_{j+1,j} = 0$ spätestens im n -ten Schritt, so dass es sich theoretisch um ein direktes Verfahren handelt, und es gilt $\mathbf{A}\mathbf{V}_n = \mathbf{V}_n\mathbf{H}_n$. Das vorzeitige Abbrechen des Algorithmus bei $h_{k+1,k} < TOL$ macht Sinn, denn

$$\mathbf{A}\mathbf{V}_k = \mathbf{V}_n \begin{pmatrix} & & & & \\ & \mathbf{H}_k & & & \\ 0 & \dots & h_{k+1,k} & & \\ \vdots & & \vdots & & \\ 0 & \dots & 0 & & \end{pmatrix} = \mathbf{V}_k\mathbf{H}_k + (0, \dots, 0, h_{k+1,k}v_{k+1}) = \mathbf{V}_k\mathbf{H}_k + h_{k+1,k}v_{k+1}e_k^T.$$

Mit anderen Worten, falls $h_{k+1,k} = 0$, so ist $\mathbf{A}\mathbf{V}_k = \mathbf{V}_k\mathbf{H}_k$ erreicht und das Verfahren kann abgebrochen werden. In der Praxis erhält man hinreichend gute Näherungen jedoch auch ohne kleines $h_{k+1,k}$ oft schon für $k \ll n$ (siehe z.B. [Saa96]), was man auch in Kapitel 4 sehen kann.

Ein Problem des Arnoldi-Algorithmus ist, dass die Orthogonalität der Basisvektoren $\{v_i\}$ in der Praxis schnell verloren geht. Abhilfe schafft hier der sogenannte *Arnoldi-modifizierte Gram-Schmidt-Algorithmus* 3.2, welcher unter Annahme exakter Arithmetik äquivalent zu obigem Algorithmus ist. Anstelle von Zeile 3 bis 6 des ursprünglichen Algorithmus 3.1 wird hier die Summe nicht als Ganzes subtrahiert, sondern die Einzelsummanden. Man erhält die Darstellung in Zeile 3 bis 7 des Arnoldi-modifizierten Gram-Schmidt

Algorithmus 3.2 Arnoldi-modifizierter Gram-Schmidt-Algorithmus

```

 $\tilde{v}_1 \neq 0, \quad v_1 := \frac{\tilde{v}_1}{\|\tilde{v}_1\|},$ 
for  $j = 1$  to  $k$  do
     $w_j := \mathbf{A}v_j,$ 
    for  $i = 1$  to  $j$  do
         $h_{ij} := (v_i, w_j),$ 
         $w_j := w_j - h_{ij}v_i,$ 
    end for
     $h_{j+1,j} := \|w_j\|,$ 
    if  $h_{j+1,j} < TOL$  then
        break
    end if
     $v_{j+1} := \frac{w_j}{h_{j+1,j}}.$ 
end for

```

3.2. Hierdurch wird die Gefahr der Auslöschung verringert, der Algorithmus ist deutlich stabiler.

Die Kosten für die Orthogonalisierung bleiben hierbei dieselben: Es sind jeweils $(k + 1)n$ Speicherplätze für die Vektoren v_1, \dots, v_k und für einen Vektor, der jeweils mit dem aktuellen w_j überschrieben wird, nötig. Der Aufwand nur für die Orthogonalisierung beträgt jeweils ungefähr $2k^2n$ Punktoperationen, wie man leicht nachrechnet (vergleiche [Saa96]).

Für Details zum Arnoldi-Algorithmus siehe zum Beispiel [GL89] oder [Mei08].

3.1.1 Komplexe Arithmetik

Im Fall komplexer Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ muss der Arnoldi-Algorithmus mit komplexer Arithmetik verwendet werden. Um diese Schwierigkeit bei der Implementierung zu umgehen, kann man \mathbb{C} mit \mathbb{R}^2 identifizieren und nach einigen Modifikationen des Algorithmus weiterhin nur reelle Arithmetik benutzen.

In unserem Fall wurden nur reelle Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ betrachtet, so dass zunächst keine Modifikationen des Algorithmus 3.2 nötig sind. Die Berechnung von komplexen Eigenwerten und Eigenvektoren von reellen Matrizen werden wir in Abschnitt 3.4.1 kurz erläutern.

3.2 Orthogonalitätsverlust beim Arnoldi-Algorithmus

3.2.1 Der Householder-Arnoldi

Im Allgemeinen funktioniert der Arnoldi-modifizierte Gram-Schmidt-Algorithmus 3.2 sehr gut. Es gibt jedoch Fälle, in denen die Auslöschung im Orthogonalisierungsschritt so groß ist, dass die Orthogonalität völlig verloren geht (Beispiele siehe Kapitel 3.2.2). In solchen Fällen gibt es zwei mögliche Vorgehensweisen (vergleiche [Saa96]).

Erstens kann man in jedem Iterationsschritt überprüfen, ob der Vektor w_j am Ende des Iterationsschritts eine deutlich kleinere Norm hat als der Vektor $w_j = \mathbf{A}v_j$ am Anfang des Iterationsschritts. Das ist ein Hinweis darauf, dass starke Auslöschung stattgefunden hat. In diesem Fall wird eine Reorthogonalisierung vorgenommen.

Oft ist jedoch auch das nicht ausreichend. In diesem Fall ist es sinnvoll, die Orthogonalisierung mit Hilfe von Householder-Transformationen durchzuführen. Dies wurde zum ersten Mal vorgeschlagen in [Wal88]. Der *Householder-Arnoldi* 3.3 ist etwas teurer, aber auch deutlich robuster als der Arnoldi-modifizierte Gram-Schmidt.

Algorithmus 3.3 Householder-Arnoldi

```

 $z_1 \neq 0$ 
for  $j = 1$  to  $k + 1$  do
    berechne den Householder-Einheitsvektor  $w_j$  mit
         $(w_j)_i = 0, i = 1, \dots, j - 1$  und
         $(\mathbf{P}_j z_j)_i = 0, i = j + 1, \dots, n$ , wobei  $\mathbf{P}_j = I - 2w_j w_j^T$ ,
     $h_{j-1} = \mathbf{P}_j z_j$ ,
     $v_j = \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_j e_j$ ,
    if  $j \leq k$  then
        berechne  $z_{j+1} = \mathbf{P}_j \mathbf{P}_{j-1} \cdots \mathbf{P}_1 \mathbf{A}v_j$ 
    end if
    if  $(h_{j-1})_j = 0$  then
        break
    end if
end for

```

Der Householder-Arnoldi liefert mit einem beliebigen Startvektor z_1 die QR-Zerlegung der Matrix $(z_1, \mathbf{A}v_1, \mathbf{A}v_2, \mathbf{A}v_3, \dots, \mathbf{A}v_k)$: Setzt man $\mathbf{Q}_j := \mathbf{P}_j \mathbf{P}_{j-1} \cdots \mathbf{P}_1$, so gilt

$$\mathbf{Q}_k (z_1, \mathbf{A}v_1, \mathbf{A}v_2, \mathbf{A}v_3, \dots, \mathbf{A}v_k) = (h_0, h_1, \dots, h_k),$$

wobei $(h_0, h_1, \dots, h_k) \in \mathbb{R}^{n \times (k+1)}$ eine obere Dreiecksmatrix ist und \mathbf{Q}_k unitär.

Der Zusammenhang mit dem Standard-Arnoldi ist folgender: Sei \mathbf{H}_k die $(k \times k)$ -Matrix, die aus den ersten k Zeilen von (h_1, \dots, h_k) besteht. Dann ist \mathbf{H}_k eine obere Hessenberg-Matrix und man rechnet leicht nach, dass wieder

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{V}_k^T \mathbf{A} \mathbf{V}_k$$

gilt, wobei $\mathbf{V}_k = (v_1, \dots, v_k)$ ist. Die Vektoren $\{v_i\}$ bilden in exakter Arithmetik wiederum eine Orthonormalbasis des Krylow-Raums und sind (bei selbem Startvektor) bis auf das Vorzeichen identisch mit den Vektoren aus dem Standard-Arnoldi. Für Details zum Householder-Arnoldi vergleiche [Saa96].

Die Orthogonalisierung mit Householder-Transformationen ist zwar deutlich robuster, aber auch fast doppelt so aufwändig und speicherintensiv wie die Gram-Schmidt-Orthogonalisierung. Normalerweise müssen die Vektoren v_j , $j = 1, \dots, k$, nicht gespeichert werden, sondern nur die Vektoren w_j , so dass kein zusätzlicher Speicherbedarf entsteht. In unserem Fall wird jedoch die Transformationsmatrix \mathbf{V}_k zum Berechnen der Eigenvektoren benötigt, wie wir in Kapitel 3.4 sehen werden. Daher ist hier im Vergleich zum Gram-Schmidt ungefähr der doppelte Speicher nötig (wenn man von den Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{H}_k absieht).

Was den Aufwand betrifft, so dominiert die Multiplikation mit den Householder-Matrizen in Zeile 7 und 9 des Algorithmus 3.3 (vergleiche [Saa96], Seite 150). Die Multiplikation eines Vektors v mit einer Householder-Matrix $\mathbf{P}_i = \mathbf{I} - 2w_i w_i^T$ wird dabei allgemein durchgeführt als

$$(\mathbf{I} - 2w_i w_i^T)v = v - \sigma w_i, \quad \text{wobei } \sigma = 2w_i^T v.$$

Da die ersten $i - 1$ Einträge von w_i verschwinden, erfordert dies im Wesentlichen die Berechnung eines Skalarprodukts von Vektoren der Länge $n - i + 1$, gefolgt von einem Vektor-Update derselben Länge. Insgesamt sind hierbei also $4(n - i + 1)$ arithmetische Operationen nötig. Allein die Householder-Transformationen erfordern also, lässt man den letzten Iterationsschritt außer Acht, einen Aufwand von

$$\sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^j 8(n - i + 1) = 8 \sum_{j=1}^k \left(jn - \frac{j(j-1)}{2} \right) \approx 4k^2 n - \frac{4}{3}k^3.$$

Da der letzte Summand wegen $k \ll n$ im Allgemeinen vernachlässigbar ist, beträgt der Aufwand also fast das doppelte im Vergleich zu Gram-Schmidt, wo $2k^2 n$ Punktoperatio-

nen nötig sind, wie bereits erwähnt.

Nach [Saa96] ist der Arnoldi-modifizierte Gram-Schmidt im Allgemeinen mehr als ausreichend für das Lösen linearer Gleichungssysteme. Falls es jedoch sehr auf die Robustheit des Algorithmus ankommt, wie gerade bei Eigenwertproblemen, ist der Householder-Arnoldi möglicherweise die bessere Wahl.

Im nächsten Unterkapitel 3.2.2 wird ein Vergleich der beiden Algorithmen gegeben. Ansonsten wurde im Folgenden jedoch ausschließlich mit dem Householder-Arnoldi gerechnet, da sich dieser in den Tests als deutlich robuster herausstellte.

3.2.2 Numerischer Vergleich von Arnoldi-modifiziertem Gram-Schmidt und Householder-Arnoldi

In diesem Abschnitt wird ein Vergleich der Algorithmen 3.2 und 3.3 anhand von Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gegeben. Es werden vier verschiedene Testfälle betrachtet. Sei $b_j := \min \{ 1.2^j, 1000 \}$ ($j \in \mathbb{N}$). Als Testmatrizen wurden verwendet:

- Einfache reelle Eigenwerte, nicht entartet:

$$\mathbf{D} := \text{diag}(b_1, \dots, b_n)$$

- Einfache komplexe Eigenwerte, nicht entartet:

$$\mathbf{D} := \text{diag}(\mathbf{B}_1, \dots, \mathbf{B}_{n/2}), \text{ wobei } \mathbf{B}_j := \begin{pmatrix} b_j & 1 \\ -1 & b_j \end{pmatrix}$$

- Doppelte reelle Eigenwerte, entartet:

$$\mathbf{D} := \text{diag}(\mathbf{C}_1, \dots, \mathbf{C}_{n/2}), \text{ wobei } \mathbf{C}_j := \begin{pmatrix} b_j & 1 \\ 0 & b_j \end{pmatrix}$$

- Doppelte komplexe Eigenwerte, entartet:

$$\mathbf{D} := \text{diag}(\mathbf{D}_1, \dots, \mathbf{D}_{n/4}), \text{ wobei } \mathbf{D}_j := \begin{pmatrix} \mathbf{B}_j & 1 \\ 0 & \mathbf{B}_j \end{pmatrix}$$

Tabelle 3.1: Arnoldi-modifizierter Gram-Schmidt, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{60 \times 60}$:

Berechnung der Eigenwerte der vier Testmatrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{60 \times 60}$ mit dem Arnoldi-modifizierten Gram-Schmidt-Algorithmus und variierter Kondition, mit relativem Fehler $\varepsilon(\lambda) := (\lambda - \lambda_h)/\lambda$

(a) komplex, nicht entartet

κ	$\text{cond}(\mathbf{W})$	$\text{cond}(\mathbf{A})$	$\varepsilon(\lambda_{\max})$	$\max_j \{ \varepsilon(\lambda_j) \}$	$\max_{i \neq j} \{ (v_i, v_j) \}$
0	$5.19 \cdot 10^3$	$1.38 \cdot 10^6$	$7.45 \cdot 10^{-14}$	$4.16 \cdot 10^{-6}$	$1.08 \cdot 10^{-4}$
2	$7.01 \cdot 10^4$	$7.69 \cdot 10^4$	$1.30 \cdot 10^{-12}$	$5.97 \cdot 10^{-7}$	$4.78 \cdot 10^{-4}$
4	$7.56 \cdot 10^7$	$4.93 \cdot 10^7$	$1.47 \cdot 10^{-10}$	$9.90 \cdot 10^{-4}$	$2.20 \cdot 10^{-4}$
6	$8.58 \cdot 10^8$	$4.07 \cdot 10^{10}$	$1.29 \cdot 10^{-7}$	$4.96 \cdot 10^{-1}$	$5.67 \cdot 10^{-1}$

(b) reell, entartet

κ	$\text{cond}(\mathbf{W})$	$\text{cond}(\mathbf{A})$	$\varepsilon(\lambda_{\max})$	$\max_j \{ \varepsilon(\lambda_j) \}$	$\max_{i \neq j} \{ (v_i, v_j) \}$
0	$2.53 \cdot 10^4$	$3.96 \cdot 10^7$	$5.96 \cdot 10^{-8}$	1	$3.15 \cdot 10^{-1}$
2	$2.98 \cdot 10^5$	$4.67 \cdot 10^5$	$1.14 \cdot 10^{-7}$	$9.99 \cdot 10^{-1}$	$6.71 \cdot 10^{-1}$
4	$6.61 \cdot 10^6$	$7.07 \cdot 10^6$	$3.15 \cdot 10^{-6}$	$9.98 \cdot 10^{-1}$	$5.00 \cdot 10^{-1}$
6	$1.73 \cdot 10^9$	$8.95 \cdot 10^{11}$	$8.00 \cdot 10^{-4}$	1	$8.16 \cdot 10^{-1}$

Dann wurde die Matrix \mathbf{D} durch eine Ähnlichkeitstransformation in eine vollbesetzte Matrix übergeführt, wodurch die Eigenwerte natürlich nicht verändert werden. Mit einer Zufallsmatrix $\tilde{\mathbf{W}}$ und einer Diagonalmatrix $\tilde{\mathbf{D}} := \text{diag} \{ 1, 1, \dots, 1, 10^\kappa \}$ erhält man eine Transformationsmatrix

$$\mathbf{W} := \tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{W}},$$

deren Kondition durch Modifikation von κ variiert werden kann. Berechnet wurden dann die Eigenwerte der Matrix

$$\mathbf{A} := \mathbf{W}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{W},$$

die im reellen Fall $\lambda_j = 1.2^j$, im komplexen Fall $\lambda_j = 1.2^j \pm i$ sind. Es wurden je n Arnoldi-Iterationen durchgeführt, so dass der Algorithmus bis auf Rundungsfehler die exakten Eigenwerte liefern sollte (da es sich ja theoretisch um ein direktes Verfahren handelt). Die Eigenwerte der vom Arnoldi-Algorithmus gelieferten oberen Hessenberg-Matrix wurden hierbei mit einem speziellen QR-Algorithmus berechnet, der in Kapitel 3.3 noch genauer beschrieben wird.

Die Tests wurden für Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit zunehmender Größe n durchgeführt. Es stellte sich heraus, dass die Eigenwerte beispielsweise für $n = 20$ noch relativ gut berechnet

Tabelle 3.2: Householder-Arnoldi, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{60 \times 60}$:

Berechnung der Eigenwerte der vier Testmatrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{60 \times 60}$ mit dem Householder-Arnoldi und variierter Kondition, mit relativem Fehler $\varepsilon(\lambda) := (\lambda - \lambda_h)/\lambda$

(a) reell, nicht entartet

κ	$\text{cond}(\mathbf{W})$	$\text{cond}(\mathbf{A})$	$\max_j \{ \varepsilon(\lambda_j) \}$	$\max_{i \neq j} \{ (v_i, v_j) \}$
0	$3.63 \cdot 10^3$	$1.63 \cdot 10^7$	$8.74 \cdot 10^{-12}$	$5.23 \cdot 10^{-16}$
2	$7.26 \cdot 10^4$	$1.09 \cdot 10^6$	$1.82 \cdot 10^{-12}$	$6.38 \cdot 10^{-16}$
4	$1.73 \cdot 10^7$	$1.63 \cdot 10^7$	$1.27 \cdot 10^{-11}$	$7.55 \cdot 10^{-16}$
6	$7.71 \cdot 10^8$	$1.58 \cdot 10^6$	$1.79 \cdot 10^{-12}$	$7.99 \cdot 10^{-16}$

(b) komplex, nicht entartet

κ	$\text{cond}(\mathbf{W})$	$\text{cond}(\mathbf{A})$	$\max_j \{ \varepsilon(\lambda_j) \}$	$\max_{i \neq j} \{ (v_i, v_j) \}$
0	$1.90 \cdot 10^3$	$1.99 \cdot 10^5$	$1.33 \cdot 10^{-13}$	$6.94 \cdot 10^{-16}$
2	$6.16 \cdot 10^4$	$4.73 \cdot 10^4$	$3.58 \cdot 10^{-12}$	$6.37 \cdot 10^{-16}$
4	$1.40 \cdot 10^7$	$3.49 \cdot 10^6$	$1.67 \cdot 10^{-11}$	$4.96 \cdot 10^{-16}$
6	$3.10 \cdot 10^9$	$1.63 \cdot 10^{12}$	$2.87 \cdot 10^{-5}$	$5.57 \cdot 10^{-16}$

(c) reell, entartet

κ	$\text{cond}(\mathbf{W})$	$\text{cond}(\mathbf{A})$	$\max_j \{ \varepsilon(\lambda_j) \}$	$\max_{i \neq j} \{ (v_i, v_j) \}$
0	$9.38 \cdot 10^2$	$9.03 \cdot 10^4$	$3.35 \cdot 10^{-7}$	$7.54 \cdot 10^{-16}$
2	$5.41 \cdot 10^4$	$4.31 \cdot 10^4$	$1.12 \cdot 10^{-7}$	$6.11 \cdot 10^{-16}$
4	$3.30 \cdot 10^7$	$6.18 \cdot 10^7$	$5.68 \cdot 10^{-6}$	$7.63 \cdot 10^{-16}$
6	$1.82 \cdot 10^9$	$7.18 \cdot 10^{11}$	$5.06 \cdot 10^{-4}$	$7.18 \cdot 10^{-16}$

(d) komplex, entartet

κ	$\text{cond}(\mathbf{W})$	$\text{cond}(\mathbf{A})$	$\max_j \{ \varepsilon(\lambda_j) \}$	$\max_{i \neq j} \{ (v_i, v_j) \}$
0	$1.74 \cdot 10^4$	$2.25 \cdot 10^6$	$8.43 \cdot 10^{-7}$	$4.51 \cdot 10^{-16}$
2	$3.86 \cdot 10^4$	$5.35 \cdot 10^4$	$2.11 \cdot 10^{-7}$	$5.14 \cdot 10^{-16}$
4	$1.70 \cdot 10^7$	$5.51 \cdot 10^9$	$5.12 \cdot 10^{-6}$	$7.63 \cdot 10^{-16}$
6	$8.71 \cdot 10^9$	$7.75 \cdot 10^{14}$	$6.21 \cdot 10^{-3}$	$5.26 \cdot 10^{-16}$

werden, aber schon bei $n = 60$ waren die Ergebnisse mit dem Arnoldi-modifizierten Gram-Schmidt sehr schlecht. Man sieht in Tabelle 3.1, dass der relative Fehler unabhängig von der Konditionszahl fast überall inakzeptabel groß ist. Es sind nur zwei der vier Testfälle dargestellt, die Ergebnisse für die anderen beiden Testmatrizen waren vergleichbar. Der Orthogonalitätsverlust der Basisvektoren ist ebenfalls katastrophal.

Die Ergebnisse mit dem Householder-Arnoldi hingegen sind sehr gut, wie man an Tabelle 3.2 sieht. Der relative Fehler ist deutlich kleiner als beim Arnoldi-modifizierten Gram-Schmidt, Orthogonalitätsverlust findet praktisch gar nicht statt.

Diese Ergebnisse sprechen also ganz klar für Householder- anstelle von Gram-Schmidt-Orthogonalisierung. Allerdings wurden bei der folgenden Anwendung auf partielle Differentialgleichungen ganz andere Ergebnisse beobachtet. Bei der Konvektions-Diffusions-Gleichung (siehe Kapitel 4.1) fand zwar ein deutlicher Orthogonalitätsverlust der Basisvektoren statt, die Ergebnisse des Arnoldi-modifizierten Gram-Schmidt unterschieden sich jedoch nicht signifikant von denjenigen des Householder-Arnoldi. Noch geringer war der Unterschied der beiden Algorithmen bei der Burgers-Gleichung (siehe Kapitel 4.3). Hier waren weder die Ergebnisse deutlich schlechter, noch fand signifikanter Orthogonalitätsverlust der Basisvektoren statt. Diese Tatsache deutet darauf hin, dass der Arnoldi-modifizierte Gram-Schmidt bei der Anwendung auf partielle Differentialgleichungen deutlich besser funktioniert als bei anderen Matrizen, die beispielsweise vollbesetzt sind. Vermutlich wird aus diesem Grund in der Praxis fast nur der Arnoldi-modifizierte Gram-Schmidt (oft mit Reorthogonalisierung) verwendet, wohingegen der Householder-Arnoldi weitgehend unbekannt ist. Trotzdem wurde hier im Folgenden nur mit dem Householder-Arnoldi gearbeitet.

3.3 Berechnung der Eigenwerte

Die Eigenwerte der vom Arnoldi-Verfahren gelieferten oberen Hessenberg-Matrix \mathbf{H}_k werden mit dem QR-Verfahren berechnet. Hierbei wird eine spezielle Variante des QR-Algorithmus für obere Hessenberg-Matrizen benutzt, welche nur $\mathcal{O}(k^2)$ anstatt $\mathcal{O}(k^3)$ arithmetische Operationen pro Schritt benötigt, da sich der Algorithmus aufgrund der Hessenberg-Form stark vereinfacht. Man kann außerdem zeigen, dass hierdurch die obere Hessenberg-Form erhalten bleibt.

Wir wollen im Folgenden die verwendete Version des QR-Algorithmus kurz skizzieren; für

genauere Informationen sei auf [PFTV86] verwiesen. Die grundlegende Idee ist folgende: Der QR-Algorithmus besteht aus einer Folge von orthogonalen Transformationen gemäß

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^{(s)} &= \mathbf{Q}^{(s)} \mathbf{R}^{(s)}, \\ \mathbf{A}^{(s+1)} &= \mathbf{R}^{(s)} \mathbf{Q}^{(s)} \quad (= \mathbf{Q}^{(s)T} \mathbf{A}^{(s)} \mathbf{Q}^{(s)}),\end{aligned}$$

wobei $\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{A}$. Die QR-Zerlegung findet hierbei mit Hilfe des Householder-Verfahrens statt. Man kann zeigen, dass im Fall von

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$$

die Matrizen $\mathbf{A}^{(s)}$ gegen eine obere Dreiecksmatrix mit $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ als Diagonalelementen konvergieren, siehe zum Beispiel [SB05]. (Falls die Eigenwerte nicht betragsmäßig separiert sind, kann die Matrix in geeignete Submatrizen aufgespaltet werden, deren Eigenwerte separat berechnet werden; beispielsweise spaltet man im Falle komplexer Eigenwerte geeignete (2×2) -Matrizen ab). Die Subdiagonalelemente konvergieren gegen null gemäß

$$a_{i,i-1}^{(s)} \sim \left(\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}} \right| \right)^s < 1.$$

Um die Konvergenzgeschwindigkeit im Fall $\lambda_i \approx \lambda_{i-1}$ zu beschleunigen, werden geeignete *Shifts* k_s gewählt: Die Matrix $\mathbf{A} - k_s \mathbf{I}$ hat die Eigenwerte $\lambda_i - k_s$. Die Zerlegung

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^{(s)} - k_s \mathbf{I} &= \mathbf{Q}^{(s)} \mathbf{R}^{(s)}, \\ \mathbf{A}^{(s+1)} &= \mathbf{R}^{(s)} \mathbf{Q}^{(s)} + k_s \mathbf{I} = \mathbf{Q}^{(s)T} \mathbf{A}^{(s)} \mathbf{Q}^{(s)}\end{aligned}\tag{3.3}$$

hat die Konvergenzgeschwindigkeit

$$\left| \frac{\lambda_i - k_s}{\lambda_{i-1} - k_s} \right|.$$

Eine geeignete Shiftstrategie zur Optimierung dieser Konvergenzrate wäre zu Beginn der Iteration zum Beispiel die Wahl

$$k_s \approx \lambda_n\tag{3.4}$$

(wobei der a priori unbekannteste kleinste Eigenwert λ_n durch geeignete Methoden geschätzt wird). Hierbei ergibt sich das Problem, dass bei komplexen Eigenwerten die Wahl

komplexer Shifts sinnvoll wäre. Komplexe Arithmetik kann jedoch durch einen Trick vermieden werden: Man führt zwei Schritte des QR-Algorithmus (3.3) durch, wobei man entweder zwei reelle oder zueinander konjugiert komplexe Shifts verwendet. Für den doppelten QR-Schritt verwendet man beide Shifts k_s und k_{s+1} gleichzeitig für den Aufbau der Householder-Matrizen. Die Shifts werden hierbei wegen (3.4) gewählt als Eigenwerte der (2×2) -Matrix in der rechten unteren Ecke von $\mathbf{A}^{(s)}$. Der Trick besteht darin, dass die Shifts nur in der gekoppelten Form

$$\begin{aligned} k_s + k_{s+1} &= a_{n-1,n-1}^{(s)} + a_{nn}^{(s)}, \\ k_s k_{s+1} &= a_{n-1,n-1}^{(s)} a_{nn}^{(s)} - a_{n-1,n}^{(s)} a_{n,n-1}^{(s)} \end{aligned}$$

als Spur und Determinante der (2×2) -Matrix verwendet werden. Durch den doppelten QR-Schritt lässt sich komplexe Arithmetik somit vermeiden.

Der Abbruch des Verfahrens ist folgender: Man sucht den größten Index i , für den das Subdiagonalelement $a_{i,i-1}$ vernachlässigbar ist. Im Fall $i = n$ ist a_{nn} ein approximativer Eigenwert; man streicht die n -te Zeile und Spalte und fährt mit der verkleinerten Matrix fort. Im Fall $i = n - 1$ sind die Eigenwerte der (2×2) -Matrix in der rechten unteren Ecke von $\mathbf{A}^{(s)}$ approximative Eigenwerte, hier treten möglicherweise komplexe Eigenwerte auf. Man streicht analog die letzten beiden Zeilen und Spalten. Im Fall $i \leq n - 2$ zerfällt die Matrix in zwei Submatrizen, deren Eigenwerte man getrennt berechnet.

Nach dieser Suche nach einem kleinen Subdiagonalelement wird das *Produkt* aufeinanderfolgender Subdiagonalelemente untersucht, um möglicherweise die Matrix weiter reduzieren zu können.

Es kommt nur ganz selten vor, dass die Matrix auf diese Weise nicht verkleinert werden kann. Nach einer bestimmten Anzahl erfolgloser Iterationen wird eine alternative Shiftstrategie gewählt. Führen auch verschiedene Shiftstrategien nicht zu einer Verbesserung, gibt das Programm schließlich eine Fehlermeldung aus.

Auf eine detailliertere Beschreibung soll hier verzichtet werden; für Einzelheiten siehe [PFTV86], Seite 369-376.

Der Algorithmus liefert Real- und Imaginärteil der Eigenwerte in getrennten Vektoren abgespeichert.

Die erhaltenen Eigenwerte von \mathbf{H}_k werden als Approximationen an die Eigenwerte von \mathbf{A} verwendet. Nach [Din03] werden durch das Arnoldi-Verfahren insbesondere die betragsgrößten Eigenwerte von \mathbf{A} gut approximiert. (Da wir wie in Kapitel 2.3 erwähnt

das inverse Eigenwertproblem lösen, erhalten wir vor allem gute Approximationen an die kleinsten Eigenwerte, was für die Anwendung in der hydrodynamischen Stabilität auch sinnvoll ist.)

3.4 Berechnung der Eigenvektoren

Zur Berechnung der Eigenvektoren geht man folgendermaßen vor: Zunächst berechnet man den Eigenvektor $u_{\mathbf{H}} := u_{h,k,\lambda_h}$ zum Eigenwert λ_h der oberen Hessenberg-Matrix \mathbf{H}_k , welche der Arnoldi-Algorithmus gemäß (3.1) liefert. Hierfür ist das lineare Gleichungssystem unter Nebenbedingungen

$$(\mathbf{H}_k - \lambda_h \mathbf{I}_k) u_{\mathbf{H}} = 0 \quad \text{s.t. } u_{\mathbf{H}} \neq 0$$

mittels QR-Zerlegung zu lösen. Da die Matrix $\mathbf{H}_k - \lambda_h \mathbf{I}_k$ (bis auf Rundungsfehler) singulär ist, wird eine spezielle Variante der QR-Zerlegung für singuläre Matrizen verwendet, der sogenannte *QR-Algorithmus mit Spalten-Pivoting* oder *Rank-Revealing QR (RRQR)*, welcher zusätzlich die geometrische Vielfachheit von λ_h liefert. Eine singuläre Matrix $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ hat eine QR-Zerlegung der Form

$$\mathbf{M}\mathbf{P} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

mit einer Permutationsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Mit Rundungsfehlern erhält man

$$\mathbf{M}\mathbf{P} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ 0 & \mathbf{R}_{22} \end{pmatrix},$$

mit $\mathbf{R}_{22} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ für ein $m \leq n$. Falls $\|\mathbf{R}_{22}\|_2 = \mathcal{O}(\varepsilon)$, wobei mit ε die Maschinengenauigkeit bezeichnet sei, so hat \mathbf{M} mindestens r kleine Singulärwerte $\sigma_i = \mathcal{O}(\varepsilon)$ und hat also höchstens Rang $n - m$. Die Umkehrung stimmt jedoch leider nicht, eine Matrix mit r kleinen Singulärwerten kann eine QR-Zerlegung mit großem $\|\mathbf{R}_{22}\|_2$ haben (siehe zum Beispiel [Cha87] oder [Dem97], Seite 131).

Um dieses Problem zu beseitigen, tauscht man vor der Multiplikation mit der i -ten Householdermatrix im QR-Algorithmus die Restspalte mit größter euklidischer Norm an die i -te Position; die Vertauschungen entsprechen der Multiplikation mit einer Permutati-

onsmatrix \mathbf{P} , welche man explizit berechnet. Sobald $\|\mathbf{R}_{22}\|_2$ eine Toleranzgrenze erreicht hat, werden die übrigen Einträge null gesetzt und das Verfahren abgebrochen. Dies liefert außerdem den numerischen Rang von \mathbf{M} , man setzt $rk(\mathbf{M}) = n - m$ (vergleiche [HP92]). Der Quellcode des Algorithmus stammt aus [Lub04]. Um die Verlässlichkeit dieser Quelle zu überprüfen, kann man auch die orthogonale Matrix \mathbf{Q} berechnen, was im Allgemeinen unnötig ist, und überprüfen, ob tatsächlich $\mathbf{MP} = \mathbf{QR}$ gilt. Der komplette Algorithmus ist im Anhang A zu finden.

Schließlich wird das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} x = 0 \quad (3.5)$$

durch Rückwärtseinsetzen gelöst, wobei für die n -te Komponente von x ein fester Wert ungleich null vorgegeben wird. Der Eigenvektor $u_{\mathbf{H}}$ von \mathbf{H}_k ist dann genau $u_{\mathbf{H}} = \mathbf{P}x$ und man erhält den zugehörigen approximativen Eigenvektor $u_{\mathbf{A}}$ der Ausgangsmatrix \mathbf{A} gemäß

$$u_{\mathbf{A}} = \mathbf{V}_k u_{\mathbf{H}}$$

mit der vom Arnoldi-Algorithmus gelieferten Matrix \mathbf{V}_k aus (3.2). Falls die Matrix aus Gleichung (3.5) mehrere Nullzeilen hat, so erhält man mehrere linear unabhängige Lösungen des Systems (3.5) und dadurch mehrere Eigenvektoren der Ausgangsmatrix \mathbf{A} .

3.4.1 Der komplexe Fall

Für reelle Matrizen \mathbf{A} mit einem komplexen Eigenwert $\lambda_h \in \mathbb{C}$ ist komplexe Arithmetik nötig. Um diese zu vermeiden, benutzen wir die Identifikation $\mathbb{C} = \mathbb{R}^2$. Man speichert dann Real- und Imaginärteil der auftretenden Matrizen und Vektoren jeweils getrennt ab, erhält beispielsweise eine Aufspaltung der Matrix \mathbf{R} in $\mathbf{R} = \mathbf{R}^{re} + i \cdot \mathbf{R}^{im}$, analog für \mathbf{Q} und \mathbf{M} . Die Kopplung entsteht durch die übliche Multiplikation und Division im Komplexen.

3.4.2 Ein alternativer Test auf Entartung

In unserem Fall erhält man aus dem numerischen Rang der Matrix $\mathbf{M} = (\mathbf{H}_k - \lambda_h \mathbf{I}_k)$ insbesondere die geometrische Vielfachheit des Eigenwertes λ_h : Es ist

$$m_g(\lambda_h) = \dim(\ker(\mathbf{H}_k - \lambda_h \mathbf{I}_k)) = n - rk(\mathbf{M}) = m.$$

Hieraus ergibt sich speziell für Krylow-Unterraum-Methoden ein alternatives Kriterium für Entartung, neben dem in Kapitel 2.4.1 beschriebenen. Die algebraische Vielfachheit erhält man, wenn man zwei nahe beieinander liegende Eigenwerte als Approximation desselben betrachtet, wie in Kapitel 2.4.1 erläutert. Danach kann man direkt $m_a(\lambda_h)$ mit $m_g(\lambda_h)$ vergleichen; falls $m_a(\lambda_h) > m_g(\lambda_h)$, so handelt es sich um einen entarteten Eigenwert. Voraussetzung für diesen Test ist natürlich, dass man die algebraische Vielfachheit bestimmen kann; es müssen also beispielsweise zwei Eigenwerte sehr nah beieinander liegen und vom übrigen Spektrum gut separiert sein, um als derselbe Eigenwert betrachtet zu werden. Außerdem muss das Eigenwertproblem auch im *Diskreten* entartet sein; wie in Kapitel 2.4.1 erwähnt, ist das oft nicht der Fall, das im Kontinuierlichen entartete Problem ist im Diskreten nicht mehr entartet. Aus diesen Gründen ist das Betrachten der Eigenfunktionen als Kriterium für Entartung (wie in Kapitel 2.4.1 beschrieben) unproblematischer.

3.5 Anwendung auf partielle Differentialgleichungen

Wir wollen das verallgemeinerte Eigenwertproblem (2.10) numerisch lösen, welches wir in Kapitel 2 durch Diskretisierung hergeleitet haben:

$$\text{Finde } \lambda_h \in \mathbb{C}, 0 \neq \mathbf{u} \in \mathbb{C}^n \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}_h \mathbf{u} = \lambda_h \mathbf{M}_h \mathbf{u}, \quad (3.6)$$

mit der Steifigkeitsmatrix \mathbf{A}_h und der Massematrix \mathbf{M}_h . Die Diskretisierung fand hierbei mit Q_1 -Elementen statt. Die Idee ist nun, dieses Problem so umzuformulieren, dass es auf ein lineares Gleichungssystem zurückgeführt wird. Dieses wird dann mit Mehrgittermethoden gelöst. Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist, dass bereits gut entwickelte Mehrgitterlöser vorhanden sind und direkt auf das Eigenwertproblem angewandt werden können.

Wir formulieren Problem (3.6) in das zugehörige inverse Problem um, wobei wir die inversen Eigenwerte mit $\mu_h := \lambda_h^{-1}$ bezeichnen:

$$\text{Finde } \mu_h \in \mathbb{C}, 0 \neq \mathbf{u} \in \mathbb{C}^n \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}_h^{-1} \mathbf{M}_h \mathbf{u} = \frac{1}{\lambda_h} \mathbf{u} =: \mu_h \mathbf{u}. \quad (3.7)$$

Auf die Matrix $\mathbf{A} := \mathbf{A}_h^{-1} \mathbf{M}_h$ wird nun der Arnoldi-Algorithmus angewandt. Aufgrund des geringeren Orthogonalitätsverlusts wurde der Householder-Arnoldi (3.3) anstelle des üblichen Arnoldi-Algorithmus implementiert. Für den normierten Startvektor z_1 wurden Zufallszahlen verwendet. Es wurde ausschließlich reelle Arithmetik verwendet.

Die Mehrgitterlöser wurden nun folgendermaßen eingesetzt: In Zeile 9 des Householder-Arnoldi-Algorithmus 3.3 wird (vor der Multiplikation mit den Householder-Matrizen) formal $\tilde{z}_{j+1} := \mathbf{A}_h^{-1} \mathbf{M}_h v_j$ berechnet. Statt dessen wird in der Praxis in jedem Iterationsschritt das äquivalente Gleichungssystem

$$\mathbf{A}_h \tilde{z}_{j+1} = \mathbf{M}_h v_j$$

mit Mehrgitterverfahren gelöst. Hierfür wurde die C++-basierte Finite-Elemente-Bibliothek GASCOIGNE verwendet (für Details siehe [gas]).

Die Eigenwerte der Matrix \mathbf{H}_k aus dem Arnoldi-Algorithmus erhält man, wie bereits beschrieben, durch das QR-Verfahren. Dieses ist nicht direkt für verallgemeinerte Eigenwertprobleme geeignet, kann in unserem Fall aufgrund der Umformulierung (3.7) jedoch angewendet werden.

Schließlich werden die approximativen inversen Eigenwerte μ_h wieder komplex zurückinvertiert:

$$\lambda_h = \frac{1}{\mu_h} = \frac{\operatorname{Re}(\mu_h)}{\operatorname{Re}(\mu_h)^2 + \operatorname{Im}(\mu_h)^2} + i \cdot \frac{-\operatorname{Im}(\mu_h)}{\operatorname{Re}(\mu_h)^2 + \operatorname{Im}(\mu_h)^2}.$$

3.6 A priori Fehlerabschätzung

Wir wollen nun eine *a priori* Fehlerabschätzung für den Eigenwertfehler angeben.

Satz 3.1. *Sei $V = H^1(\Omega)$ oder $V = H_0^1(\Omega)$ und $V_h \subset V$ der Raum der bilinearen Finiten Elemente. Weiter sei L der elliptische Operator mit den in Kapitel 2.2.1 beschriebenen Eigenschaften und λ ein Eigenwert von L mit algebraischer Vielfachheit $m = m_a(\lambda)$ und Defekt α . Dann existieren für hinreichend kleines h genau m approximierende Eigenwerte*

$\{\lambda_h^{(i)}\}_{i=1,\dots,m}$ (ihrer algebraischen Vielfachheit entsprechend gezählt), so dass

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \lambda_h^{(i)} - \lambda \right| &= \mathcal{O}(h^2), \\ |\lambda_h^{(i)} - \lambda| &= \mathcal{O}(h^{2/(\alpha+1)}) \quad (i = 1, \dots, m). \end{aligned}$$

Beweis. Siehe [BO73]. □

Bei nicht-entarteten Eigenwerten erhält man somit die *optimale* Konvergenzordnung, die unter Verwendung von Q_1 -Elementen erreicht werden kann. Im Fall entarteter Eigenwerte beobachtet man eine reduzierte Konvergenzordnung; dieser Effekt läßt sich vermeiden, indem man das arithmetische Mittel der approximierenden Eigenwerte anstelle einer einzelnen Approximation betrachtet. Bei dieser Vorgehensweise erhält man wieder die volle Konvergenzordnung.

3.7 A posteriori Fehlerabschätzung

Für die Praxis deutlich wichtiger als die *a priori* Fehlerabschätzung ist die *a posteriori* Fehlerschätzung, die wir im Folgenden herleiten werden. Hierfür verwenden wir Fehlerschätzer mit Hilfe dual gewichteter *Residuen*. Die primalen und dualen *Residuen* $\rho(\cdot, \cdot)$ und $\rho^*(\cdot, \cdot)$ sind mit den Lösungen $U_h := (u_h, \lambda_h)$ und $U_h^* := (u_h^*, \lambda_h^*) \in V_h \times \mathbb{C}$ des diskreten Eigenwertproblems (2.8), (2.9) definiert als

$$\begin{aligned} \rho(U_h; \cdot) &:= a(u_h, \cdot) - \lambda_h(u_h, \cdot), \\ \rho^*(U_h^*; \cdot) &:= a(\cdot, u_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(\cdot, u_h^*). \end{aligned} \tag{3.8}$$

Es sei daran erinnert, dass $\lambda = \bar{\lambda}^*$ und analog $\lambda_h = \bar{\lambda}_h^*$ gilt, siehe (2.7).

3.7.1 Herleitung des a posteriori Fehlerschätzers

Wir leiten nun die folgende allgemeine *a posteriori* Abschätzung für den Eigenwertfehler her (vergleiche [HR01], Seite 11):

Satz 3.2. Seien $\{u_h, \lambda_h\}$ und $\{u_h^*, \lambda_h^*\}$ Lösungen des diskreten Eigenwertproblems (2.8), (2.9) sowie $\{u, \lambda\}$ und $\{u^*, \lambda^*\}$ zugehörige exakte Lösungen von (2.5), (2.6). Dann gilt:

$$\begin{aligned} (\lambda - \lambda_h) \left(\frac{1}{2}(u, u^*) + \frac{1}{2}(u_h, u_h^*) - \sigma \right) &= \frac{1}{2} \left\{ a(u_h, u^* - \psi_h) - \lambda_h(u_h, u^* - \psi_h) \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ a(u - \varphi_h, u_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(u - \varphi_h, u_h^*) \right\}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

wobei $\sigma = \frac{1}{2}(u - u_h, u^* - u_h^*)$ und $\varphi_h, \psi_h \in V_h$ beliebig.

Beweis. Aufgrund der Galerkin-Orthogonalität gilt für alle $\psi_h \in V_h$

$$\begin{aligned} a(u_h, u^* - \psi_h) - \lambda_h(u_h, u^* - \psi_h) &= a(u_h, u^*) - \lambda_h(u_h, u^*) \\ &= \bar{\lambda}^*(u_h, u^*) - \lambda_h(u_h, u^*), \end{aligned}$$

und analog für alle $\varphi_h \in V_h$

$$\begin{aligned} a(u - \varphi_h, u_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(u - \varphi_h, u_h^*) &= a(u, u_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(u, u_h^*) \\ &= \lambda(u, u_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(u, u_h^*). \end{aligned}$$

Unter Ausnutzung von $\bar{\lambda}^* = \lambda$ und $\bar{\lambda}_h^* = \lambda_h$ kann man somit die rechte Seite von (3.9) umformen zu

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \left\{ a(u_h, u^* - \psi_h) - \lambda_h(u_h, u^* - \psi_h) \right\} + \frac{1}{2} \left\{ a(u - \varphi_h, u_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(u - \varphi_h, u_h^*) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \lambda(u_h, u^*) - \lambda_h(u_h, u^*) \right\} + \frac{1}{2} \left\{ \lambda(u, u_h^*) - \lambda_h(u, u_h^*) \right\} \\ &= (\lambda - \lambda_h) \left(\frac{1}{2}(u_h, u^*) + \frac{1}{2}(u, u_h^*) \right) \\ &= (\lambda - \lambda_h) \left(\frac{1}{2}(u_h, u^* - u_h^*) + \frac{1}{2}(u_h, u_h^*) - \frac{1}{2}(u, u^* - u_h^*) + \frac{1}{2}(u, u^*) \right) \\ &= (\lambda - \lambda_h) \left(\frac{1}{2}(u, u^*) + \frac{1}{2}(u_h, u_h^*) - \sigma \right), \end{aligned} \quad (3.10)$$

und man erhält (3.9). □

Bemerkung 3.1. Speziell im nicht-entarteten Fall gilt bei Normierung zu $\|u\| = (u, u^*) = 1$

und $\|u_h\| = (u_h, u_h^*) = 1$:

$$\begin{aligned} (\lambda - \lambda_h)(1 - \sigma) &= \frac{1}{2} \left\{ a(u_h, u^* - \psi_h) - \lambda_h(u_h, u^* - \psi_h) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \left\{ a(u - \varphi_h, u_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(u - \varphi_h, u_h^*) \right\}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

mit beliebigen $\varphi_h, \psi_h \in V_h$. Im symmetrischen Fall vereinfacht sich die Identität wegen $\{u_h, \lambda_h\} = \{u_h^*, \lambda_h^*\}$ bei Normierung $\|u\| = \|u_h\| = 1$ zu

$$(\lambda - \lambda_h)(1 - \sigma) = a(u_h, u - \varphi_h) - \lambda_h(u_h, u - \varphi_h) \quad (3.12)$$

für $\varphi_h \in V_h$.

3.7.2 Ein Abbruchkriterium

Aus dem vorangegangenen Abschnitt lässt sich ein Abbruchkriterium für die Eigenwert-Approximation herleiten. Sei $\tilde{U}_h := \{\tilde{u}_h, \tilde{\lambda}_h\} \in V_h \times \mathbb{C}$ eine Approximation an ein diskretes Lösungspaar $U_h = \{u_h, \lambda_h\}$, analog sei $\tilde{U}_h^* := \{\tilde{u}_h^*, \tilde{\lambda}_h^*\}$ eine Approximation an $U_h^* = \{u_h^*, \lambda_h^*\}$. Wir wollen nun wieder den Fehler $\lambda - \tilde{\lambda}_h$ abschätzen. Hierfür sind nur einige wenige Modifikationen nötig.

Korollar 3.3. *Seien $\{\tilde{u}_h, \tilde{\lambda}_h\}$ und $\{\tilde{u}_h^*, \tilde{\lambda}_h^*\} \in V_h \times \mathbb{C}$ Approximationen an eine diskrete Lösung des Eigenwertproblems (2.8), (2.9) und $\{u, \lambda\}, \{u^*, \lambda^*\}$ exakte Lösungen von (2.5), (2.6). Dann gilt:*

$$\begin{aligned} (\lambda - \tilde{\lambda}_h) \left(\frac{1}{2}(u, u^*) + \frac{1}{2}(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) - \tilde{\sigma} \right) &= \frac{1}{2} \left\{ a(\tilde{u}_h, u^* - \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, u^* - \tilde{u}_h^*) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \left\{ a(u - \tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(u - \tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) \right\} \\ &\quad + a(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*), \end{aligned} \quad (3.13)$$

mit $\tilde{\sigma} = \frac{1}{2}(u - \tilde{u}_h, u^* - \tilde{u}_h^*)$.

Beweis. Wegen $a(\tilde{u}_h, u^*) = \bar{\lambda}^*(\tilde{u}_h, u^*) = \lambda(\tilde{u}_h, u^*)$ erhält man

$$a(\tilde{u}_h, u^* - \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, u^* - \tilde{u}_h^*) = (\lambda - \tilde{\lambda}_h)(\tilde{u}_h, u^*) - a(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) + \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*)$$

und analog

$$a(u - \tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(u - \tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) = (\lambda - \tilde{\lambda}_h)(u, \tilde{u}_h^*) - a(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) + \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*).$$

Umformungen analog zu (3.10) liefern die Behauptung. \square

Bemerkung 3.2. Man beachte, dass im Allgemeinen $\bar{\lambda}_h^* \neq \tilde{\lambda}_h$ gilt. In der zweiten Zeile der Identität (3.13) steht also gerade *nicht* das duale Residuum $\rho^*(\tilde{U}_h^*, u - \tilde{u}_h) = a(u - \tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(u - \tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*)$, im Unterschied zur Identität (3.9). Will man den dualen Eigenwertfehler schätzen, so leitet man analog eine Gleichung für den dualen Eigenwertfehler her; diese hat die Form (3.13), wobei überall $\tilde{\lambda}_h$ durch $\bar{\lambda}_h^*$ ersetzt ist. Alternativ kann man natürlich auch $\bar{\lambda}_h^* := \tilde{\lambda}_h$ setzen; in diesem Fall erhält man eine Identität analog zu (3.9) mit dem primalen und dualen Residuum, die dann nur nicht mehr für beliebige Approximationen $\{\tilde{u}_h^*, \tilde{\lambda}_h^*\}$ an das diskrete duale Lösungspaar gilt.

Bemerkung 3.3. Die Identität (3.13) gilt für beliebig schlechte Approximationen $\{\tilde{u}_h, \tilde{\lambda}_h\}$, $\{\tilde{u}_h^*, \tilde{\lambda}_h^*\} \in V_h \times \mathbb{C}$. Hierbei ist allerdings zu beachten, dass nach sehr wenigen Arnoldi-Iterationsschritten die Approximationen \tilde{u}_h und \tilde{u}_h^* eventuell noch nicht in V_h liegen, da die berechnete Hessenberg-Matrix und damit auch die Transformationsmatrix noch zu schlecht sind. Aus diesem Grund müssen die Randbedingungen gegebenenfalls noch einmal zusätzlich überprüft werden.

Wir erhalten in der Darstellung (3.13) des Eigenwertfehlers $\lambda - \tilde{\lambda}_h$ im Vergleich zu (3.9) also im Wesentlichen einen additiven Zusatzterm

$$\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h^*) = a(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*). \quad (3.14)$$

Die Frage ist nun: Kann man diesen Zusatzterm als Indikator dafür verwenden, ob die Approximation \tilde{U}_h nahe an der diskreten Lösung U_h liegt und damit durch weitere Iterationsschritte nicht mehr verbessert werden kann? Als Abbruchkriterium würde sich dann zum Beispiel der Test anbieten, ob

$$\begin{aligned} |\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h^*)| &\ll \left| \frac{1}{2} \left\{ a(\tilde{u}_h, u^* - \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, u^* - \tilde{u}_h^*) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left\{ a(u - \tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(u - \tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) \right\} \right|; \end{aligned} \quad (3.15)$$

ist dies erfüllt, so könnte man \tilde{U}_h als hinreichend gute Näherung betrachten. Da der Zusatzterm $\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h^*)$ null ist, sobald $\tilde{U}_h = U_h$ und $\tilde{u}_h^* = u_h^*$ gilt, ist dieses Abbruchkriterium

auf jeden Fall ab einer bestimmten Anzahl an Iterationen erfüllt.

Hierbei ergibt sich folgende Problematik: Dem Abbruchkriterium (3.15) liegt die Annahme zugrunde, dass der Restterm $\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h^*)$ überwiegend den Iterationsfehler anzeigt, wohingegen die übrigen Terme den Diskretisierungsfehler wiedergeben. Tatsächlich ist der Iterationsfehler jedoch gegeben durch

$$\begin{aligned}
 (\lambda_h - \tilde{\lambda}_h) \left(\frac{1}{2}(u_h, u_h^*) + \frac{1}{2}(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h^*) - \hat{\sigma} \right) &= \frac{1}{2} \left\{ a(\tilde{u}_h, u_h^*) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, u_h^*) \right\} \\
 &+ \frac{1}{2} \left\{ a(u_h, \tilde{u}_h^*) - \tilde{\lambda}_h(u_h, \tilde{u}_h^*) \right\},
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

mit $\hat{\sigma} = \frac{1}{2}(u_h - \tilde{u}_h, u_h^* - \tilde{u}_h^*)$, wie man analog zu obigen Rechnungen herleitet. Im symmetrischen Fall und bei Normierung $\|u\| = \|u_h\| = (u, u^*) = (u_h, u_h^*) = 1$ ist der Iterationsfehler also bei Vernachlässigung des Restterms $\hat{\sigma}$ gegeben durch $\rho(\tilde{U}_h, u_h)$. Bei Anwendung des Abbruchkriteriums (3.15) wird $\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h)$ anstelle von $\rho(\tilde{U}_h, u_h)$ verwendet, um den Iterationsfehler zu schätzen, da die diskrete Lösung u_h in der Praxis normalerweise nicht bekannt ist. Ob diese Vorgehensweise Sinn macht, werden wir in Kapitel 4.1.3 überprüfen.

4 Numerische Tests

In diesem Kapitel werden die theoretischen Resultate aus den vorherigen Kapiteln praktisch überprüft. Zunächst wird in Kapitel 4.1 mit der Konvektions-Diffusions-Gleichung ein skalares Problem betrachtet. Dann untersuchen wir in Kapitel 4.2 den Systemfall, sowie schließlich in Kapitel 4.3 ein entartetes Eigenwertproblem.

4.1 Die Konvektions-Diffusions-Gleichung

Als ersten Testfall betrachten wir die Konvektions-Diffusions-Gleichung mit konstantem Transport auf dem Einheitsquadrat $\Omega = (0, 1)^2$,

$$-\nu \Delta u + \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \cdot \nabla u = \lambda u \quad \text{in } \Omega, \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad (4.1)$$

mit reellen Koeffizienten $\nu \neq 0$, c_1 und c_2 .

Die Eigenwerte von (4.1) lassen sich exakt angeben (siehe [HB00]):

$$\frac{c_1^2 + c_2^2}{4\nu} + \nu\pi^2 (\gamma_1^2 + \gamma_2^2), \quad \gamma_1, \gamma_2 \in \mathbb{N}. \quad (4.2)$$

Die Eigenfunktionen sind (bis auf Normierung) gegeben durch

$$e^{\frac{c_1 x_1 + c_2 x_2}{2\nu}} \sin(\gamma_1 \pi x_1) \sin(\gamma_2 \pi x_2), \quad \gamma_1, \gamma_2 \in \mathbb{N}, \quad (4.3)$$

die Eigenfunktionen des adjungierten Problems durch

$$e^{-\frac{c_1 x_1 + c_2 x_2}{2\nu}} \sin(\gamma_1 \pi x_1) \sin(\gamma_2 \pi x_2), \quad \gamma_1, \gamma_2 \in \mathbb{N}. \quad (4.4)$$

Insbesondere ist das Eigenwertproblem bei nichttrivialer Konvektion nicht normal, sonst wären primale und duale Eigenfunktionen identisch (siehe zum Beispiel [Bos08], Seite

267).

Wir testen zunächst, wie sehr das Gitter bei der Eigenwertberechnung global verfeinert werden kann. Das Ergebnis ist in Tabelle 4.1 dargestellt. Hier und im Folgenden bezeichnen h die Gitterweite und N die Anzahl der Knoten. Berechnet wurde hier der kleinste Eigenwert des Laplace-Operators mit jeweils 100 Arnoldi-Iterationen; auf dem feinsten Gitter wurden aufgrund der geringeren Kosten nur 40 Iterationsschritte durchgeführt, was jedoch für den kleinsten Eigenwert mehr als ausreichend ist, wie man in Kapitel 4.1.3 noch genauer sehen wird. Man sieht, dass die globale Verfeinerung bis zu mehr als 16000 Knoten möglich ist, allerdings ist hier auch der Speicherbedarf bei 40 Gigabyte und die Laufzeit bei ungefähr zweieinhalb Tagen. Mit dem Arnoldi-modifizierten Gram-Schmidt sowie bei geringerer Anzahl an Iterationen wären die Kosten deutlich geringer, wie in Kapitel 3.2.1 beschrieben.

Tabelle 4.1: Maximale Gitterverfeinerung:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda = 2\pi^2 = 19.739209\dots$ des Laplace-Operators unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je k Arnoldi-Iterationsschritten, Speicherbedarf in Megabyte (MB) und Gigabyte (GB)

h	N	k	λ_h	$ \lambda - \lambda_h $	Laufzeit	Speicher
2^{-4}	289	100	19.802707	$6.35 \cdot 10^{-2}$	3 s	6 MB
2^{-5}	1089	100	19.755068	$1.59 \cdot 10^{-2}$	9 s	10 MB
2^{-6}	4225	100	19.743173	$3.96 \cdot 10^{-3}$	36 s	23 MB
2^{-7}	16641	100	19.740200	$9.91 \cdot 10^{-4}$	2 min 35 s	77 MB
2^{-8}	66049	100	19.739457	$2.48 \cdot 10^{-4}$	13 min 41 s	292 MB
2^{-9}	263169	100	19.739271	$6.19 \cdot 10^{-5}$	1 h 27 min 36 s	1.1 GB
2^{-10}	1050625	100	19.739224	$1.55 \cdot 10^{-5}$	7 h 40 min 51 s	4.4 GB
2^{-11}	4198401	100	19.739213	$3.87 \cdot 10^{-6}$	35 h 19 min 53 s	17 GB
2^{-12}	16785409	40	19.739209	$9.69 \cdot 10^{-7}$	63 h 38 min 50 s	40 GB
Ordnung				$\mathcal{O}(h^2)$		

Betrachten wir nun den unsymmetrischen Fall, in dem der Transport nicht verschwindet. Tabelle 4.2 zeigt den berechneten Eigenwert λ_h , der den kleinsten Eigenwert λ des Konvektions-Diffusions-Operators approximiert. Gerechnet wurde mit verschiedenen Parametern auf einem gleichmäßig verfeinerten Gitter. Die Diskretisierung fand standardmäßig mit bilinearen Finiten Elementen statt. Es wurden jeweils 100 Iterationen des Arnoldi-Algorithmus durchgeführt.

Bemerkung 4.1. Wir werden in Kapitel 4.1.3 sehen, dass im Allgemeinen insbesondere für

Tabelle 4.2: Konvergenz der Eigenwerte:

Konvergenz bei der Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda = 20.23921\dots$ des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = c_1 = c_2 = 1$ bzw. $\hat{\lambda} = 4.473676\dots$ mit $\nu = 0.1, c_1 = 7/\sqrt{58}$ und $c_2 = 3/\sqrt{58}$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten

h	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \hat{\lambda} - \hat{\lambda}_h $
2^{-4}	289	$5.39 \cdot 10^{-2}$	$2.65 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	1089	$1.34 \cdot 10^{-2}$	$6.69 \cdot 10^{-3}$
2^{-6}	4225	$3.36 \cdot 10^{-3}$	$1.67 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	16641	$8.40 \cdot 10^{-4}$	$4.19 \cdot 10^{-4}$
Ordnung		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$

die Berechnung des kleinsten Eigenwerts auch deutlich weniger als 100 Iterationsschritte völlig ausreichen. Beispielsweise erhält man bei den getesteten Eigenwertproblemen mit 20 Iterationen meistens ein vergleichbar gutes Ergebnis. Um ganz sicher zu gehen, dass die Approximation durch zusätzliche Iterationen nicht verbessert werden kann, wurden in Folgenden trotzdem meistens 100 Arnoldi-Iterationen verwendet.

In Satz 3.1 wurde ausgesagt, dass die approximativen Eigenwerte mit der Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h^2)$ gegen den exakten Eigenwert konvergieren sollten. Dass dies in unserem Fall zutrifft, sieht man wiederum an Tabelle 4.2. Der Fehler ist tatsächlich jeweils von der Ordnung $\mathcal{O}(h^2)$.

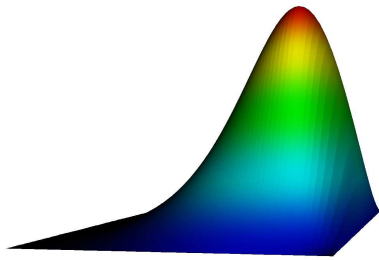
Als nächstes betrachten wir die zugehörigen (reellen) Eigenfunktionen. Tabelle 4.3 zeigt die Konvergenz der ersten Eigenfunktion des Konvektions-Diffusions-Operators mit den Parametern $\nu = 0.1, c_1 = 7/\sqrt{58}$ und $c_2 = 3/\sqrt{58}$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Arnoldi-Iterationsschritten. Auch die adjungierte Eigenfunktion u^* wird mit der Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h^2)$ approximiert. Höhere Eigenfunktionen werden ebenfalls gut berechnet, exemplarisch sieht man in Tabelle 4.3 die Konvergenz der vierten primalen und dualen Eigenfunktion.

In Abbildung 4.1 sieht man die erste, vierte, elfte und 20. rechts- und linksseitige Eigenfunktion zu diesen Parametern. Man kann anhand der Graphiken erkennen, dass es sich um die Eigenfunktionen (4.3) und (4.4) handelt.

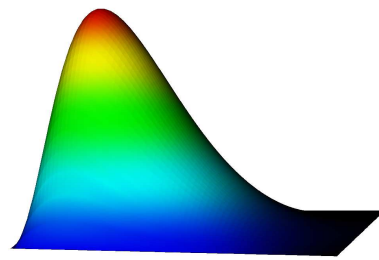
Tabelle 4.3: Konvergenz der Eigenfunktionen:

Berechnung der 1. primalen und dualen Eigenfunktion u_1 und u_1^* sowie der 4. primalen und dualen Eigenfunktion u_4 und u_4^* des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = 0.1$, $c_1 = 7/\sqrt{58}$ und $c_2 = 3/\sqrt{58}$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten

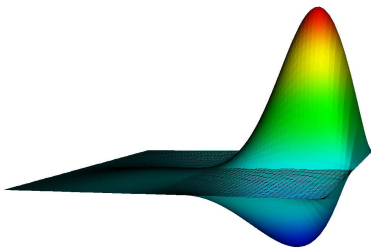
h	N	$\ u_1 - u_{h,1}\ $	$\ u_1^* - u_{h,1}^*\ $	$\ u_4 - u_{h,4}\ $	$\ u_4^* - u_{h,4}^*\ $
2^{-4}	289	$1.52 \cdot 10^{-2}$	$1.01 \cdot 10^{-1}$	$3.03 \cdot 10^{-2}$	$9.80 \cdot 10^{-1}$
2^{-5}	1089	$3.80 \cdot 10^{-3}$	$2.58 \cdot 10^{-2}$	$7.63 \cdot 10^{-3}$	$2.59 \cdot 10^{-1}$
2^{-6}	4225	$9.49 \cdot 10^{-4}$	$6.48 \cdot 10^{-3}$	$1.91 \cdot 10^{-3}$	$6.56 \cdot 10^{-2}$
2^{-7}	16641	$2.37 \cdot 10^{-4}$	$1.62 \cdot 10^{-3}$	$4.78 \cdot 10^{-4}$	$1.65 \cdot 10^{-2}$
Ordnung		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$



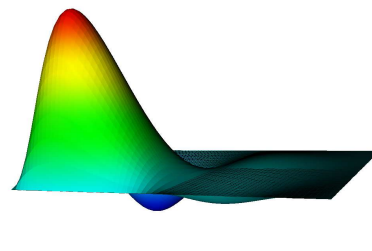
(a) 1. primale Eigenfunktion



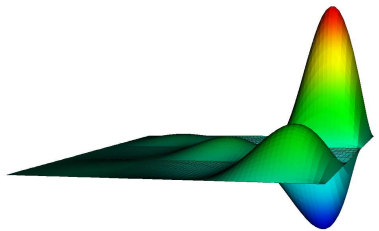
(b) 1. duale Eigenfunktion



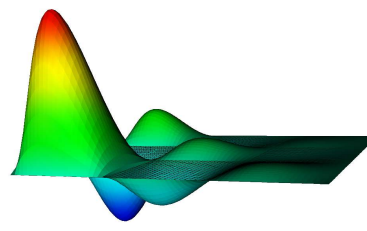
(c) 4. primale Eigenfunktion



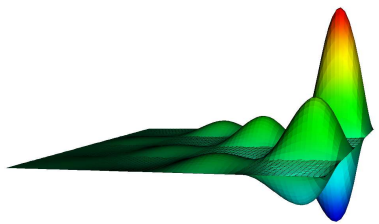
(d) 4. duale Eigenfunktion



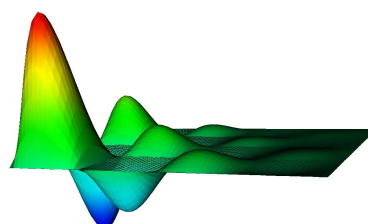
(e) 11. primale Eigenfunktion



(f) 11. duale Eigenfunktion



(g) 20. primale Eigenfunktion



(h) 20. duale Eigenfunktion

Abbildung 4.1: Die 1., 2., 4. und 20. primale bzw. duale Eigenfunktionen des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = 0.1, c_1 = 7/\sqrt{58}$ und $c_2 = 3/\sqrt{58}$

4.1.1 Praktische Anwendung des a posteriori Fehlerschätzers

Wir überprüfen nun den a posteriori Fehlerschätzer aus Satz 3.2, der definiert ist als

$$\eta := \frac{1}{2} \{ \rho(u_h, \lambda_h; u^* - u_h^*) + \rho^*(u_h^*, \lambda_h^*; u - u_h) \} / \left(\frac{1}{2}(u, u^*) + \frac{1}{2}(u_h, u_h^*) - \sigma \right),$$

mit $\sigma := \frac{1}{2}(u - u_h, u^* - u_h^*)$. Die Residuen sind wie in (3.8) gegeben durch

$$\begin{aligned} \rho &:= \rho(u_h, \lambda_h; u^* - u_h^*) = a(u_h, u^* - u_h^*) - \lambda_h(u_h, u^* - u_h^*), \\ \rho^* &:= \rho^*(u_h^*, \lambda_h^*; u - u_h) = a(u - u_h, u_h^*) - \bar{\lambda}_h^*(u - u_h, u_h^*). \end{aligned}$$

Da es sich um ein nicht-entartetes Eigenwertproblem handelt, wurden exakte und approximierende Eigenfunktionen auf $\|u\| = \|u_h\| = 1$ und $(u, u^*) = (u_h, u_h^*) = 1$ normiert, und es wurde hier die vereinfachte Identität (3.11) verwendet (die allgemeinere Identität (3.9) werden wir in Kapitel 4.3.3 numerisch überprüfen).

In Tabelle 4.4 sind die Rechnungen für $\nu = 0.1$, $c_1 = 7/\sqrt{58}$ und $c_2 = 3/\sqrt{58}$ dargestellt. Es wurden zunächst die exakten Eigenfunktionen (4.3) und (4.4) verwendet.

Tabelle 4.4: A posteriori Fehlerschätzer mit exakten Eigenfunktionen:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda = 4.473675\dots$ des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = 0.1$, $c_1 = 7/\sqrt{58}$ und $c_2 = 3/\sqrt{58}$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, Normierung $\|u\| = \|u_h\| = 1$, $(u, u^*) = (u_h, u_h^*) = 1$, $\eta := \frac{1}{2}(\rho + \rho^*)/(1 - \sigma)$

h	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \eta $	$\frac{\lambda - \lambda_h}{\eta}$	$ \sigma $
2^{-4}	289	$2.66 \cdot 10^{-2}$	$2.66 \cdot 10^{-2}$	1.000006572	$6.47 \cdot 10^{-5}$
2^{-5}	1089	$6.69 \cdot 10^{-3}$	$6.69 \cdot 10^{-3}$	1.000003651	$4.16 \cdot 10^{-6}$
2^{-6}	4225	$1.68 \cdot 10^{-3}$	$1.68 \cdot 10^{-3}$	1.000001029	$2.62 \cdot 10^{-7}$
2^{-7}	16641	$4.19 \cdot 10^{-4}$	$4.19 \cdot 10^{-4}$	1.000000264	$1.64 \cdot 10^{-8}$
Ord.		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$		$\mathcal{O}(h^4)$

Man sieht, dass die Approximationsgenauigkeit der Eigenwerte sehr gut durch den Fehlerschätzer η vorhergesagt wird. Der Quotient $(\lambda - \lambda_h)/\eta$ liegt bis auf fünf Nachkommastellen exakt bei eins. Der Restterm höherer Ordnung σ ist wie zu erwarten vernachlässigbar klein und konvergiert mit $\mathcal{O}(h^4)$.

Es stellt sich nun die Frage, wie die Fehleridentität (3.11) in der Praxis ausgewertet wird. Insbesondere sind im Allgemeinen die Eigenfunktionen nicht exakt bekannt, so dass eine geeignete Approximation der primalen und dualen Lösung benötigt wird. Hierfür kann

man beispielsweise eine Approximation höherer Ordnung verwenden (vergleiche [BR01]). Zum einen hat man die Möglichkeit einer *globalen Approximation höherer Ordnung*, bei der die exakten Lösungen durch Approximationen höherer Ordnung auf einem *feineren Gitter* ersetzt werden. Diese Vorgehensweise ist natürlich sehr aufwändig; in den meisten Anwendungen genügt auch die *lokale Approximation höherer Ordnung*. Hierbei werden die Approximationen höherer Ordnung auf dem *aktuellen Gitter* berechnet, wobei aufgrund der höheren Anzahl an benötigten Freiheitsgraden mehrere Gitterzellen zu einem sogenannten “patch” zusammengefasst werden.

In den folgenden Rechnungen wurden immer vier Zellen zu einem “patch” zusammengefasst und es wurden die *biquadratischen Interpolationen* $I_{2h}^{(2)}u_h$ und $I_{2h}^{(2)}u_h^*$ der berechneten Vektoren u_h und u_h^* verwendet. Als Maß für die Güte des Fehlerschätzers verwenden wir den *Effektivitätsindex*

$$I_{\text{eff}} := \left| \frac{\lambda - \lambda_h}{\eta_h} \right|.$$

Bei Approximation der exakten Eigenfunktionen mit biquadratischer Interpolation benutzen wir im Folgenden die Notation $\rho_h, \rho_h^*, \sigma_h$ und η_h anstelle von ρ, ρ^*, σ und η .

Die Ergebnisse bei dieser Vorgehensweise sieht man in Tabelle 4.5. Der Effektivitätsindex ist natürlich bei biquadratischer Interpolation etwas schlechter als der entsprechende Quotient, der mit den exakten Eigenfunktionen berechnet wurde, der Fehlerschätzer funktioniert aber immer noch sehr gut. Die Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h^2)$ bleibt erhalten, ebenso wie die Konvergenz von σ_h mit $\mathcal{O}(h^4)$. Wie bei exakten Eigenfunktionen ist σ_h vernachlässigbar klein.

Tabelle 4.5: A posteriori Fehlerschätzer mit biquadratischer Interpolation:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda = 4.473675\dots$ des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = 0.1, c_1 = 7/\sqrt{58}$ und $c_2 = 3/\sqrt{58}$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, Normierung $\|u_h\| = 1, (u_h, u_h^*) = 1, \eta_h := \frac{1}{2}(\rho_h + \rho_h^*)/(1 - \sigma_h), I_{\text{eff}} := |(\lambda - \lambda_h)/\eta_h|$

h	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \eta_h $	I_{eff}	$ \sigma_h $
2^{-4}	289	$2.66 \cdot 10^{-2}$	$2.71 \cdot 10^{-2}$	0.98	$6.05 \cdot 10^{-5}$
2^{-5}	1089	$6.69 \cdot 10^{-3}$	$6.73 \cdot 10^{-3}$	0.99	$3.74 \cdot 10^{-6}$
2^{-6}	4225	$1.68 \cdot 10^{-3}$	$1.68 \cdot 10^{-3}$	1.00	$2.33 \cdot 10^{-7}$
2^{-7}	16641	$4.19 \cdot 10^{-4}$	$4.19 \cdot 10^{-4}$	1.00	$1.45 \cdot 10^{-8}$
Ord.		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$		$\mathcal{O}(h^4)$

Als nächstes wurde untersucht, wie sich der a posteriori Fehlerschätzer bei abnehmender Viskosität verhält. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.6 dargestellt. Berechnet wurde jeweils die erste Eigenfunktion mit $c_1 = c_2 = 1$ und nacheinander $\nu = 1$, $\nu = 0.1$, $\nu = 0.03$ und $\nu = 0.02$.

Die primalen und dualen Eigenfunktionen sehen qualitativ aus wie in Abbildung 4.1(a) und 4.1(b), wobei die Maximalstellen aufgrund der zunehmenden Dominanz des Transportterms immer weiter in Richtung der Punkte $(1, 1)$ beziehungsweise $(0, 0)$ verschoben werden. Hierdurch ergibt sich ein zunehmend steiler Gradient und eine immer schmalere Grenzschicht. Oberhalb der Tabellen kann man ablesen, dass das Maximum der primalen Eigenfunktion bei $\nu = 1$ im Punkt $(0.6, 0.6)$ angenommen wird, bei $\nu = 0.02$ jedoch schon im Punkt $(0.98, 0.98)$. In letzterem Fall macht daher die Eigenwertberechnung mit globaler Gitterverfeinerung aufgrund der schmalen Grenzschicht keinen Sinn mehr, entsprechend wird der Eigenwertfehler $|\lambda - \lambda_h|$ im vorliegenden Fall unter Gitterverfeinerung nicht kleiner. Aufgrund der Normierung $\|u_h\| = 1$ und $(u_h, u_h^*) = 1$ wird in diesem Fall auch die Norm der adjungierten Eigenfunktion riesig, es ist $\|u_h^*\| \approx 10^{15}$. (Da sich diese Norm unter Gitterverfeinerung meistens nicht wesentlich ändert, ist oberhalb der Tabellen jeweils nur ein ungefährender Wert von $\|u_h^*\|$ für alle h zu sehen.)

Eine alternative Erklärung für das Versagen der Eigenwertberechnung bei $\nu = 0.02$ wäre, dass die Konditionierung des Eigenwertproblems zu schlecht ist. Dies würde auch erklären, warum bei $\nu = 0.03$ die Eigenwertberechnung noch sehr gut funktioniert, hingegen bei $\nu = 0.02$ nicht einmal mehr auf den feineren Gittern. Die Überlegung hierbei ist folgende: Nach dem *Stabilitätssatz* für Eigenwertprobleme ist die Konditionierung eines Matrix-Eigenwertproblems abhängig von $\text{cond}_2(\mathbf{W})$, wobei \mathbf{W} die Matrix mit den Eigenvektoren als Spalten ist (vergleiche [Ran06], Seite 228). Eine hermitesche Matrix hat ein Orthonormalsystem aus Eigenvektoren, daher kann \mathbf{W} als unitär angenommen werden und es folgt $\text{cond}_2(\mathbf{W}) = 1$. Das allgemeine Eigenwertproblem hingegen ist je nach $\text{cond}_2(\mathbf{W})$ beliebig schlecht konditioniert. Daher könnte im vorliegenden Fall bei $\nu = 0.02$ die riesige Norm der dualen Eigenfunktion $\|u_h^*\| \approx 10^{15}$ ein Hinweis auf schlechte Konditionierung sein; bei $\nu = 0.03$ ist diese Norm sehr viel kleiner, es ist $\|u_h^*\| \approx 10^8$. Wir werden in Kapitel 4.1.2 testen, ob die Eigenwertberechnung bei $\nu = 0.02$ unter *lokaler* Gitterverfeinerung besser funktioniert oder nicht - letzteres wäre ein Zeichen für schlechte Konditionierung des Eigenwertproblems.

Die Breite der Grenzschicht lässt sich auch *a priori* abschätzen, nach [Ran08b] gilt für

Tabelle 4.6: A posteriori Fehlerschätzer mit abnehmender Viskosität:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts des Konvektions-Diffusions-Operators mit $c_1 = c_2 = 1$ und abnehmendem ν unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, Normierung $\|u_h\| = 1$, $(u_h, u_h^*) = 1$, mit biquadratischer Interpolation, $\eta_h := \frac{1}{2}(\rho_h + \rho_h^*)/(1 - \sigma_h)$, $I_{\text{eff}} := |(\lambda - \lambda_h)/\eta_h|$

(a) $\nu = 1$, $\lambda = 20.2392\dots$, $\max |\partial_x^2 u| = \max |\partial_y^2 u| \approx 20.9$, $\text{argmax} \approx (0.6, 0.6)$, $\|u_h^*\| \approx 1.03$

h	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \eta_h $	I_{eff}	$ \sigma_h $	$ \eta $	$ \sigma $
2^{-4}	289	$5.39 \cdot 10^{-2}$	$5.40 \cdot 10^{-2}$	1.00	$2.03 \cdot 10^{-5}$	$5.40 \cdot 10^{-2}$	$2.49 \cdot 10^{-6}$
2^{-5}	1089	$1.35 \cdot 10^{-2}$	$1.35 \cdot 10^{-2}$	1.00	$1.27 \cdot 10^{-6}$	$1.35 \cdot 10^{-2}$	$1.57 \cdot 10^{-7}$
2^{-6}	4225	$3.36 \cdot 10^{-3}$	$3.36 \cdot 10^{-3}$	1.00	$7.94 \cdot 10^{-8}$	$3.36 \cdot 10^{-3}$	$9.86 \cdot 10^{-9}$
2^{-7}	16641	$8.41 \cdot 10^{-4}$	$8.41 \cdot 10^{-4}$	1.00	$4.96 \cdot 10^{-9}$	$8.41 \cdot 10^{-4}$	$6.16 \cdot 10^{-10}$
Ord.		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$		$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^4)$

(b) $\nu = 0.1$, $\lambda = 6.9739\dots$, $\max |\partial_x^2 u| = \max |\partial_y^2 u| \approx 2.10 \cdot 10^2$, $\text{argmax} \approx (0.92, 0.92)$, $\|u_h^*\| \approx 1.76$

h	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \eta_h $	I_{eff}	$ \sigma_h $	$ \eta $	$ \sigma $
2^{-4}	289	$4.86 \cdot 10^{-2}$	$5.02 \cdot 10^{-2}$	0.97	$7.64 \cdot 10^{-5}$	$4.86 \cdot 10^{-2}$	$4.57 \cdot 10^{-5}$
2^{-5}	1089	$1.23 \cdot 10^{-2}$	$1.24 \cdot 10^{-2}$	1.00	$4.57 \cdot 10^{-6}$	$1.23 \cdot 10^{-2}$	$3.05 \cdot 10^{-6}$
2^{-6}	4225	$3.08 \cdot 10^{-3}$	$3.09 \cdot 10^{-3}$	1.00	$2.82 \cdot 10^{-7}$	$3.08 \cdot 10^{-3}$	$1.94 \cdot 10^{-7}$
2^{-7}	16641	$7.71 \cdot 10^{-4}$	$7.71 \cdot 10^{-4}$	1.00	$1.76 \cdot 10^{-8}$	$7.71 \cdot 10^{-4}$	$1.22 \cdot 10^{-8}$
Ord.		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$		$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^4)$

(c) $\nu = 0.03$, $\lambda = 17.2588\dots$, $\max |\partial_x^2 u| = \max |\partial_y^2 u| \approx 5.5 \cdot 10^3$, $\text{argmax} \approx (0.97, 0.97)$, $\|u_h^*\| \approx 1 \cdot 10^8$

h	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \eta_h $	I_{eff}	$ \sigma_h $	$ \eta $	$ \sigma $
2^{-4}	289	$1.54 \cdot 10^0$	$2.42 \cdot 10^0$	0.64	$4.29 \cdot 10^{-2}$	$1.49 \cdot 10^0$	$1.78 \cdot 10^1$
2^{-5}	1089	$3.14 \cdot 10^{-1}$	$3.43 \cdot 10^{-1}$	0.92	$1.17 \cdot 10^{-3}$	$2.47 \cdot 10^{-1}$	$1.79 \cdot 10^{-1}$
2^{-6}	4225	$7.53 \cdot 10^{-2}$	$7.68 \cdot 10^{-2}$	0.98	$6.29 \cdot 10^{-5}$	$7.43 \cdot 10^{-2}$	$9.44 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	16641	$1.86 \cdot 10^{-2}$	$1.87 \cdot 10^{-2}$	1.00	$3.79 \cdot 10^{-6}$	$1.86 \cdot 10^{-2}$	$5.71 \cdot 10^{-4}$
2^{-8}	66049	$4.64 \cdot 10^{-3}$	$4.65 \cdot 10^{-3}$	1.00	$2.35 \cdot 10^{-7}$	$4.64 \cdot 10^{-3}$	$3.54 \cdot 10^{-5}$
Ord.		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$		$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^4)$

(d) $\nu = 0.02$, $\lambda = 25.3947\dots$, $\max |\partial_x^2 u| = \max |\partial_y^2 u| \approx 1.8 \cdot 10^4$, $\text{argmax} \approx (0.98, 0.98)$, $\|u_h^*\| \approx 1 \cdot 10^{15}$

h	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \eta_h $	I_{eff}	$ \sigma_h $	$ \eta $	$ \sigma $
2^{-4}	289	$6.38 \cdot 10^{-1}$	$3.81 \cdot 10^{-1}$	1.67	$4.66 \cdot 10^{-2}$	$2.69 \cdot 10^0$	$2.35 \cdot 10^0$
2^{-5}	1089	$1.27 \cdot 10^{-1}$	$3.43 \cdot 10^{-1}$	0.37	$2.19 \cdot 10^{-3}$	$8.04 \cdot 10^{-1}$	$3.33 \cdot 10^0$
2^{-6}	4225	$5.88 \cdot 10^{-1}$	$7.49 \cdot 10^{-2}$	7.85	$8.94 \cdot 10^{-5}$	$2.20 \cdot 10^0$	$6.05 \cdot 10^0$
2^{-7}	16641	$4.28 \cdot 10^{-1}$	$3.34 \cdot 10^0$	0.13	$1.16 \cdot 10^{-4}$	$3.85 \cdot 10^0$	$2.77 \cdot 10^0$
2^{-8}	66049	$4.42 \cdot 10^{-1}$	$4.49 \cdot 10^{-1}$	0.98	$2.92 \cdot 10^{-6}$	$2.24 \cdot 10^1$	$2.43 \cdot 10^0$

die Breite

$$\delta \approx \sqrt{\nu}.$$

Für das Auflösen der Grenzschicht kann man hiermit ausrechnen, ab welcher Gitterweite genügend Knotenpunkte in der Grenzschicht liegen; beispielsweise sind bei $\nu = 0.03$ die ersten beiden Berechnungen bei $h = 2^{-4}$ und $h = 2^{-5}$ kritisch, da sich weniger als zehn Knotenpunkte in der Grenzschicht befinden.

Betrachten wir nun den a posteriori Fehlerschätzer. Es ist insbesondere interessant, wie sich der Fehlerschätzer η_h mit biquadratischer Interpolation anstelle der exakten Eigenfunktionen im Vergleich zum exakten Fehlerschätzer η verhält. Man sieht, dass die Fehlerschätzung so lange funktioniert, wie die Berechnung der Eigenwerte sinnvoll ist. Für $\nu \geq 0.05$ gilt überall $|\lambda - \lambda_h| \approx |\eta_h| \approx |\eta|$. Außerdem ist $|\sigma_h| \geq |\sigma|$, wodurch der Fehler also höchstens als zu groß eingeschätzt wird.

Probleme treten erst ab $\nu = 0.03$ auf. Kritisch ist hier, dass überall $|\sigma_h| < |\sigma|$ gilt, was einen kleineren Fehler impliziert, als tatsächlich vorliegt. Ansonsten funktioniert der Fehlerschätzer aber noch ziemlich gut, mit Ausnahme des größten Gitters mit Gitterweite $h = 2^{-4}$. Allerdings ist hier auch das Gitter noch zu grob, man sieht, dass der Eigenwert nicht gut approximiert wird. Dass die Gitterweite nicht fein genug ist, kann man auch anhand der maximalen zweiten Ableitung von ungefähr 10^3 erkennen. Auf den feineren Gittern konvergiert der Effektivitätsindex dann wieder gut gegen eins.

Sehr problematisch wird es dann wie zu erwarten bei $\nu = 0.02$. Wie bereits erwähnt, funktioniert jedoch schon die Eigenwertberechnung in diesem Fall nicht mehr. Daher sind auch die berechneten Eigenfunktionen noch sehr schlecht, so dass die biquadratische Interpolation von u_h keine sinnvolle Approximation an u darstellt. Dass auch der Fehlerschätzer nicht mehr funktioniert, war daher zu erwarten und ist nicht weiter problematisch.

Als letztes wurde überprüft, ob der Fehlerschätzer auch bei höheren Eigenfunktionen noch funktioniert. Berechnet wurde der vierte und elfte Eigenwert, jeweils mit $c_1 = c_2 = 1$ und $\nu = 1$ sowie $\nu = 0.1$. Das Ergebnis war, dass auch hier der Fehlerschätzer gut funktioniert.

Insgesamt lässt sich also sagen, dass der a posteriori Fehlerschätzer gut funktioniert, solange das Gitter hinreichend fein ist und die Grenzschicht aufgelöst wird. Man sollte den Fehlerschätzer also nur mit angemessener Auswertung von a priori Information verwenden.

4.1.2 Lokale Gitterverfeinerung

Als nächstes wurde getestet, wie gut sich der Fehlerschätzer zur lokalen Gitterverfeinerung verwenden lässt. Verfeinert wird nun nicht mehr global, sondern nur dort, wo der Fehlerschätzer einen besonders großen Fehler anzeigt.

In Tabelle 4.7 sieht man exemplarisch die Ergebnisse für $\nu = 1$ und $\nu = 0.03$. Man sieht, dass die lokale Gitterverfeinerung gut funktioniert, die Ergebnisse sind vergleichbar mit denjenigen bei globaler Gitterverfeinerung in Tabelle 4.6. Allerdings wurden auch erst ab Gitterweite $h = 2^{-7}$ signifikant Knoten eingespart. Ebenfalls gut funktioniert die lokale Gitterverfeinerung bei höheren Eigenwerten; getestet wurde wieder das vierte und elfte Eigenpaar.

Tabelle 4.7: A posteriori Fehlerschätzer unter lokaler Gitterverfeinerung:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts des Konvektions-Diffusions-Operators mit $c_1 = c_2 = 1$ und abnehmendem ν unter lokaler Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, kleinste Gitterweite h_{\min} , Normierung $\|u_h\| = 1$, $(u_h, u_h^*) = 1$, mit biquadratischer Interpolation, $\eta_h := \frac{1}{2}(\rho_h + \rho_h^*)/(1 - \sigma_h)$, $I_{\text{eff}} := |(\lambda - \lambda_h)/\eta_h|$

(a) $\nu = 1, \lambda = 20.2392\dots, \max |\partial_x^2 u| = \max |\partial_y^2 u| \approx 20.9, \text{argmax} \approx 0.6, \|u_h^*\| \approx 1.03$

h_{\min}	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \eta_h $	I_{eff}	$ \sigma_h $
2^{-4}	289	$5.39 \cdot 10^{-2}$	$5.40 \cdot 10^{-2}$	1.00	$2.03 \cdot 10^{-5}$
2^{-5}	1089	$1.35 \cdot 10^{-2}$	$1.35 \cdot 10^{-2}$	1.00	$1.27 \cdot 10^{-6}$
2^{-6}	3865	$3.33 \cdot 10^{-3}$	$3.32 \cdot 10^{-3}$	1.00	$7.80 \cdot 10^{-8}$
2^{-7}	13393	$7.96 \cdot 10^{-4}$	$7.92 \cdot 10^{-4}$	1.01	$4.54 \cdot 10^{-9}$
Ordnung		$\mathcal{O}(h_{\min}^2)$	$\mathcal{O}(h_{\min}^2)$		

(b) $\nu = 0.03, \lambda = 17.2588\dots, \max |\partial_x^2 u| = \max |\partial_y^2 u| \approx 5.5e + 3, \text{argmax} \approx 0.97$

h_{\min}	N	$ \lambda - \lambda_h $	$ \eta_h $	I_{eff}	$ \sigma_h $
2^{-4}	289	$1.54 \cdot 10^0$	$2.42 \cdot 10^0$	0.64	$4.29 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	1089	$3.14 \cdot 10^{-1}$	$3.43 \cdot 10^{-1}$	0.92	$1.17 \cdot 10^{-3}$
2^{-6}	3841	$7.34 \cdot 10^{-2}$	$7.42 \cdot 10^{-2}$	0.99	$5.87 \cdot 10^{-5}$
2^{-7}	12857	$1.65 \cdot 10^{-2}$	$1.63 \cdot 10^{-2}$	1.01	$2.93 \cdot 10^{-6}$
Ordnung		$\mathcal{O}(h_{\min}^2)$	$\mathcal{O}(h_{\min}^2)$		

Wie in Tabelle 4.8 zu sehen war, funktioniert die Eigenwertberechnung bei $\nu = 0.02$ unter *globaler* Gitterverfeinerung überhaupt nicht mehr, die berechneten Eigenwerte

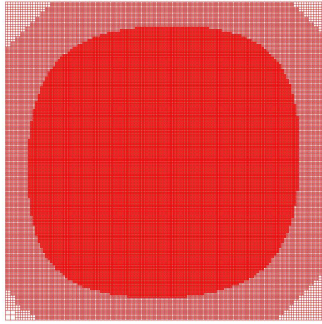
Tabelle 4.8: Lokale Gitterverfeinerung bei $\nu = 0.02$:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = 0.02$ und $c_1 = c_2 = 1$ unter lokaler Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten

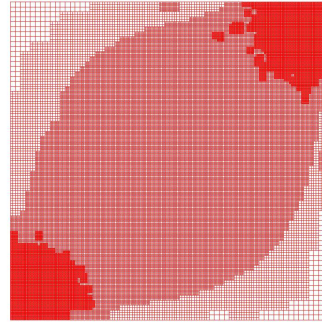
h_{\min}	N	$ \lambda - \lambda_h $
2^{-4}	289	1.44
2^{-5}	1005	0.23
2^{-6}	2247	0.50
2^{-7}	4189	0.68
2^{-8}	13523	0.42
2^{-9}	45281	2.07
2^{-10}	60951	1.67
2^{-11}	221531	0.62
2^{-12}	323975	2.74
2^{-13}	538413	1.37
2^{-14}	1659619	1.76

konvergieren auch auf den feinsten Gittern nicht. Die Frage war, ob das Gitter noch zu grob ist, oder ob das Eigenwertproblem einfach zu schlecht konditioniert ist. Um diese Frage zu klären, testen wir nun, ob die Eigenwertberechnung unter *lokaler* Gitterverfeinerung besser funktioniert. Man sieht in Tabelle 4.8, dass auch hier die Ergebnisse sehr schlecht sind. Der Eigenwert wird unter Gitterverfeinerung nicht besser approximiert, nicht einmal bei der kleinsten Gitterweite von $h_{\min} = 2^{-14}$ und mehr als einer Million Knotenpunkten. Daher kommen wir zu dem Schluss, dass das Problem tatsächlich zu schlecht konditioniert ist, um Eigenwertberechnungen durchzuführen.

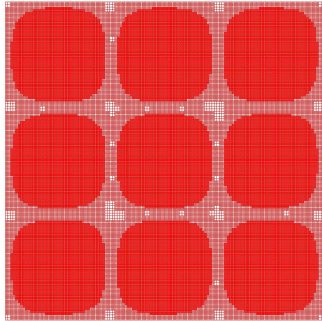
In Abbildung 4.2 sieht man vier Beispiele für lokale Gitterverfeinerung anhand des Fehlerschätzers, jeweils mit minimaler Gitterweite $h_{\min} = 2^{-8}$. In 4.2(a) und 4.2(b) ist das Gitter zum ersten Eigenpaar mit $\nu = 1$ beziehungsweise $\nu = 0.02$ zu sehen. Abbildung 4.2(c) und 4.2(d) zeigen die Verfeinerung bei Berechnung des elften Eigenpaars, wiederum mit Viskosität $\nu = 1$ und $\nu = 0.02$. Die elften Eigenfunktionen sehen qualitativ (bis auf die unterschiedliche Wahl der Parameter) aus wie in Abbildung 4.1(e) und 4.1(f), mit je 3 Sinus-Hügeln in x_1 -Richtung und in x_2 -Richtung. Analog sieht die erste primale beziehungsweise duale Eigenfunktion qualitativ aus wie in Abbildung 4.1(a) und 4.1(b), mit jeweils einem Sinus-Hügel.



(a) Gitter zum 1. Eigenpaar, $\nu = 1$



(b) Gitter zum 1. Eigenpaar, $\nu = 0.02$



(c) Gitter zum 11. Eigenpaar, $\nu = 1$



(d) Gitter zum 11. Eigenpaar, $\nu = 0.02$

Abbildung 4.2: Lokale Gitterverfeinerung bei der Berechnung der Eigenpaare des Konvektions-Diffusions-Operators mit verschiedener Viskosität und $c_1 = c_2 = 1$

Im Fall $\nu = 1$ sieht man an den Bildern 4.2(a) und 4.2(c), dass vor allem direkt bei den Sinus-Hügeln verfeinert wurde, man kann die Form der Eigenfunktionen deutlich erkennen. Erstaunlich ist hier, dass man intuitiv vielleicht eher an den Stellen verfeinern würde, die hier gerade nicht verfeinert wurden. Es wurden jedoch bei Verfeinerung “von Hand” deutlich schlechtere Ergebnisse als mit dem Fehlerschätzer erzielt.

Betrachten wir nun den Fall $\nu = 0.02$. Anhand der Gitter in den Abbildungen 4.2(b) und 4.2(d) sieht man, dass bei steilerem Gradienten immer mehr um die Grenzschicht herum verfeinert wird. Die Maximalstellen der ersten Eigenfunktion im Fall $\nu = 0.02$ befinden sich bei $(0.98, 0.98)$ bei der primalen beziehungsweise $(0.02, 0.02)$ bei der dualen Eigenfunktion, wie in Tabelle 4.6 erwähnt. Wie zu erwarten, wurde also in 4.2(b) insbesondere um die Grenzschichten bei den Punkten $(0, 0)$ und $(1, 1)$ herum verfeinert. Dasselbe

Verhalten beobachtet man beim elften Eigenpaar in 4.2(d). Man sieht außerdem, dass die Gitter bei $\nu = 0.02$ deutlich unregelmäßiger verfeinert werden als bei $\nu = 1$ (und es lässt sich feststellen, dass man bei mehrmaliger Berechnung ein deutlich unterschiedliches Gitter erhält). Dies hängt damit zusammen, dass die Eigenwertberechnung und damit der Fehlerschätzer bei $\nu = 0.02$ nicht mehr gut funktionieren, wie in 4.8 zu sehen war.

Tabelle 4.9: Lokale Gitterverfeinerung bei mehreren Eigenwerten:

Berechnung verschiedener Eigenwerte des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = c_1 = c_2 = 1$ mit je 100 Iterationsschritten, i -ter Eigenwert $\lambda_{h,i}^{\text{loc}(j)}$ auf dem lokalen Gitter zum j -ten Eigenwert mit $N_{\text{loc}(j)}$ Knoten berechnet, $\lambda_{h,i}^{\text{glob}}$ Vergleichswert bei globaler Gitterverfeinerung, kleinste Gitterweite h_{\min} , mit biquadratischer Interpolation

(a) 1. Eigenwert auf dem Gitter zum 11. Eigenwert berechnet				
h_{\min}	$N_{\text{loc}(11)}$	$ \lambda_{h,1}^{\text{glob}} - \lambda_1 $	$ \lambda_{h,1}^{\text{loc}(1)} - \lambda_1 $	$ \lambda_{h,1}^{\text{loc}(11)} - \lambda_1 $
2^{-4}	289	$5.39 \cdot 10^{-2}$	$5.39 \cdot 10^{-2}$	$5.39 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	1089	$1.35 \cdot 10^{-2}$	$1.35 \cdot 10^{-2}$	$1.35 \cdot 10^{-2}$
2^{-6}	4225	$3.36 \cdot 10^{-3}$	$3.32 \cdot 10^{-3}$	$3.36 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	16185	$8.41 \cdot 10^{-4}$	$7.95 \cdot 10^{-4}$	$9.60 \cdot 10^{-4}$
2^{-8}	56761	$2.10 \cdot 10^{-4}$	$1.98 \cdot 10^{-4}$	$3.81 \cdot 10^{-4}$
Ordnung		$\mathcal{O}(h_{\min}^2)$	$\mathcal{O}(h_{\min}^2)$	
(b) 11. Eigenwert auf dem Gitter zum 1. Eigenwert berechnet				
h_{\min}	$N_{\text{loc}(1)}$	$ \lambda_{h,11}^{\text{glob}} - \lambda_{11} $	$ \lambda_{h,11}^{\text{loc}(11)} - \lambda_{11} $	$ \lambda_{h,11}^{\text{loc}(1)} - \lambda_{11} $
2^{-4}	289	$5.11 \cdot 10^0$	$5.11 \cdot 10^0$	$5.11 \cdot 10^0$
2^{-5}	1089	$1.27 \cdot 10^0$	$1.27 \cdot 10^0$	$1.27 \cdot 10^0$
2^{-6}	3865	$3.16 \cdot 10^{-1}$	$3.16 \cdot 10^{-1}$	$3.66 \cdot 10^{-1}$
2^{-7}	13393	$7.89 \cdot 10^{-2}$	$7.89 \cdot 10^{-2}$	$1.14 \cdot 10^{-1}$
2^{-8}	49193	$1.97 \cdot 10^{-2}$	$1.98 \cdot 10^{-2}$	$3.37 \cdot 10^{-2}$
Ordnung		$\mathcal{O}(h_{\min}^2)$	$\mathcal{O}(h_{\min}^2)$	

Schließlich ist noch die Frage interessant, wie die Gitterverfeinerung durchgeführt werden muss, wenn mehr als ein Eigenwert gesucht ist. Die Frage ist also, ob Eigenwerte auch auf den lokalen Gittern, die passend zu einem anderen Eigenwert erstellt wurden, gut approximiert werden. Wir betrachten hierfür wieder den ersten und elften Eigenwert und untersuchen zunächst, ob der erste Eigenwert auch gut approximiert wird, wenn anhand des Fehlerschätzers $\eta_{h,11}$ zum elften Eigenwert verfeinert wird.

Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.9(a) dargestellt. In der dritten und vierten Spalte sieht man zum Vergleich den Eigenwertfehler bei globaler Gitterverfeinerung beziehungsweise bei “passender” lokaler Gitterverfeinerung anhand des zugehörigen Fehlerschätzers $\eta_{h,1}$. Man sieht wie in Tabelle 4.7 noch einmal, dass diese lokale Gitterverfeinerung keinen größeren Eigenwertfehler beim gesuchten Eigenwert zur Folge hat (die lokale Verfeinerung resultiert sogar in einer minimal besseren Approximation, was jedoch durch Zufallsschwankungen zustande kommen kann).

In der letzten Spalte ist dann der Eigenwertfehler des ersten Eigenwerts auf dem Gitter zum elften Eigenwert zu sehen. Hier sieht man, dass der Eigenwert zwar noch ziemlich gut approximiert wird, der Fehler aber auf den feinsten Gittern etwas größer ist als bei den Vergleichsrechnungen. Bei den gröberen Gittern sieht man kaum einen Unterschied, da hier auch noch nicht signifikant Knoten eingespart werden. Die quadratische Konvergenz ist entsprechend auf den gröberen Gittern deutlich zu sehen, geht bei feineren Gittern jedoch etwas verloren. Insgesamt wird der erste Eigenwert also auf dem Gitter zum elften Eigenwert noch ziemlich gut approximiert, allerdings nicht mit der optimalen Konvergenzordnung.

In Tabelle 4.9(b) sieht man dann den umgekehrten Test, die Approximation des elften Eigenwerts auf dem Gitter, das anhand des lokalen Fehlerschätzer $\eta_{h,1}$ zum ersten Eigenwert verfeinert wurde. In der dritten und vierten Spalte die analogen Vergleichswerte. Das Ergebnis ist ungefähr dasselbe, die Eigenwerte werden nicht mehr ganz optimal approximiert, der Fehler ist aber trotzdem akzeptabel.

Schließlich wird überprüft, wie sich der a posteriori Fehlerschätzer auf dem “falschen” Gitter verhält. Die Frage ist insbesondere, ob die Approximation der exakten Eigenfunktionen mit biquadratischer Interpolation noch gut ist. Man sieht die Ergebnisse in Tabelle 4.10, in 4.10(a) wieder zunächst die Ergebnisse des ersten Eigenwerts auf dem Gitter zum elften. Zum Vergleich ist in der dritten Spalte der Effektivitätsindex auf dem “passenden” Gitter dargestellt, der wie immer sehr nahe bei eins liegt. Im Vergleich hierzu sieht man, dass der Effektivitätsindex bei Berechnung auf dem nicht angepassten Gitter mit den Gitterweiten 2^{-7} und 2^{-8} minimal schlechter ist als bei den Vergleichswerten. Auf den gröberen Gittern ist kein Unterschied feststellbar, da hier auch noch keine Knoten eingespart wurden. Ähnlich ist das Ergebnis in Tabelle 4.10(b), wo die Approximation des elften Eigenwerts auf dem Gitter zum ersten zu sehen ist. Der Effektivitätsindex ist bei Berechnung auf dem “falschen” Gitter ab der ersten Einsparung von Knoten bei $h = 2^{-6}$

Tabelle 4.10: A posteriori Fehlerschätzer bei “falschem” Gitter:

Berechnung verschiedener Eigenwerte des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = c_1 = c_2 = 1$ mit je 100 Iterationsschritten, i -ter Eigenwert $\lambda_{h,i}^{\text{loc}(j)}$ und zugehöriger Fehlerschätzer $\eta_{h,i}^{\text{loc}(j)}$ auf dem lokalen Gitter zum j -ten Eigenwert mit $N_{\text{loc}(j)}$ Knoten berechnet, kleinste Gitterweite h_{\min} , Normierung $\|u_h\| = 1$, $(u_h, u_h^*) = 1$, mit biquadratischer Interpolation, $I_{\text{eff}_i}^{\text{loc}(j)} := |(\lambda_{h,i}^{\text{loc}(j)} - \lambda_i)/\eta_{h,i}^{\text{loc}(j)}|$

(a) 1. Eigenwert auf dem Gitter zum 11. Eigenwert berechnet

h_{\min}	N	$I_{\text{eff}_1}^{\text{loc}(1)}$	$ \lambda_{h,1}^{\text{loc}(11)} - \lambda_1 $	$ \eta_{h,1}^{\text{loc}(11)} $	$I_{\text{eff}_1}^{\text{loc}(11)}$
2^{-4}	289	1.00	$5.39 \cdot 10^{-2}$	$5.40 \cdot 10^{-2}$	1.00
2^{-5}	1089	1.00	$1.35 \cdot 10^{-2}$	$1.35 \cdot 10^{-2}$	1.00
2^{-6}	4225	1.00	$3.36 \cdot 10^{-3}$	$3.36 \cdot 10^{-3}$	1.00
2^{-7}	16185	1.01	$9.60 \cdot 10^{-4}$	$9.32 \cdot 10^{-4}$	1.03
2^{-8}	56761	1.01	$3.81 \cdot 10^{-4}$	$3.54 \cdot 10^{-4}$	1.08

(b) 11. Eigenwert auf dem Gitter zum 1. Eigenwert berechnet

h_{\min}	N	$I_{\text{eff}_{11}}^{\text{loc}(11)}$	$ \lambda_{h,11}^{\text{loc}(1)} - \lambda_{11} $	$ \eta_{h,11}^{\text{loc}(1)} $	$I_{\text{eff}_{11}}^{\text{loc}(1)}$
2^{-4}	289	1.01	$5.11 \cdot 10^0$	$5.06 \cdot 10^0$	1.01
2^{-5}	1089	1.01	$1.27 \cdot 10^0$	$1.26 \cdot 10^0$	1.01
2^{-6}	3889	1.00	$3.66 \cdot 10^{-1}$	$3.50 \cdot 10^{-1}$	1.05
2^{-7}	13441	1.00	$1.14 \cdot 10^{-1}$	$1.11 \cdot 10^{-1}$	1.03
2^{-8}	49409	1.01	$3.37 \cdot 10^{-2}$	$3.32 \cdot 10^{-2}$	1.02

etwas schlechter. Insgesamt funktioniert jedoch auch hier die a posteriori Fehlerschätzung noch relativ gut, insbesondere auf dem feinsten Gitter ist trotz wesentlich geringerer Anzahl an Knoten kaum mehr ein Unterschied feststellbar.

4.1.3 Test des Abbruchkriteriums

Wie wir in Tabelle 4.1 gesehen haben, werden die Eigenwertberechnungen mit dem Arnoldi-Algorithmus schnell sehr speicher- und laufzeitintensiv. Aus diesem Grund ist es wichtig, geeignete Kriterien für den Abbruch der Berechnungen zu finden.

In diesem Abschnitt werden wir daher das Abbruchkriterium numerisch überprüfen, welches wir in Kapitel 3.7.2 hergeleitet haben. Wir verwenden wieder die Notation $U_h = \{u_h, \lambda_h\}$ für das diskrete Lösungspaar und $\tilde{U}_h = \{\tilde{u}_h, \tilde{\lambda}_h\}$ für eine Approximation

an U_h . Als Testfall betrachten wir den Laplace-Operator, was die auftretenden Terme aufgrund der Symmetrie etwas überschaubarer macht. Die Normierung $\|u\| = \|u_h\| = 1$ bewirkt, dass die vereinfachte Identität (3.12) gilt; analoge Umformungen sind für die übrigen Identitäten möglich. Insbesondere können wir das Abbruchkriterium (3.15) (falls $\rho(\tilde{U}_h, u - \tilde{u}_h) \neq 0$) schreiben als

$$\frac{|\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h)|}{|\rho(\tilde{U}_h, u - \tilde{u}_h)|} < c, \quad (4.5)$$

mit einer geeigneten Konstante $c \leq 1$. Beispielsweise werden wir im Folgenden testen, ob die Wahl $c = 0.1$ ein sinnvolles Abbruchkriterium liefert.

Wie in Kapitel 3.7.2 erläutert, liegt dem Abbruchkriterium die Annahme zugrunde, dass der Iterationsfehler durch

$$\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h) = a(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, \tilde{u}_h)$$

wiedergegeben wird. Unproblematischer wäre im symmetrischen Fall die Verwendung von

$$\rho(\tilde{U}_h, u_h) = a(\tilde{u}_h, u_h) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, u_h),$$

was jedoch im Allgemeinen nicht möglich ist, da der diskrete Eigenvektor u_h nicht bekannt ist. Wir wollen also im Folgenden insbesondere untersuchen, wie sich diese Vereinfachung auswirkt.

Wir verwenden zunächst die exakte Eigenfunktion (4.3) anstelle der sonst üblichen biquadratischen Interpolation, um das Abbruchkriterium möglichst frei von anderen Störtermen beurteilen zu können. Tabelle 4.11 zeigt die Berechnung der für das Abbruchkriterium relevanten Terme. Hier wurde das Gitter ohne Verfeinerung bei Gitterweite $h = 2^{-5}$ verwendet. Statt dessen sieht man in den einzelnen Zeilen die Ergebnisse abhängig von der Anzahl der Arnoldi-Iterationen, die in der ersten Spalte aufgeführt ist. In der zweiten Zeile ist der Eigenwertfehler $|\lambda - \tilde{\lambda}_h|$ zu sehen. In den vorangegangenen Kapiteln wurden in allen Rechnungen jeweils 100 Arnoldi-Iterationen durchgeführt; hier sieht man schon auf den ersten Blick, dass so viele Iterationen bei weitem nicht nötig sind. Man erhält schon nach fünf Iterationen einen Eigenwert, dessen Eigenwertfehler nur noch aus dem Diskretisierungsfehler besteht. Dies sieht man daran, dass sich der Eigenwertfehler ab fünf Iterationen nicht mehr relevant ändert. Das ist insofern erstaunlich, als hier tatsächlich eine (5×5) -Hessenberg-Matrix als Approximation an die Ausgangsmatrix $\mathbf{A}_h^{-1}\mathbf{M}_h$ mit

Tabelle 4.11: Abbruchkriterium mit exakten Eigenfunktionen:

Approximative Eigenwerte $\tilde{\lambda}_h$ des Laplace-Operators nach k Arnoldi-Iterationen, $h = 2^{-5}$, Referenzwert $\lambda_h = 19.755068\dots$ (500 Arnoldi-Iterationen), exakter Eigenwert $\lambda = 2\pi^2 = 19.739209\dots$, Residuum $\rho(\tilde{U}_h, \cdot) = a(\tilde{u}_h, \cdot) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, \cdot)$ für $U_h := (u_h, \lambda_h)$, $q := |\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h)| / |\rho(\tilde{U}_h, u - \tilde{u}_h)|$, exakte Eigenfunktionen statt biquadratischer Interpolation verwendet

k	$ \lambda - \tilde{\lambda}_h $	$ \rho(\tilde{U}_h, u - \tilde{u}_h) $	$ \lambda_h - \tilde{\lambda}_h $	$ \rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h) $	q
1	$2.79 \cdot 10^3$	$3.04 \cdot 10^3$	$2.79 \cdot 10^3$	$2.97 \cdot 10^3$	0.98
2	$1.64 \cdot 10^1$	$1.38 \cdot 10^2$	$1.64 \cdot 10^1$	$1.26 \cdot 10^2$	0.91
3	$2.77 \cdot 10^{-1}$	$4.08 \cdot 10^0$	$2.61 \cdot 10^{-1}$	$3.81 \cdot 10^0$	0.93
4	$2.49 \cdot 10^{-2}$	$1.39 \cdot 10^{-1}$	$9.09 \cdot 10^{-3}$	$1.14 \cdot 10^{-1}$	0.82
5	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.71 \cdot 10^{-2}$	$9.05 \cdot 10^{-5}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$	0.07
6	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$7.55 \cdot 10^{-7}$	$1.39 \cdot 10^{-5}$	$9 \cdot 10^{-4}$
7	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$4.77 \cdot 10^{-9}$	$8.28 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-6}$
8	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$6.54 \cdot 10^{-10}$	$2.78 \cdot 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-8}$
9	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$3.63 \cdot 10^{-11}$	$3.81 \cdot 10^{-11}$	$2 \cdot 10^{-9}$

Dimension größer als 1000×1000 ausreicht, um den kleinsten Eigenwert zufriedenstellend anzunähern.

Betrachten wir nun das zugehörige Abbruchkriterium. Hierfür vergleicht man das Residuum in der dritten Spalte mit dem Restterm in der fünften Spalte. In der sechsten Spalte ist hierfür der Quotient

$$q := \frac{|\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h)|}{|\rho(\tilde{U}_h, u - \tilde{u}_h)|}$$

zu sehen. Wie man sieht, ist das Abbruchkriterium $q < 0.1$ gerade ab dem fünften Iterationsschritt erfüllt, ab dem auch der Eigenwertfehler sich nicht mehr signifikant ändert. In diesem Sinne funktioniert das Abbruchkriterium also sehr gut.

Der Abbruch bei $q < 1$ beispielsweise würde keinen Sinn machen, man sieht, dass diese Bedingung hier schon im ersten Iterationsschritt erfüllt wäre. Der erste Iterationsschritt besteht jedoch im Wesentlichen aus dem Zufallsvektor und der zugehörigen (1×1) -Hessenberg-Matrix; dass hier keine vernünftigen Approximationen zu erwarten sind, ist klar. Man sollte für das Kriterium auch tatsächlich $c = 0.1$ oder eine noch kleinere Konstante verwenden, da die ersten Iterationen noch sehr stark von der Wahl des

Tabelle 4.12: Iterationsfehler:

Approximative Eigenwerte $\tilde{\lambda}_h$ des Laplace-Operators nach k Arnoldi-Iterationen, $h = 2^{-5}$, Referenzwert $\lambda_h = 19.755068\dots$ (500 Arnoldi-Iterationen), exakter Eigenwert $\lambda = 2\pi^2 = 19.739209\dots$, Residuum $\rho(\tilde{U}_h, \cdot) = a(\tilde{u}_h, \cdot) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, \cdot)$ für $U_h := (u_h, \lambda_h)$, $\tilde{\sigma} := \frac{1}{2}\|u - \tilde{u}_h\|^2$, exakte Eigenfunktionen statt biquadratischer Interpolation verwendet

k	$ \lambda_h - \tilde{\lambda}_h $	$ \rho(\tilde{U}_h, u_h) $	$ \rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h) $	$ \tilde{\sigma} $
1	$2.79 \cdot 10^3$	$7.24 \cdot 10^1$	$2.97 \cdot 10^3$	$9.74 \cdot 10^{-1}$
2	$1.64 \cdot 10^1$	$1.12 \cdot 10^1$	$1.26 \cdot 10^2$	$3.15 \cdot 10^{-1}$
3	$2.61 \cdot 10^{-1}$	$2.59 \cdot 10^{-1}$	$3.81 \cdot 10^0$	$8.77 \cdot 10^{-3}$
4	$9.09 \cdot 10^{-3}$	$9.08 \cdot 10^{-3}$	$1.14 \cdot 10^{-1}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$
5	$9.05 \cdot 10^{-5}$	$9.05 \cdot 10^{-5}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$	$2.74 \cdot 10^{-6}$
6	$7.55 \cdot 10^{-7}$	$7.55 \cdot 10^{-7}$	$1.39 \cdot 10^{-5}$	$1.74 \cdot 10^{-8}$
7	$4.77 \cdot 10^{-9}$	$4.78 \cdot 10^{-9}$	$8.28 \cdot 10^{-8}$	$3.33 \cdot 10^{-10}$
8	$6.54 \cdot 10^{-10}$	$6.53 \cdot 10^{-10}$	$2.78 \cdot 10^{-10}$	$2.31 \cdot 10^{-10}$
9	$3.63 \cdot 10^{-11}$	$3.71 \cdot 10^{-11}$	$3.81 \cdot 10^{-11}$	$2.31 \cdot 10^{-10}$

Zufallsstartvektors z_1 für den Arnoldi-Algorithmus 3.3 abhängen.

Wir haben gesehen, dass das Abbruchkriterium funktioniert. Allerdings ist die Annahme, dass das Restglied $|\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h)|$ im Wesentlichen den Iterationsfehler widerspiegelt, trotzdem nicht ganz richtig. Dies sieht man bei genauerer Betrachtung von Tabelle 4.11: Der tatsächliche Iterationsfehler $|\lambda_h - \tilde{\lambda}_h|$ in der vierten Spalte ist teilweise um mehr als eine Zehnerpotenz kleiner als der Restterm in Spalte fünf. Dies ist in den vorliegenden Fällen natürlich kein Problem für die Anwendung des Abbruchkriteriums, da der Fehler höchstens überschätzt wird. Trotzdem werden in Tabelle 4.12 die auftretenden Terme noch einmal genauer untersucht, wie eben in Abhängigkeit von der Anzahl der Arnoldi-Iterationen auf festem Gitter. Man sieht noch einmal den Iterationsfehler $\lambda_h - \tilde{\lambda}_h$ im Vergleich zu den beiden Termen $\rho(\tilde{U}_h, u_h)$ und $\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h)$.

Wie man sieht, spiegelt das Residuum $\rho(\tilde{U}_h, u_h)$ den Iterationsfehler fast exakt wider, mit Ausnahme der ersten beiden Iterationen, bei denen jedoch auch das Restglied höherer Ordnung $\tilde{\sigma}$ noch zu groß ist. Man sieht aber, dass

$$\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h) \not\approx \rho(\tilde{U}_h, u_h)$$

gilt; die Größenordnungen variieren um mehr als eine Zehnerpotenz. Erst nach ungefähr

Tabelle 4.13: Abbruchkriterium mit biquadratischer Interpolation:

Approximative Eigenwerte $\tilde{\lambda}_h$ des Laplace-Operators nach k Arnoldi-Iterationen, $h = 2^{-5}$, Referenzwert $\lambda_h = 19.755068\dots$ (500 Arnoldi-Iterationen), exakter Eigenwert $\lambda = 2\pi^2 = 19.739209\dots$, Residuum $\rho(\tilde{U}_h, \cdot) = a(\tilde{u}_h, \cdot) - \tilde{\lambda}_h(\tilde{u}_h, \cdot)$ für $U_h := (u_h, \lambda_h)$, $\tilde{\sigma}_h := \frac{1}{2} \|I_{2h}^{(2)} \tilde{u}_h - \tilde{u}_h\|^2$, $q := |\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h)| / |\rho(\tilde{U}_h, I_{2h}^{(2)} \tilde{u}_h - \tilde{u}_h)|$

k	$ \lambda - \tilde{\lambda}_h $	$ \rho(\tilde{U}_h, I_{2h}^{(2)} \tilde{u}_h - \tilde{u}_h) $	$ \lambda_h - \tilde{\lambda}_h $	$ \rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h) $	q	$ \tilde{\sigma}_h $
1	$2.18 \cdot 10^3$	$8.80 \cdot 10^1$	$2.18 \cdot 10^3$	$3.75 \cdot 10^3$	42	$9 \cdot 10^{-2}$
2	$2.60 \cdot 10^0$	$1.17 \cdot 10^0$	$2.58 \cdot 10^0$	$3.21 \cdot 10^1$	27	$3 \cdot 10^{-4}$
3	$5.08 \cdot 10^{-2}$	$2.92 \cdot 10^{-4}$	$3.50 \cdot 10^{-2}$	$5.27 \cdot 10^{-1}$	180	$6 \cdot 10^{-6}$
4	$1.67 \cdot 10^{-2}$	$1.54 \cdot 10^{-2}$	$8.62 \cdot 10^{-4}$	$7.15 \cdot 10^{-3}$	0.46	$1 \cdot 10^{-6}$
5	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.21 \cdot 10^{-5}$	$2.37 \cdot 10^{-4}$	0.01	$1 \cdot 10^{-6}$
6	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$2.63 \cdot 10^{-7}$	$1.79 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-6}$
7	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.33 \cdot 10^{-8}$	$2.80 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$
8	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$7.31 \cdot 10^{-10}$	$6.93 \cdot 10^{-10}$	$4 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-6}$
9	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$3.77 \cdot 10^{-11}$	$3.86 \cdot 10^{-11}$	$2 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-6}$

neun Iterationen stimmen alle drei Werte im Wesentlichen überein, hier ist allerdings auch schon $\tilde{u}_h \approx u_h$. Wie bereits erwähnt, beobachtet man jedoch

$$\rho(\tilde{U}_h, \tilde{u}_h) \geq \rho(\tilde{U}_h, u_h),$$

so dass der Fehler höchstens überschätzt wird und die Rechnung etwas später abgebrochen wird. Da dies trotz Zufallsschwankungen in allen bisherigen Rechnungen der Fall war, kann man also sagen, dass das Abbruchkriterium in dem vorliegenden Fall trotzdem gut funktioniert.

Als nächstes ist zu klären, wie gut das Abbruchkriterium funktioniert, wenn anstelle der exakten Eigenfunktion die biquadratische Interpolation des berechneten Eigenvektors verwendet wird. Die Ergebnisse analog zu Tabelle 4.11 sind in Tabelle 4.13 zu sehen. (Da es sich um zwei verschiedene Berechnungen handelt, stimmen aufgrund der zufälligen Wahl des Startvektors beispielsweise die Eigenwertfehler in den beiden Tabellen nicht überein.) Hier gilt es zu beachten, dass die ersten Arnoldi-Iterationen im Wesentlichen den Zufalls-Startvektor widerspiegeln und somit die biquadratische Interpolierende $I_{2h}^{(2)} \tilde{u}_h$ (genau wie \tilde{u}_h) noch nicht als sinnvolle Approximation der exakten Lösung u betrachtet

werden kann. Man erwartet also, dass nach den ersten Iterationen

$$\|I_{2h}^{(2)}\tilde{u}_h - \tilde{u}_h\| < \|u - \tilde{u}_h\|$$

gilt. Dies hat zwei Folgen: Zum einen sieht man durch Vergleichen der Tabellen 4.11 und 4.13, dass hier

$$|\rho(\tilde{U}_h, I_{2h}^{(2)}\tilde{u}_h - \tilde{u}_h)| \leq |\rho(\tilde{U}_h, u - \tilde{u}_h)|$$

gilt. Dies ist analog zu oben für das Abbruchkriterium nicht problematisch, da es nur einen größeren Quotienten q und damit höchstens einen späteren Abbruch zur Folge hat, was man auch an Tabelle 4.13 sieht. Schlimmstenfalls werden hierdurch größere Kosten verursacht, jedoch keine geringere Genauigkeit. Zum anderen sieht man an den letzten beiden Spalten der Tabellen 4.12 und 4.13, dass bis zum fünften Iterationsschritt

$$|\tilde{\sigma}_h| < |\tilde{\sigma}|$$

gilt. Dies suggeriert einen kleineren Fehler als tatsächlich vorhanden, hat jedoch keinen direkten Einfluss auf das Abbruchkriterium. Allerdings muss man beachten, dass nicht wie im Fall exakter Eigenfunktionen bei kleinem $|\tilde{\sigma}_h|$ der Eigenwertfehler gut durch das Residuum $|\rho(\tilde{U}_h, I_{2h}^{(2)}\tilde{u}_h - \tilde{u}_h)|$ angezeigt wird.

Man sieht insgesamt, dass auch bei biquadratischer Interpolation das Abbruchkriterium noch gut funktioniert, der Abbruch würde hier analog zu oben nach dem fünften Iterationsschritt stattfinden.

Der Aufwand für einen Arnoldi-Iterationsschritt beträgt im Wesentlichen eine Matrix-Vektor-Multiplikation. Um das Abbruchkriterium zu überprüfen, ist ungefähr derselbe Aufwand wie für einen Arnoldi-Schritt nötig, wobei ein gewisser Mehraufwand dadurch entsteht, dass hier komplexe Eigenwerte vorhanden sein können, wohingegen das Aufstellen der Hessenberg-Matrix noch im Reellen erfolgt.

Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass das Abbruchkriterium gut funktioniert, wobei die Ergebnisse nach sehr wenigen Iterationsschritten noch nicht ganz verlässlich sind. Insbesondere bei Verwendung von biquadratischer Interpolation anstelle der exakten Eigenfunktionen ist bei Abbruch nach wenigen Iterationsschritten Vorsicht geboten. Aufgrund der Zufallsschwankungen sollte man das Abbruchkriterium (4.5) eher mit einer kleineren Konstante c anwenden, so dass man keinesfalls zu früh abbricht. Möglicherweise ist es sinnvoll, eine Mindestanzahl an Iterationen vorzugeben.

4.2 Ein gekoppeltes System

Mit der Konvektions-Diffusions-Gleichung wurde bisher nur eine skalare Gleichung betrachtet. Um den Systemfall zu untersuchen, betrachten wir folgende gekoppelte Variante der Konvektions-Diffusions-Gleichung:

$$\begin{aligned} Lu_0 + \alpha u_1 &= \lambda u_0, \\ Lu_1 + \beta u_0 &= \lambda u_1, \end{aligned} \tag{4.6}$$

wobei wieder $L := -\nu\Delta + \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \cdot \nabla$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Falls $\tilde{\lambda}$ die Eigenwerte des Konvektions-Diffusions-Operators sind, so sind die Eigenwerte von (4.6) gerade $\tilde{\lambda} \pm \sqrt{\alpha\beta}$.

Tabelle 4.14: Eigenwerte im Systemfall:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda = 8.837454\dots$ des gekoppelten Systems mit $\alpha = 10, \beta = 13$ und $\nu = c_1 = c_2 = 1$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten

h	N	λ_h	$\lambda_h - \lambda$
2^{-4}	289	8.8913	$5.39 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	1089	8.8509	$1.34 \cdot 10^{-2}$
2^{-6}	4225	8.8408	$3.36 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	16641	8.8382	$8.40 \cdot 10^{-4}$
Ordnung			$\mathcal{O}(h^2)$

Tabelle 4.15: Komplexe Eigenwerte:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda = 20.239208\dots \pm 11.401754\dots i$ mit $\alpha = -10, \beta = 13$ und $\nu = c_1 = c_2 = 1$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten

h	N	λ_h	$ \lambda_h - \lambda $
2^{-4}	289	$20.2931 \pm 11.4018i$	$5.39 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	1089	$20.2526 \pm 11.4018i$	$1.34 \cdot 10^{-2}$
2^{-6}	4225	$20.2425 \pm 11.4018i$	$3.36 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	16641	$20.2400 \pm 11.4018i$	$8.40 \cdot 10^{-4}$
Ordnung			$\mathcal{O}(h^2)$

Zunächst wurde untersucht, ob die Ordnung $\mathcal{O}(h^2)$ auch im gekoppelten Fall beobachtet werden kann. Dies ist tatsächlich der Fall, wie man an Tabelle 4.14 erkennen kann. Es wurden die Parameter $\alpha = 10, \beta = 13$ und $\nu = c_1 = c_2 = 1$ verwendet und jeweils 100 Arnoldi-Iterationen durchgeführt.

Anhand des Systems (4.6) lassen sich jedoch noch einige andere interessante Fälle untersuchen. Wählt man α und β mit entgegengesetzten Vorzeichen, so erhält man komplexe Eigenwerte. Auch diese werden mit dem vorgestellten Verfahren sehr gut approximiert, wie man an Tabelle 4.15 sieht. Es wurden dieselben Parameter wie in 4.14 verwendet, nur $\alpha = -10$ statt $\alpha = 10$.

Tabelle 4.16: Negative Eigenwerte:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda = -4.760791\dots$ mit $\alpha = \beta = 25$ und $\nu = c_1 = c_2 = 1$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten

h	N	λ_h	$ \lambda_h - \lambda $
2^{-4}	289	-4.7069	$5.39 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	1089	-4.7473	$1.34 \cdot 10^{-2}$
2^{-6}	4225	-4.7574	$3.36 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	16641	-4.7600	$8.40 \cdot 10^{-4}$
Ordnung			$\mathcal{O}(h^2)$

Schließlich ist noch der Fall interessant, wenn die Eigenwerte negativ werden, also der Fall $\sqrt{\alpha\beta} > \tilde{\lambda}$. Hierfür wählen wir $\alpha = \beta = 25$ und $\nu = c_1 = c_2 = 1$; die Ergebnisse sind in Tabelle 4.16 dargestellt. Man sieht, dass auch negative Eigenwerte mit unserem Löser gut approximiert werden.

4.3 Die Burgers-Gleichung

Als nächsten Testfall betrachten wir die zweidimensionale Burgers-Gleichung

$$\begin{aligned} -\nu\Delta\hat{v} + \hat{v} \cdot \nabla\hat{v} &= 0 \quad \text{in } \Omega := (0, 2) \times (0, 1) \\ \hat{v} &= \{x_2, 0\} \quad \text{auf } \Gamma_{\text{fest}} \cup \Gamma_{\text{ein}}, \quad \partial_n\hat{v} = 0 \quad \text{auf } \Gamma_{\text{aus}}, \end{aligned}$$

mit $\Gamma_{\text{fest}} = \{x_2 = 0\} \cup \{x_2 = 1\}$, $\Gamma_{\text{ein}} = \{x_1 = 0\}$, $\Gamma_{\text{aus}} = \{x_1 = 2\}$ und Viskosität $\nu \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Linearisierung um die Basislösung $\hat{v} = \{x_2, 0\}$ (*Couette-Strömung*) ergibt

$$\begin{aligned} -\nu\Delta v_1 + x_2\partial_1 v_1 + v_2 &= \lambda v_1 \\ -\nu\Delta v_2 + x_2\partial_1 v_2 &= \lambda v_2 \quad \text{in } \Omega, \\ v &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_D, \quad \partial_n v = 0 \quad \text{auf } \Gamma_N. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Hierbei ist der Dirichlet-Rand gegeben als $\Gamma_D = \Gamma_{\text{fest}}$ oder $\Gamma_D = \Gamma_{\text{fest}} \cup \Gamma_{\text{ein}}$, analog der Neumann-Rand als $\Gamma_N = \Gamma_{\text{ein}} \cup \Gamma_{\text{aus}}$ oder $\Gamma_N = \Gamma_{\text{aus}}$. Wir bezeichnen im Folgenden die Eigenfunktionen des Systems (4.7) analog zu bisher mit $u = \{u^1, u^2\}$.

Aufgrund der Kopplung der zweiten Komponente in die erste Gleichung ist das Eigenwertproblem entartet, denn: Sei $\{u^1, u^2\}$ eine Eigenfunktion der Burgers-Gleichung zum Eigenwert λ . Angenommen $u^2 \neq 0$ (und somit $u^2 \neq u^1 \neq 0$), so ist λ auch ein Eigenwert zur Eigenfunktion $\{u^2, 0\}$. Ein zugehöriger Hauptvektor ist $\{u^2, u^2\}$, wie man leicht nachrechnet. Im Fall $u^2 = 0$ ist analog $\{u^1, u^1\}$ ein Hauptvektor. Insbesondere gibt es also keine nicht entarteten Eigenwerte und es gilt für jeden Eigenwert $m_a \geq 2$. Das Spektrum des Operators $-\nu\Delta + x_2\partial_1$ und das der Burgers-Gleichung sind (bei selben Randvorgaben) dieselben, was mit den berechneten Ergebnissen übereinstimmt.

Wie in [HR06] fügen wir einen additiven Zusatzterm $h^2 v_1$ zur zweiten Gleichung hinzu. Man erhält dieselbe Situation wie im Beispiel in Kapitel 2.4.1. Der Eigenwert λ spaltet sich in zwei einfache Eigenwerte auf, die für $h \rightarrow 0$ mit der Ordnung $\mathcal{O}(h)$ gegen den ursprünglichen Eigenwert λ konvergieren: Ein Eigenwert ist in diesem Fall $\lambda \pm h$, eine Eigenfunktion $\{u^1, 0\}$ wird zu $\{u^1, \pm hu^1\}$, wie man leicht nachrechnet.

Mit dem Funktionenraum

$$H_0^1(\Omega; \Gamma_D)^2 := \{v \in H^1(\Omega)^2 : v = 0 \text{ auf } \Gamma_D\}$$

lautet die schwache Formulierung von (4.7): Finde $\lambda \in \mathbb{C}$ und $0 \neq v = \{v_1, v_2\} \in H_0^1(\Omega; \Gamma_D)^2$ mit $\partial_n v|_{\Gamma_N} = 0$, so dass

$$\begin{aligned} \nu(\nabla v_1, \nabla \varphi_1) + x_2(\partial_1 v_1, \varphi_1) + (v_2, \varphi_1) &= \lambda(v_1, \varphi_1) \quad \forall \varphi_1 \in H_0^1(\Omega; \Gamma_D), \\ \nu(\nabla v_2, \nabla \varphi_2) + x_2(\partial_1 v_2, \varphi_2) + (h^2(v_1, \varphi_2)) &= \lambda(v_2, \varphi_2) \quad \forall \varphi_2 \in H_0^1(\Omega; \Gamma_D). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Wir sind im Hinblick auf die Anwendung bei realen Strömungen insbesondere an den Ergebnissen für kleine Viskosität interessiert, im Folgenden wurde meistens $\nu = 0.01$ gewählt. Hierfür wurde der Transport durch Hinzufügen von *Stromliniendiffusion* stabilisiert: Es wurde im Fall $x_2 \neq 0$ der Stabilisierungsterm

$$\delta_K (x_2 \partial_1 v, x_2 \partial_1 \varphi) \quad \text{mit } \delta_K = \min \left\{ \frac{h^2}{\nu}, \frac{h}{x_2} \right\}$$

zur schwachen Formulierung (4.8) hinzugefügt, wobei mit $\varphi = \{\varphi_1, \varphi_2\}$ die Testfunktion bezeichnet sei. Für das duale Problem wurde dieselbe Stabilisierung verwendet.

Betrachtet wurden die beiden Fälle $\Gamma_D = \Gamma_{\text{fest}}$ und $\Gamma_D = \Gamma_{\text{fest}} \cup \Gamma_{\text{ein}}$, also freier Ausströmrand und Neumann- beziehungsweise Dirichletrand als Einströmprofil.

4.3.1 Freier Ein- und Ausströmrand

Betrachten wir zunächst die Burgers-Gleichung mit freiem Ein- und Ausströmrand, ohne Zusatzterm $h^2 v_1$. Wie in [GVCA04] beobachtet man eine Aufspaltung des Spektrums in einen *Diffusions-Zweig* und einen *Konvektions-beeinflussten Zweig*. Der Diffusions-Zweig ist dadurch charakterisiert, dass die zugehörigen Eigenfunktionen nicht von x_1 abhängen, so dass der Transportterm verschwindet; die Eigenwerte sind daher reell und proportional zu ν . Außerdem haben diese Eigenwerte die Eigenschaft, dass sie unabhängig von der Länge des kanalförmigen Gebietes Ω sind. Getestet wurde diese Tatsache jeweils auf einem Kanal der Länge zehn, zwei und eins. Die kleinsten Eigenwerte auf den verschiedenen Gebieten stimmen bis auf Maschinengenauigkeit überein.

Die übrigen Eigenwerte, für deren Eigenfunktionen der Transportterm ungleich null ist, gehören zum Konvektions-beeinflussten Zweig. Diese ändern sich mit der Länge des Kanals, was auch in den Berechnungen beobachtet wurde. In den folgenden Berechnungen wurde mit einem Kanal der Länge zwei gerechnet.

Für den Fall freien Ein- und Ausströmrandes können wir einige Eigenpaare und Hauptvektoren explizit angeben, die (doppelten) Eigenwerte sind für $j \in \mathbb{N}$ gegeben durch

$$\lambda_j = \nu j^2 \pi^2, \quad (4.9)$$

mit den zugehörigen Eigenvektoren

$$u_j = \{\sin(j\pi x_2), 0\} \quad (4.10)$$

sowie den Hauptvektoren

$$w_j = \{\sin(j\pi x_2), \sin(j\pi x_2)\}. \quad (4.11)$$

Diese Eigenpaare gehören offensichtlich zum Diffusions-Zweig. Ein doppelter Eigenwert λ_j spaltet sich bei numerischer Berechnung normalerweise in zwei verschiedene diskrete Eigenwerte auf, wie in Kapitel 2.4.1 bereits erwähnt. Wir bezeichnen ab jetzt die erste und zweite Approximation an λ_j mit $\lambda_{h,j}^{(1)}$ und $\lambda_{h,j}^{(2)}$, geordnet nach ihren Realteilen:

$$\operatorname{Re}(\lambda_{h,j}^{(1)}) \leq \operatorname{Re}(\lambda_{h,j}^{(2)}). \quad (4.12)$$

Analog bezeichnen wir die zugehörigen Eigenfunktionen mit $u_{h,j}^{(1)}$ etc. Konjugiert komplexe Eigenwertpaare fassen wir zusammen zu $\lambda_{h,j}^{(i)} = \operatorname{Re}(\lambda_{h,j}^{(i)}) \pm \operatorname{Im}(\lambda_{h,j}^{(i)})$ ($i = 1, 2$). Das arithmetische Mittel wird mit $\lambda_{h,j} := (\lambda_{h,j}^{(1)} + \lambda_{h,j}^{(2)})/2$ bezeichnet, mit der zugehörigen Eigenfunktion $u_{h,j}$. Mit $\alpha_j := \operatorname{ld}((\lambda_{2h,j} - \lambda_{h,j})/(\lambda_{h,j} - \lambda_{h/2,j}))$ erhält man die Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h^{\alpha_j})$ bei der Berechnung der Eigenwerte λ_j , wie man leicht nachrechnet.

In Tabelle 4.17 sieht man exemplarisch die Approximation der ersten beiden (doppelten) Eigenwerte λ_1 und λ_2 . Wie man am Eigenwertfehler in der letzten Spalte sieht, werden die exakten Eigenwerte schon auf dem größten Gitter sehr gut approximiert. Die Konvergenz der ersten Approximation $\lambda_{h,j}^{(1)}$ gegen λ_1 mit der optimalen Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h^2)$ ist sehr schön zu sehen.

Normalerweise konvergiert im entarteten Fall nur das arithmetische Mittel der approximierten Eigenwerte mit der optimalen Ordnung, wohingegen die einzelnen Approximationen mit der reduzierten Ordnung $\mathcal{O}(h^{2/(\alpha+1)})$ konvergieren, wobei mit α der Defekt bezeichnet sei (siehe Satz 3.1). Im vorliegenden Fall kann jedoch der kleinste Eigenwert auch im

Tabelle 4.17: Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei freiem Einströmrand:

Berechnung der kleinsten Eigenwerte der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, $\alpha_j^{(i)} := \text{ld}((\lambda_{2h,j}^{(i)} - \lambda_{h,j}^{(i)}) / (\lambda_{h,j}^{(i)} - \lambda_{h/2,j}^{(i)}))$ ($i = 1, 2$), mit freiem Ein- und Ausströmrand, ohne Zusatzterm $h^2 v_1$

(a) $\lambda_1 = \nu\pi^2 = 0.098696\dots$				
h	N	$\lambda_{h,1}^{(1)}$	$\alpha_1^{(1)}$	$ \lambda_{h,1}^{(1)} - \lambda_1 $
2^{-4}	561	0.09901355		$3.17 \cdot 10^{-4}$
2^{-5}	2145	0.09877536	2.00	$7.93 \cdot 10^{-5}$
2^{-6}	8385	0.09871587	2.00	$1.98 \cdot 10^{-5}$
2^{-7}	33153	0.09870095		$4.90 \cdot 10^{-6}$
Ordnung				$\mathcal{O}(h^2)$

(b) $\lambda_2 = 4\nu\pi^2 = 0.394784\dots$				
h	N	$\lambda_{h,2}^{(1)}$	$\alpha_2^{(1)}$	$ \lambda_{h,2}^{(1)} - \lambda_2 $
2^{-4}	561	0.399883226		$5.10 \cdot 10^{-3}$
2^{-5}	2145	0.396054147	2.01	$1.27 \cdot 10^{-3}$
2^{-6}	8385	0.395101365	2.00	$3.17 \cdot 10^{-4}$
2^{-7}	33153	0.394863407		$7.92 \cdot 10^{-5}$
Ordnung				$\mathcal{O}(h^2)$

Diskreten als doppelt angesehen werden, da die beiden Approximationen $\lambda_{h,j}^{(1)}$ und $\lambda_{h,j}^{(2)}$ sehr nahe beieinander liegen (auf dem feinsten Gitter stimmen bei der Approximation des kleinsten Eigenwerts zwölf Nachkommastellen überein), so dass

$$\lambda_{h,j}^{(1)} \approx \lambda_{h,j}^{(2)} \approx \lambda_{h,j}$$

gilt. Daher beobachtet man bei arithmetischem Mittel und einzelnen approximativen Eigenwerten dieselbe Konvergenzordnung. Wir unterscheiden im Folgenden daher nur noch dann zwischen $\lambda_{h,j}$ und $\lambda_{h,j}^{(i)}$, falls tatsächlich ein signifikanter Unterschied vorliegt.

Die zugehörigen Eigenfunktionen wurden auf $\|u_h\| = \|u_h^*\| = 1$ normiert, so dass das Skalarprodukt (u_h, u_h^*) als Hinweis auf Entartung verwendet werden kann (siehe Kapitel 2.4.1). Anhand von Tabelle 4.18 sieht man, dass dieses Skalarprodukt bei den ersten beiden Eigenwerten tatsächlich sehr klein ist, wie aufgrund der Entartung zu erwarten. Interessant ist, dass das Problem auch im Diskreten entartet ist, was man daran erkennt,

dass das Skalarprodukt unter Gitterverfeinerung nicht mehr kleiner wird. (Ein weiterer Grund hierfür könnte sein, dass die Berechnung noch nicht ausiteriert ist; dies ist jedoch nicht der Fall, bei einer größeren Anzahl von Arnoldi-Iterationen beobachtet man dasselbe Ergebnis). Man erhält außerdem nur einen Eigenvektor, da die beiden Approximationen für den kleinsten doppelten Eigenwert praktisch übereinstimmen, wie bereits erwähnt. Mit analytischen Vorkenntnissen über das Eigenwertproblem erhält man also die algebraische Vielfachheit $m_a(\lambda_h) = 2$. Wie in Abschnitt 3.4.2 beschrieben, liefert der Algorithmus die geometrische Vielfachheit $m_g(\lambda_h) = 1$. In diesem Fall lässt sich also auch ganz direkt die Entartung feststellen.

Tabelle 4.18: Entartung im Diskreten bei freiem Einströmrand:

Entartung der kleinsten Eigenwerte $\lambda_1 = \nu\pi^2 = 0.098696\dots$ und $\lambda_2 = 4\nu\pi^2 = 0.394784\dots$ der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, Normierung $\|u_h\| = \|u_h^*\| = 1$, mit freiem Ein- und Ausströmrand, ohne Zusatzterm h^2v_1

h	N	$ (u_{h,1}, u_{h,1}^*) $	$ (u_{h,2}, u_{h,2}^*) $
2^{-4}	561	$6.96 \cdot 10^{-9}$	$3.09 \cdot 10^{-8}$
2^{-5}	2145	$8.63 \cdot 10^{-9}$	$1.62 \cdot 10^{-8}$
2^{-6}	8385	$7.91 \cdot 10^{-9}$	$2.86 \cdot 10^{-8}$
2^{-7}	33153	$1.21 \cdot 10^{-8}$	$6.99 \cdot 10^{-8}$

In der Praxis kommt es jedoch meistens vor, dass das Problem im Kontinuierlichen entartet ist, im Diskreten jedoch nicht mehr, wie in Kapitel 2.4.1 beschrieben (vergleiche [Heu02]). Außerdem beobachtet man im Allgemeinen für die einzelnen Approximationen eine reduzierte Konvergenzordnung und erst für das arithmetische Mittel die volle Ordnung von $\mathcal{O}(h^2)$, siehe Satz 3.1.

Um diese Situation zu simulieren, fügen wir (wie bereits erwähnt) einen additiven Zusatzterm h^2v_1 in die zweite Zeile der Burgers-Gleichung (4.7) ein, wobei $h > 0$ zunächst fest sei:

$$\begin{aligned}
 -\nu\Delta v_1 + x_2\partial_1 v_1 + v_2 &= \lambda v_1 \\
 -\nu\Delta v_2 + x_2\partial_1 v_2 + h^2v_1 &= \lambda v_2 \quad \text{in } \Omega, \\
 v &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_D, \quad \partial_n v = 0 \quad \text{auf } \Gamma_N.
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Hierdurch spalten sich die doppelten Eigenwerte λ_j in zwei einfache Eigenwerte auf, wodurch man auch zwei Eigenvektoren anstelle eines Eigen- und eines Hauptvektors erhält; das Problem ist bei $h > 0$ somit nicht mehr entartet. Die exakten Eigenwerte und -funktionen des Diffusions-Zweigs sind bei festgehaltenem Zusatzterm $h^2 v_1$ gegeben durch

$$\lambda_j^{(i)} = \lambda_j \pm h, \quad (i = 1, 2), \quad (4.14)$$

$$u_j^{(i)} = \{\sin(j\pi x_2), \pm h \cdot \sin(j\pi x_2)\}. \quad (4.15)$$

In der Anwendung gilt $h \rightarrow 0$, wodurch die Eigenpaare (4.14), (4.15) offensichtlich gegen die Eigenpaare (4.9), (4.10) konvergieren. Auf festem Gitter mit $h > 0$ ist das Problem somit nicht entartet, wohingegen das Problem im Limes nur entartete Eigenwerte besitzt. Aufgrund der Addition beziehungsweise Subtraktion von h in den Eigenwerten (4.14) konvergieren die Eigenwerte nur mit der reduzierten Ordnung von $\mathcal{O}(h)$ statt $\mathcal{O}(h^2)$. Betrachtet man jedoch das arithmetische Mittel der beiden Eigenwerte $\lambda_j^{(1)}$ und $\lambda_j^{(2)}$, so heben sich diese beiden Zusatzterme gerade wieder weg, es gilt $\lambda_j = (\lambda_j^{(1)} + \lambda_j^{(2)})/2$. Analog verwendet man auch im Diskreten das arithmetische Mittel $\lambda_{h,j} = (\lambda_{h,j}^{(1)} + \lambda_{h,j}^{(2)})/2$ als von h nicht mehr explizit abhängige Approximation an den gesuchten Eigenwert λ_j .

Tabelle 4.19 zeigt, dass diese Überlegungen auch in der Praxis sehr gut zu sehen sind. Die Konvergenzordnung der berechneten Eigenwerte ist sehr genau $\mathcal{O}(h)$, wohingegen das arithmetische Mittel mit $\mathcal{O}(h^2)$ konvergiert. Man sieht ebenfalls, dass das arithmetische Mittel den exakten Eigenwert $\lambda_1 = \nu\pi^2$ beziehungsweise $\lambda_2 = 4\nu\pi^2$ sehr viel besser approximiert als jeder der beiden gesplitteten Eigenwerte, wie zu erwarten war.

Betrachten wir nun die zugehörigen Eigenfunktionen. Die zweite Komponente der gesplitteten Eigenfunktionen (4.15) konvergiert jeweils gegen null für $h \rightarrow 0$ mit der Ordnung $\mathcal{O}(h)$. Diese Tatsache beobachtet man auch bei den approximativen Eigenfunktionen. Analog wird bei den adjungierten diskreten Eigenfunktionen die erste Komponente klein. Aus diesem Grund und weil man weiß, dass das Eigenwertproblem im Limes entartet ist, erwartet man unter Gitterverfeinerung ein zunehmend kleineres Skalarprodukt $(u_h^{(i)}, u_h^{(i)*})$, $i = 1, 2$ (im Grenzwert gilt aufgrund der Entartung $(u, u^*) = 0$).

Dass dies der Fall ist, lässt sich an Tabelle 4.20 ablesen. Hier sieht man exemplarisch, dass die beiden Skalarprodukte der gesplitteten Eigenfunktionen zum doppelten ersten Eigenwert gegen null konvergieren; dasselbe Phänomen wurde auch beim zweiten und dritten (doppelten) Eigenwert beobachtet. Die Konvergenzordnung von $\mathcal{O}(h)$ ist deutlich

Tabelle 4.19: Gesplittete Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei freiem Einströmrand:

Berechnung der kleinsten Eigenwerte der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, $\alpha_j := \text{ld}((\lambda_{2h,j} - \lambda_{h,j})/(\lambda_{h,j} - \lambda_{h/2,j}))$, bei freiem Ein- und Ausströmrand, mit Zusatzterm $h^2 v_1$

(a) $\lambda_1 = \nu\pi^2 = 0.098696\dots$

h	N	$\lambda_{h,1}^{(1)}$	$\alpha_1^{(1)}$	$\lambda_{h,1}^{(2)}$	$\alpha_1^{(2)}$	$\frac{\lambda_{h,1}^{(1)} + \lambda_{h,1}^{(2)}}{2}$	α_1
2^{-4}	561	0.03651347		0.16151353		0.09901350	
2^{-5}	2145	0.06752534	0.99	0.13002534	1.01	0.09877534	2.00
2^{-6}	8385	0.08309086	1.00	0.11434086	1.00	0.09871586	2.00
2^{-7}	33153	0.09088850	1.00	0.10651350	1.00	0.09870100	2.00
2^{-8}	131841	0.09479104	1.00	0.10260354	1.00	0.09869729	2.00
2^{-9}	525825	0.09674323		0.10064948		0.09869636	
Ord.		$\mathcal{O}(h)$		$\mathcal{O}(h)$		$\mathcal{O}(h^2)$	

(b) $\lambda_2 = 4\nu\pi^2 = 0.394784\dots$

h	N	$\lambda_{h,2}^{(1)}$	$\alpha_2^{(1)}$	$\lambda_{h,2}^{(2)}$	$\alpha_2^{(2)}$	$\frac{\lambda_{h,2}^{(1)} + \lambda_{h,2}^{(2)}}{2}$	α_2
2^{-4}	561	0.337383		0.462383		0.399883	
2^{-5}	2145	0.364804	0.90	0.427304	1.08	0.396054	2.01
2^{-6}	8385	0.379476	0.95	0.410726	1.04	0.395101	2.00
2^{-7}	33153	0.387051	0.98	0.402676	1.02	0.394864	1.97
2^{-8}	131841	0.390897	0.99	0.398710	1.01	0.394803	2.11
2^{-9}	525825	0.392836		0.396742		0.394789	
Ord.		$\mathcal{O}(h)$		$\mathcal{O}(h)$		$\mathcal{O}(h^2)$	

zu erkennen. In der dritten und fünften Spalte noch einmal die Konvergenz der beiden berechneten gesplitteten Eigenwerte $\lambda_{h,1}^{(1)}$ und $\lambda_{h,1}^{(2)}$, die (von oben beziehungsweise unten) gegen denselben doppelten Eigenwert $\lambda_1 = \nu\pi^2 = 0.098696\dots$ konvergieren. Die reduzierte Konvergenzordnung von $\mathcal{O}(h)$ ist auch hier wieder deutlich zu erkennen.

Dieselben Tests wie in Tabelle 4.19 und 4.20 wurden auch für die höheren Eigenwerte durchgeführt. Für den 4. bis 7. (doppelten) Eigenwert wurde qualitativ dasselbe Verhalten beobachtet, wobei die Konvergenzordnungen allerdings nicht ganz so schön zu sehen waren. Das arithmetische Mittel konvergiert weiterhin klar mit $\mathcal{O}(h^2)$, aber

Tabelle 4.20: Entartung im Kontinuierlichen bei freiem Einströmrand:

Test auf Entartung des kleinsten Eigenwerts $\lambda_1 = \nu\pi^2 = 0.098696\dots$ der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, Normierung $\|u_h^{(i)}\| = \|u_h^{(i)*}\| = 1$ ($i = 1, 2$), mit freiem Ein- und Ausströmrand und Zusatzterm h^2v_1

h	N	$\lambda_{h,1}^{(1)} - \lambda_1$	$ (u_{h,1}^{(1)}, u_{h,1}^{(1)*}) $	$\lambda_{h,1}^{(2)} - \lambda_1$	$ (u_{h,1}^{(2)}, u_{h,1}^{(2)*}) $
2^{-4}	561	$-6.22 \cdot 10^{-2}$	$3.54 \cdot 10^{-2}$	$6.28 \cdot 10^{-2}$	$3.54 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	2145	$-3.12 \cdot 10^{-2}$	$1.41 \cdot 10^{-2}$	$3.13 \cdot 10^{-2}$	$1.41 \cdot 10^{-2}$
2^{-6}	8385	$-1.56 \cdot 10^{-2}$	$5.71 \cdot 10^{-3}$	$1.56 \cdot 10^{-2}$	$5.71 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	33153	$-7.81 \cdot 10^{-3}$	$2.41 \cdot 10^{-3}$	$7.82 \cdot 10^{-3}$	$2.41 \cdot 10^{-3}$
Ord.		$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h)$

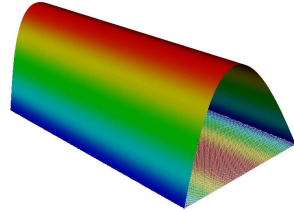
die Konvergenzordnungen der gesplitteten Eigenwerte sind nicht ganz so deutlich zu sehen. Ebenso wird das Skalarprodukt $(u_h^{(i)}, u_h^{(i)*})$ der Eigenfunktionen bei Normierung $\|u_h^{(i)}\| = \|u_h^{(i)*}\| = 1$ ($i = 1, 2$) zwar kleiner, aber ohne klar erkennbare Konvergenzordnung. Ein möglicher Grund wäre, dass die weiter hinten im Spektrum liegenden Eigenwerte mit Krylow-Raum-Methoden immer schlechter approximiert werden als die kleinsten, wie bereits erwähnt. Da sich jedoch mit mehr als 100 Arnoldi-Iterationen kein wesentlicher Unterschied feststellen lässt, kann man diese Vermutung ausschließen. Zum anderen könnte die Berechnung der ersten drei doppelten Eigenwerte auch deswegen unproblematischer sein, weil diese etwas vom übrigen Spektrum entfernt liegen, wohingegen die nächsten Eigenwerte sehr dicht nebeneinander liegen, wie wir später noch sehen werden.

Als nächstes wollen wir das Aussehen der Eigenfunktionen der Burgers-Gleichung untersuchen. In Abbildung 4.3 ist die 1., 2. und 4. Eigenfunktion dargestellt, hier wieder ohne Zusatzterm h^2v_1 berechnet. Die ersten und zweiten primalen Eigenfunktionen approximieren offensichtlich die exakten Eigenfunktionen (4.10) und gehören zum Diffusions-Zweig. Die vierte Eigenfunktion gehört zum Konvektions-beeinflussten Zweig und tritt in ähnlicher Form auch bei Dirichlet-Einströmrand auf, genau wie der zugehörige Eigenwert, wie wir in Kapitel 4.3.2 sehen werden. Bei allen betrachteten primalen Eigenfunktionen ist die zweite Komponente fast null, bei allen dualen die erste, so dass

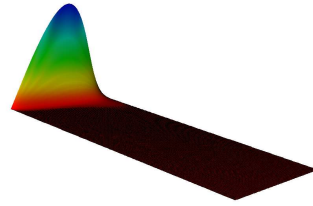
$$(u_h, u_h^*) \approx 0$$

als Kriterium für Entartung auch im Diskreten erfüllt ist, wie bereits erwähnt.

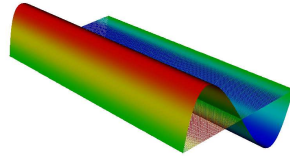
Dass die dualen Eigenfunktionen qualitativ so anders als die primalen aussehen, hat fol-



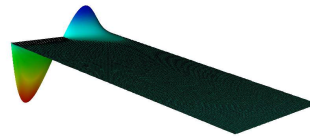
(a) 1. primale Eigenfunktion, 1. Komponente:
 $\sin(\pi x_2)$



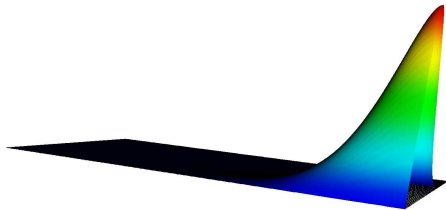
(b) 1. duale Eigenfunktion, 2. Komponente



(c) 2. primale Eigenfunktion, 1. Komponente:
 $\sin(2\pi x_2)$



(d) 2. duale Eigenfunktion, 2. Komponente



(e) 4. primale Eigenfunktion, 1. Komponente



(f) 4. duale Eigenfunktion, 2. Komponente

Abbildung 4.3: Die 1., 2. und 4. primale bzw. duale Eigenfunktion der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ bei freiem Ein- und Ausströmrand

genden Grund: Das adjungierte Eigenwertproblem hat die umgekehrte Transportrichtung. Durch partielle Integration kann man herleiten, dass die adjungierten Eigenfunktionen

auf dem Ein- und Ausströmrand *Robin-Randbedingungen* erfüllen müssen:

$$\begin{aligned} -\nu \Delta v_1 - x_2 \partial_1 v_1 &= \lambda v_1 \\ -\nu \Delta v_2 - x_2 \partial_1 v_2 + v_1 &= \lambda v_2 \quad \text{in } \Omega, \\ v &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_{\text{fest}}, \quad \nu \partial_n v + x_2 n_1 v = 0 \quad \text{auf } \Gamma_{\text{ein}} \cup \Gamma_{\text{aus}}. \end{aligned}$$

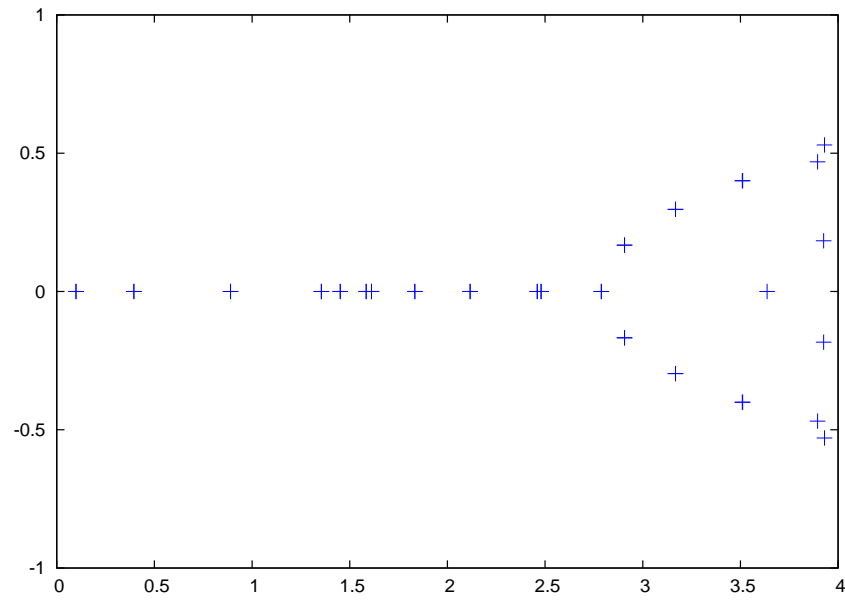
Aus diesen unterschiedlichen Randbedingungen resultiert das unterschiedliche Aussehen der primalen und dualen Eigenfunktionen in Abbildung 4.3. Eine duale Eigenfunktion mit einem qualitativ ähnlichen Aussehen wie in 4.3(b) wurde auch in [Ber99] (Seite 86) beobachtet.

Schließlich betrachten wir das Spektrum der Burgers-Gleichung. In Abbildung 4.4 sieht man die Eigenwerte bei Viskosität $\nu = 0.01$, mit Gitterweite $h = 2^{-6}$ berechnet. Hierbei wurde in Abbildung 4.4(b) im Vergleich zu Abbildung 4.4(a) mit Zusatzterm $h^2 v_1$ gerechnet. Man erkennt deutlich, dass je zwei diskrete Eigenwerte in Abbildung 4.4(b) denselben Eigenwert approximieren und durch Aufspaltung der Eigenwerte in Abbildung 4.4(a) zustande kommen. Letztere sind jeweils doppelt, was man mit bloßem Auge nicht mehr erkennen kann.

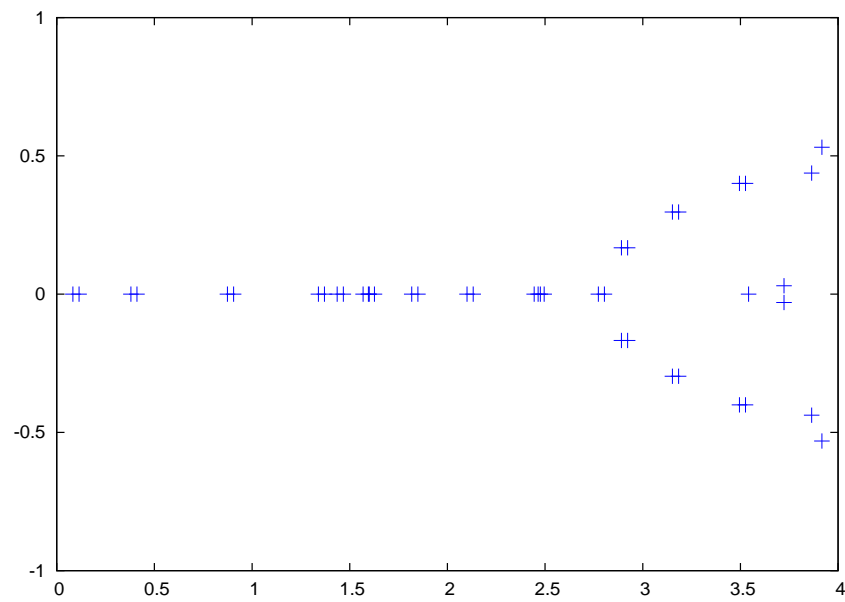
Dieselben Phänomene beobachtet man in Abbildung 4.5. Hier wurde auf dem feineren Gitter mit Gitterweite $h = 2^{-7}$ gerechnet. Unter Gitterverfeinerung rücken jeweils zwei gesplittete Eigenwerte immer näher zusammen, was man auch an Abbildung 4.4(b) im Vergleich zu 4.5(b) sehen kann. Die kleinsten drei Paare von Eigenwerten sind nur bei freiem Einströmrand vorhanden und gehören zum Diffusions-Zweig, sie können durch (4.9) exakt angegeben werden. Die nächsten Eigenwerte sind auch bei Dirichlet-Einströmrand und freiem Ausströmrand noch vorhanden, wie wir in Kapitel 4.3.2 noch sehen werden. Man kann also insbesondere anhand des Spektrums nicht direkt erkennen, ob ein Eigenwert zum Diffusions-Zweig oder zum Konvektions-beeinflussten Zweig gehört; hierfür müssen die Eigenfunktionen zu Hilfe genommen werden (siehe Abbildung 4.3).

4.3.2 Freier Ausströmrand

In diesem Abschnitt führen wir dieselben Rechnungen und Tests durch wie in Abschnitt 4.3.1, wobei hier statt freiem Ein- und Ausströmrand nur freier Ausströmrand und Dirichlet-Einströmprofil vorgegeben wird.

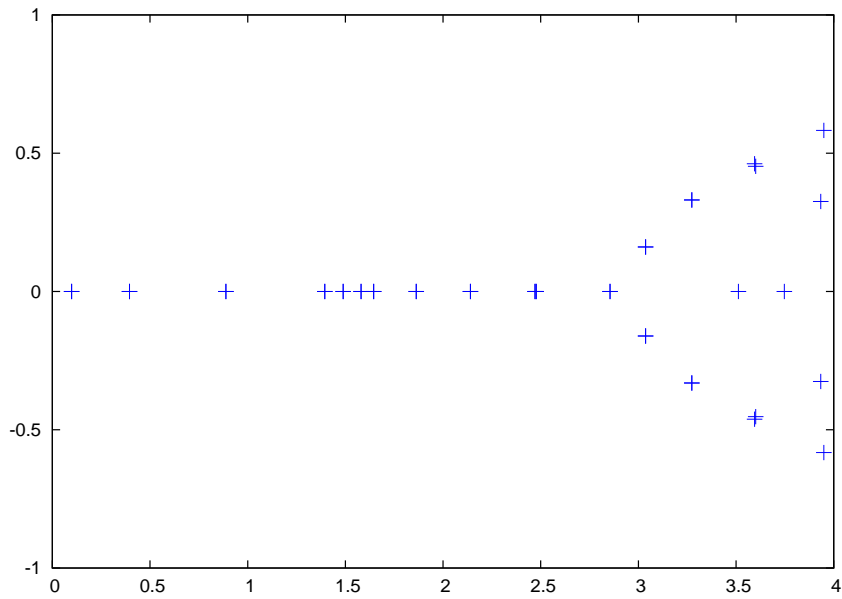


(a) Ohne Zusatzterm $h^2 v_1$

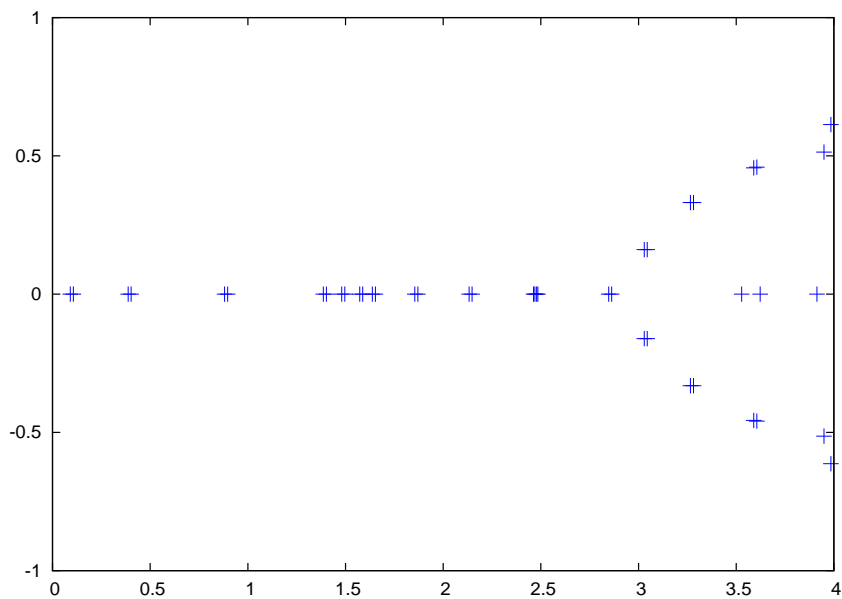


(b) Mit Zusatzterm $h^2 v_1$

Abbildung 4.4: Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ und $h = 2^{-6}$ bei freiem Ein- und Ausströmrand



(a) Ohne Zusatzterm $h^2 v_1$



(b) Mit Zusatzterm $h^2 v_1$

Abbildung 4.5: Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ und $h = 2^{-7}$ bei freiem Ein- und Ausströmrand

Die Eigenpaare sind für diesen Fall nicht analytisch bekannt. Aus [Heu02] entnimmt man, dass für den kleinsten Eigenwert $\lambda_1 \approx 2.1228$ gefunden wurde, wobei im Unterschied zu den bisherigen Rechnungen einerseits mit größerer Viskosität $\nu = 0.1$ gerechnet wurde, andererseits auf dem Einheitsquadrat. In Tabelle 4.21 sieht man, dass mit diesen Modifikationen auch hier derselbe Eigenwert berechnet wurde.

Tabelle 4.21: Vergleichsrechnung mit $\nu = 0.1$ und $\Omega = (0, 1)^2$:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda_1 = 2.122772\dots$ der Burgers-Gleichung mit größerer Viskosität $\nu = 0.1$ auf dem Einheitsquadrat unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 20 Iterationsschritten, mit Dirichlet-Einströmrand und freiem Ausströmrand, ohne Zusatzterm $h^2 v_1$

h	N	$\lambda_{h,1}$	$ \lambda_{h,1} - \lambda_1 $
2^{-3}	81	2.099282	$2.35 \cdot 10^{-2}$
2^{-4}	289	2.106541	$1.62 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	1089	2.117900	$4.87 \cdot 10^{-3}$
2^{-6}	4225	2.121531	$1.24 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	16641	2.122491	$2.81 \cdot 10^{-4}$
2^{-8}	66049	2.122735	$3.73 \cdot 10^{-5}$
2^{-9}	263169	2.122772	
Ordnung			$\mathcal{O}(h^2)$

Kehren wir nun zur bisherigen Aufgabenstellung zurück, also $\nu = 0.01$ und $\Omega = (0, 2) \times (0, 1)$. Zunächst führen wir wieder die Eigenwertberechnung ohne Zusatzterm $h^2 v_1$ durch. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.22 zu sehen.

In der dritten Spalte sieht man die berechneten Eigenwerte. Da in diesem Fall die Eigenwerte und -funktionen nicht analytisch bekannt sind, ist unklar, wie gut die dargestellten Approximationen tatsächlich sind. Insbesondere lässt sich nicht eindeutig feststellen, ob es sich bei den komplexen Anteilen, die unter Gitterverfeinerung auftreten, um Störterme handelt oder nicht. Vermutlich handelt es sich nur um das in Kapitel 2.4.1 beschriebene Phänomen, dass ein doppelter Eigenwert sich in zwei diskrete Approximationen aufspaltet - das arithmetische Mittel ist in diesem Fall wieder reell. Man sieht außerdem, dass sich die Eigenwertapproximationen unter Gitterverfeinerung bis $h = 2^{-7}$ noch sehr stark ändern, ganz im Gegensatz zum Fall freien Einströmrandes in Tabelle 4.17, wo man schon auf dem größten Gitter eine sehr hohe Approximationsgenauigkeit beobachtet. Die Konvergenzordnung von $\mathcal{O}(h^2)$ ist aber auch hier auf den feineren Gittern wieder sehr schön erkennbar.

Tabelle 4.22: Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei Dirichlet-Einströmrand:
 Berechnung des kleinsten Eigenwerts der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, $\alpha_j := \text{ld}((\lambda_{2h,j} - \lambda_{h,j})/(\lambda_{h,j} - \lambda_{h/2,j}))$, mit Dirichlet-Einströmrand und freiem Ausströmrand, ohne Zusatzterm h^2v_1

h	N	$\lambda_{h,1}$	α_1
2^{-4}	561	0.970866	
2^{-5}	2145	1.202976	0.64
2^{-6}	8385	1.351528	1.91
2^{-7}	33153	$1.390956 \pm 4 \cdot 10^{-6}i$	2.01
2^{-8}	131841	$1.400765 \pm 3.04 \cdot 10^{-4}i$	2.00
2^{-9}	525825	$1.403214 \pm 1.28 \cdot 10^{-4}i$	
Ordnung		$\mathcal{O}(h^2)$	

Tabelle 4.23: Entartung im Diskreten bei Dirichlet-Einströmrand:

Test auf Entartung bei der Berechnung des kleinsten Eigenwerts der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, Normierung $\|u_h\| = \|u_h^*\| = 1$, mit Dirichlet-Einströmrand und freiem Ausströmrand, ohne Zusatzterm h^2v_1

h	N	$ (u_{h,1}, u_{h,1}^*) $
2^{-4}	561	$7.07 \cdot 10^{-10}$
2^{-5}	2145	$3.58 \cdot 10^{-10}$
2^{-6}	8385	$8.04 \cdot 10^{-11}$
2^{-7}	33153	$3.78 \cdot 10^{-10}$
2^{-8}	131841	$3.99 \cdot 10^{-9}$
2^{-9}	525825	$5.34 \cdot 10^{-9}$

In Tabelle 4.23 sieht man das Skalarprodukt der primalen und dualen Eigenfunktion. Wie zu erwarten, ist es aufgrund der Entartung sehr klein. Analog zu Tabelle 4.18 wird das Skalarprodukt unter Gitterverfeinerung nicht kleiner, da das Eigenwertproblem auch im Diskreten entartet ist.

Als nächstes führen wir wie im letzten Unterkapitel einen Zusatzterm h^2v_1 ein. Wieder spaltet sich jeder doppelte Eigenwert λ in die zwei einfachen Eigenwerte $\lambda \pm h$ auf. Die gesplitteten Eigenwerte sollten wieder mit der reduzierten Ordnung $\mathcal{O}(h)$ konvergieren, das arithmetische Mittel mit der vollen Ordnung $\mathcal{O}(h^2)$. Man sieht die numerische Überprüfung in Tabelle 4.24, wobei weiterhin die Notation aus (4.12) verwendet wird.

Tabelle 4.24: Gesplittete Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei Dirichlet-Einströmrand:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda_1 = 1.403214\dots$ der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, $\lambda_{h,1} := (\lambda_{h,1}^{(1)} + \lambda_{h,1}^{(2)})/2$, mit Dirichlet-Einströmrand, freiem Ausströmrand und Zusatzterm $h^2 v_1$

h	N	$\lambda_{h,1}^{(1)}$	$\lambda_1 - \lambda_{h,1}^{(1)}$	$\lambda_{h,1}^{(2)}$	$\lambda_1 - \lambda_{h,1}^{(2)}$	$\lambda_{h,1}$	$\lambda_1 - \lambda_{h,1}$
2^{-4}	561	0.90837	$4.95 \cdot 10^{-1}$	1.03337	$3.70 \cdot 10^{-1}$	0.970865	$4.32 \cdot 10^{-1}$
2^{-5}	2145	1.17173	$2.31 \cdot 10^{-1}$	1.23423	$1.70 \cdot 10^{-1}$	1.202976	$2.00 \cdot 10^{-1}$
2^{-6}	8385	1.33590	$6.73 \cdot 10^{-2}$	1.36715	$3.61 \cdot 10^{-2}$	1.351529	$5.17 \cdot 10^{-2}$
2^{-7}	33153	1.38314	$2.01 \cdot 10^{-2}$	1.39877	$4.45 \cdot 10^{-3}$	1.390955	$1.23 \cdot 10^{-2}$
2^{-8}	131841	1.39686	$6.36 \cdot 10^{-3}$	1.40467	$-1.46 \cdot 10^{-3}$	1.400765	$2.45 \cdot 10^{-3}$
2^{-9}	525825	1.40126	$1.95 \cdot 10^{-3}$	1.40517	$-1.95 \cdot 10^{-3}$	1.403214	
Ord.			?		?		$\mathcal{O}(h^2)$

Hier sind die Ergebnisse nicht so schön deutlich wie in der entsprechenden Tabelle 4.19 bei freiem Einströmrand. Das arithmetische Mittel in der vorletzten Spalte stimmt zwar wieder weitgehend mit den Ergebnissen ohne Zusatzterm $h^2 v_1$ in Tabelle 4.22 überein, was die Theorie bestätigt. Die Konvergenzordnung des arithmetischen Mittels von $\mathcal{O}(h^2)$ lässt sich auch noch relativ gut erkennen. Die Konvergenzordnung der gesplitteten Eigenwerte von $\mathcal{O}(h)$ lässt sich jedoch nicht mehr beobachten. Dies hat folgenden Grund:

Es gilt $\lambda_{h,j}^{(i)} \approx \lambda_{h,j} \pm h$ ($i = 1, 2, j \in \mathbb{N}$). Der Eigenwertfehler $\lambda_j - \lambda_{h,j}^{(i)}$ des gesplitteten Eigenwerts setzt sich also aus dem Eigenwertfehler $\lambda_j - \lambda_{h,j}$ ohne Aufspaltung und aus dem künstlichen additiven oder subtraktiven Störterm h zusammen. Im Fall freien Ein- und Ausströmrandes war das arithmetische Mittel schon auf dem größten Gitter eine sehr gute Approximation an den exakten Eigenwert, es galt $|\lambda_1 - \lambda_{h,1}| \approx 10^{-4}$ schon bei Gitterweite $h = 2^{-4}$, wie man an Tabelle 4.19 sieht. Im Vergleich dazu war der Einfluss des Störterms h absolut dominant, es war selbst auf dem feinsten Gitter $h \gg |\lambda_1 - \lambda_{h,1}|$. Daher war hier auch die Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h)$ so deutlich zu beobachten.

Im vorliegenden Fall bei freiem Ausströmrand und Dirichlet-Einströmrand sieht das jedoch ganz anders aus: Das arithmetische Mittel ändert sich noch stark unter Gitterverfeinerung, dementsprechend ist der Fehler beispielsweise auf dem größten Gitter bei ungefähr 10^{-1} und damit deutlich dominant im Vergleich zum anderen Fehleranteil h . Daher kommt auch der Vorzeichenwechsel beim Wechsel von $h = 2^{-7}$ zu 2^{-8} : Es ist $h < \lambda_1 - \lambda_{h,1}$ bis $h = 2^{-7}$, aber ab $h = 2^{-8}$ gilt $h > \lambda_1 - \lambda_{h,1}$.

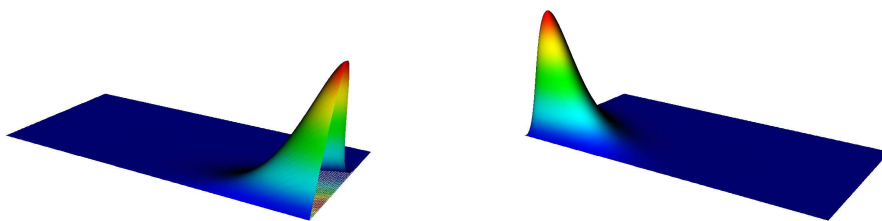
An der letzten Spalte fällt außerdem auf, dass die arithmetischen Mittel der gesplitteten Eigenwerte keinen komplexen Anteil mehr haben. Ansonsten stimmen sie weitgehend mit den Eigenwerten ohne Aufspaltung aus Tabelle 4.22 überein. Dies deutet darauf hin, dass es sich bei den Imaginärteilen ohne Aufspaltung tatsächlich um Störterme handelt.

Tabelle 4.25: Entartung im Kontinuierlichen bei Dirichlet-Einströmrand:

Skalarprodukt der primalen und dualen Eigenfunktionen zum kleinsten Eigenwert der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, Normierung $\|u_h^{(1)}\| = \|u_h^{(1)*}\| = 1$, mit Dirichlet-Einströmrand, freiem Ausströmrand und Zusatzterm $h^2 v_1$

h	N	$\lambda_{h,1}^{(1)}$	$(u_{h,1}^{(1)}, u_{h,1}^{(1)*})$
2^{-4}	561	0.908365	$4.97 \cdot 10^{-4}$
2^{-5}	2145	1.171727	$1.01 \cdot 10^{-5}$
2^{-6}	8385	1.335904	$7.73 \cdot 10^{-7}$
2^{-7}	33153	1.383143	$2.48 \cdot 10^{-7}$
2^{-8}	131841	1.396859	$1.07 \cdot 10^{-7}$
2^{-9}	525825	1.401261	$5.32 \cdot 10^{-8}$
Ordnung			$\mathcal{O}(h)$

Als nächstes sieht man Tabelle 4.25 wieder den Test auf Entartung anhand des Skalarprodukts aus primaler und dualer Eigenfunktion, hier mit Zusatzterm $h^2 v_1$. Wie zu erwarten, geht das Skalarprodukt bei Normierung $\|u_h^{(1)}\| = \|u_h^{(1)*}\| = 1$ gegen null. Auf den feineren Gittern ist sogar die Ordnung $\mathcal{O}(h)$ gut zu sehen, obwohl dies bei den zugehörigen Eigenwerten nicht der Fall war.



(a) 1. primale Eigenfunktion, 1. Komponente (b) 1. duale Eigenfunktion, 2. Komponente

Abbildung 4.6: Die 1. primale bzw. duale Eigenfunktion der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ bei freiem Ausströmrand

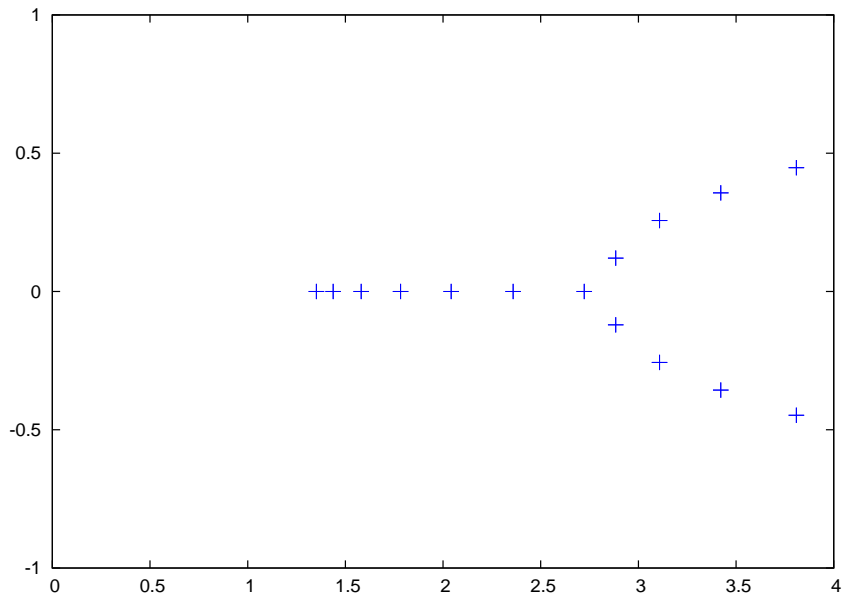
Abbildung 4.6 zeigt die erste primale beziehungsweise duale Eigenfunktion der Burgers-Gleichung. Hier sieht man bei der primalen Eigenfunktion die erste Komponente, bei der dualen die zweite, die jeweils andere Komponente ist vernachlässigbar klein (ohne Zusatzterm h^2v_1). Daher ist auch im Diskreten das Kriterium für Entartung erfüllt, es gilt wie bei freiem Einströmrand $(u_h, u_h^*) \approx 0$.

Schließlich ist in Abbildung 4.7 und 4.8 das Spektrum der Burgers-Gleichung bei freiem Ausströmrand dargestellt, wie im letzten Kapitel auf einem Gitter mit Gitterweite $h = 2^{-6}$ beziehungsweise $h = 2^{-7}$ berechnet und jeweils einmal mit und ohne Zusatzterm h^2v_1 . Man kann analog zu 4.4 und 4.5 deutlich die Aufspaltung der Eigenwerte durch den Zusatzterm erkennen, jeweils zwei Eigenwerte in 4.7(b) entsprechen einem Eigenwert in 4.7(a), ebenso in 4.8. Unter Gitterverfeinerung rücken die gesplitteten Eigenwerte näher zusammen. Die Eigenwerte ohne Zusatzterm sind wieder jeweils doppelt. Vergleicht man Abbildung 4.8(a) mit der entsprechenden Abbildung 4.5(a) bei freiem Einströmrand, so sieht man, dass unter anderem die ersten drei doppelten Eigenwerte bei Dirichlet-Einströmprofil wegfallen. Genauer gesagt, es fallen alle Eigenwerte des Diffusionszweigs weg, die in (4.9) analytisch angegeben wurden. Der kleinste Eigenwert bei Dirichlet-Einströmrand entspricht dem vierten doppelten Eigenwert bei freiem Einströmrand.

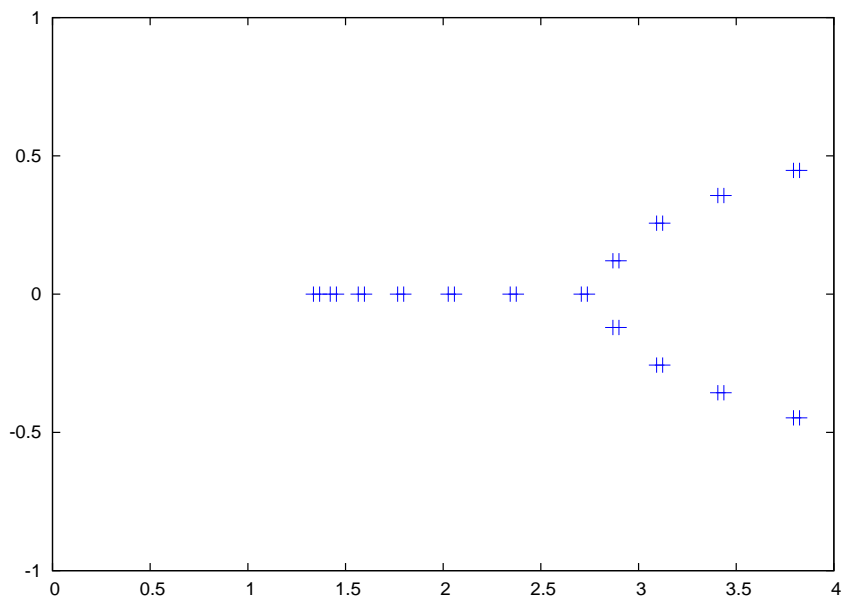
Insgesamt beobachtet man also bei Dirichlet-Einströmprofil und freiem Ausströmrand qualitativ dieselben Phänomene wie bei freiem Ein- und Ausströmrand. Beim Spektrum fällt der Diffusions-Zweig weg; dies ist die einzige signifikante Änderung. Durch die Aufspaltung der Eigenwerte beobachtet man eine verringerte Konvergenzordnung, die jedoch nicht so deutlich als $\mathcal{O}(h)$ identifiziert werden kann wie bei freiem Ein- und Ausströmrand. Die volle Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h^2)$ wird dann wieder beim arithmetischen Mittel beobachtet.

4.3.3 A posteriori Fehlerschätzung bei Entartung im Kontinuierlichen

Als nächstes überprüfen wir den a posteriori Fehlerschätzer bei der Burgers-Gleichung, dieses Mal aufgrund der Entartung des Ausgangsproblems in der allgemeingültigen Form aus Satz 3.2: Die primalen und dualen Eigenfunktionen werden jeweils auf eins normiert, so dass die Skalarprodukte (u, u^*) und (u_h, u_h^*) in (3.9) jetzt im Allgemeinen ungleich eins sind. Im Folgenden wurde überall analog zu bisher die biquadratische Interpolation $I_{2h}^{(2)}u_h$ des berechneten Eigenvektors u_h als Approximation für die exakte Eigenfunktion

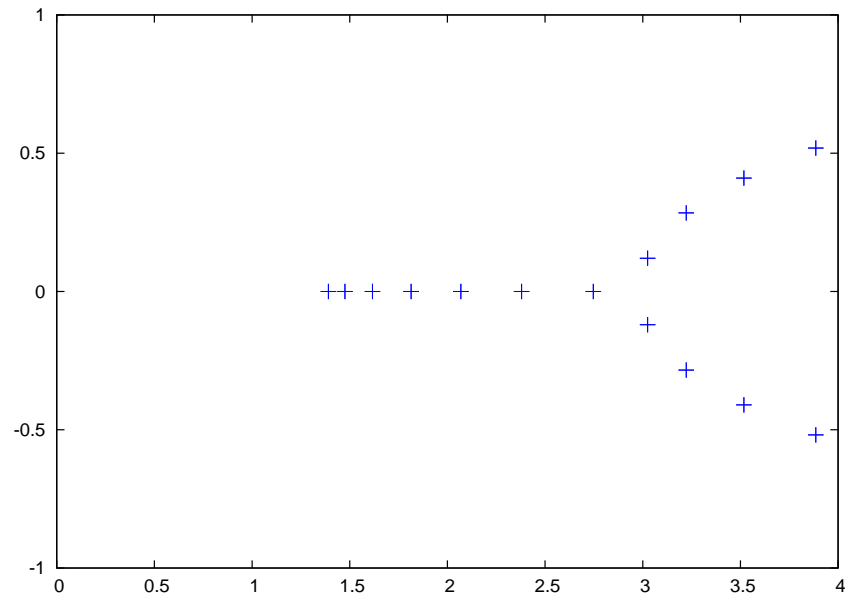


(a) ohne Zusatzterm $h^2 v_1$

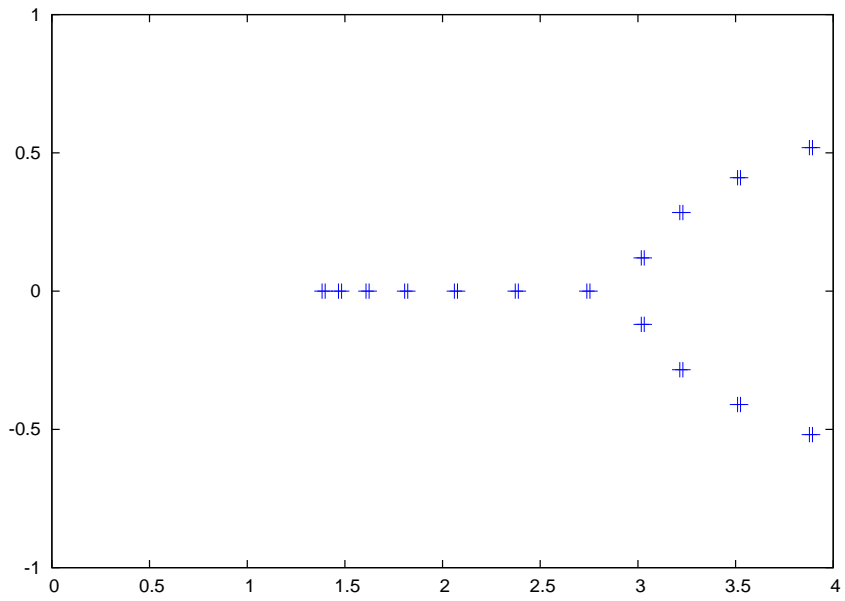


(b) mit Zusatzterm $h^2 v_1$

Abbildung 4.7: Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ und $h = 2^{-6}$ bei freiem Ausströmrand und Dirichlet-Einströmrand



(a) ohne Zusatzterm $h^2 v_1$



(b) mit Zusatzterm $h^2 v_1$

Abbildung 4.8: Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ und $h = 2^{-7}$ bei freiem Ausströmrand und Dirichlet-Einströmrand

u verwendet, ebenso bei der adjungierten Eigenfunktion u^* . Der Übersichtlichkeit halber schreiben wir im Folgenden trotzdem (u, u^*) statt $(I_{2h}^{(2)}u_h, I_{2h}^{(2)}u_h^*)$. (Bei Aufspaltung in $u_h^{(1)}$ und $u_h^{(2)}$ wird aus dem Kontext klar, welche berechnete Eigenfunktion für die Interpolation verwendet wurde.)

Tabelle 4.26: A posteriori Fehlerschätzer bei Entartung im Kontinuierlichen:

Berechnung der kleinsten Eigenwerte der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten bei freiem Ein- und Ausströmrand, Normierung $\|u_h^{(i)}\| = \|u_h^{(i)*}\| = 1$, $\eta_h^{(i)} := \frac{1}{2}(\rho_h^{(i)} + \rho_h^{(i)*}) / (\frac{1}{2}s + \frac{1}{2}s_h^{(i)} - \sigma_h^{(i)})$, mit Skalarprodukten $s := (u, u^*)$ und $s_h^{(i)} := (u_h^{(i)}, u_h^{(i)*})$, $I_{\text{eff}}^{(i)} := |(\lambda^{(i)} - \lambda_h^{(i)}) / \eta_h^{(i)}|$ ($i = 1, 2$), mit biquadratischer Interpolation und Zusatzterm h^2v_1

$$(a) \lambda_1 = \nu\pi^2 = 0.098696\dots, \lambda_1^{(1)} = \lambda_1 - h$$

h	N	$ \lambda_{h,1}^{(1)} - \lambda_1^{(1)} $	$ \eta_{h,1}^{(1)} $	$I_{\text{eff}}^{(1)}$	$ \sigma_{h,1}^{(1)} $	$\frac{1}{2} s_1 $	$\frac{1}{2} s_{h,1}^{(1)} $
2^{-4}	561	$3.17 \cdot 10^{-4}$	$3.16 \cdot 10^{-4}$	1.01	$2.38 \cdot 10^{-6}$	$1.70 \cdot 10^{-2}$	$1.77 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	2145	$7.93 \cdot 10^{-5}$	$7.90 \cdot 10^{-5}$	1.00	$1.65 \cdot 10^{-7}$	$6.83 \cdot 10^{-3}$	$7.03 \cdot 10^{-3}$
2^{-6}	8385	$1.98 \cdot 10^{-5}$	$1.98 \cdot 10^{-5}$	1.00	$1.02 \cdot 10^{-8}$	$2.80 \cdot 10^{-3}$	$2.85 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	33153	$4.95 \cdot 10^{-6}$	$4.95 \cdot 10^{-6}$	1.00	$5.70 \cdot 10^{-10}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$	$1.21 \cdot 10^{-3}$
Ord.		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$		$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h)$

$$(b) \lambda_2 = 4\nu\pi^2 = 0.394784\dots, \lambda_2^{(2)} = \lambda_2 + h$$

h	N	$ \lambda_{h,2}^{(2)} - \lambda_2^{(2)} $	$ \eta_{h,2}^{(2)} $	$I_{\text{eff}}^{(2)}$	$ \sigma_{h,2}^{(2)} $	$\frac{1}{2}s_2$	$\frac{1}{2}s_{h,2}^{(2)}$
2^{-4}	561	$5.10 \cdot 10^{-3}$	$4.95 \cdot 10^{-3}$	1.03	$6.36 \cdot 10^{-6}$	$1.77 \cdot 10^{-2}$	$1.80 \cdot 10^{-2}$
2^{-5}	2145	$1.27 \cdot 10^{-3}$	$1.26 \cdot 10^{-3}$	1.01	$5.84 \cdot 10^{-7}$	$6.96 \cdot 10^{-3}$	$7.13 \cdot 10^{-3}$
2^{-6}	8385	$3.17 \cdot 10^{-4}$	$3.17 \cdot 10^{-4}$	1.00	$3.75 \cdot 10^{-8}$	$2.90 \cdot 10^{-3}$	$2.94 \cdot 10^{-3}$
2^{-7}	33153	$7.93 \cdot 10^{-5}$	$7.92 \cdot 10^{-5}$	1.00	$2.27 \cdot 10^{-9}$	$1.22 \cdot 10^{-3}$	$1.24 \cdot 10^{-3}$
Ord.		$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$		$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h)$

Gerechnet wurde zunächst wieder mit einem additiven Zusatzterm h^2v_1 in der zweiten Gleichung, es liegt also der Fall eines entarteten kontinuierlichen und eines nicht-entarteten diskreten Problems vor. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.26 dargestellt, man sieht hier exemplarisch die erste Approximation $\lambda_{h,1}^{(1)}$ des ersten Eigenwerts sowie die zweite Approximation $\lambda_{h,2}^{(2)}$ des zweiten bei freiem Ein- und Ausströmrand. In der zweiten Spalte sieht man nun die Konvergenz des berechneten Eigenwerts gegen den gesplitteten exakten Eigenwert (4.14) bei festgehaltenem Zusatzterm h^2v_1 , also gegen $\lambda_j^{(i)} = \lambda_j \pm h$ ($i, j = 1, 2$) anstelle von λ_j . Daher beobachten wir hier im Unterschied zu Tabelle 4.20 wieder die

Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h^2)$ statt $\mathcal{O}(h)$.

Wie man sieht, funktioniert der allgemein formulierte Fehlerschätzer aus 3.2 im vorliegenden Fall sehr gut. Der Effektivitätsindex ist ziemlich genau eins. In den letzten beiden Spalten sieht man die beiden neuen Terme $(u, u^*)/2$ und $(u_h^{(1)}, u_h^{(1)*})/2$. Beide Skalarprodukte konvergieren wie zu erwarten mit $\mathcal{O}(h)$ gegen null.

In dem Fall, dass das Ausgangsproblem entartet ist, das diskrete jedoch nicht, funktioniert der Fehlerschätzer also einwandfrei.

4.3.4 A posteriori Fehlerschätzung bei Entartung im Diskreten

Im Vergleich zum letzten Abschnitt testen wir nun den Fehlerschätzer aus Satz 3.2 an dem richtig entarteten Eigenwertproblem zur Burgers-Gleichung (4.7) ohne Zusatzterm $h^2 v_1$, also in dem Fall, in dem auch das diskrete Eigenwertproblem entartet ist. Sehr problematisch ist hierbei, dass alle auftretenden Skalarprodukte aufgrund der diskreten Entartung sehr klein werden, so dass man auf den feineren Gittern sofort an die Grenzen der Maschinengenauigkeit stößt.

Tabelle 4.27: A posteriori Fehlerschätzer bei Entartung im Diskreten:

Berechnung des kleinsten Eigenwerts $\lambda = \nu\pi^2 = 0.098696\dots$ der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ bei freiem Ein- und Ausströmrand unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 40 Iterationsschritten, Normierung $\|u_h\| = \|u_h^*\| = 1$, $l_h := (\lambda - \lambda_h) \cdot (\frac{1}{2}(u, u^*) + \frac{1}{2}(u_h, u_h^*) - \sigma_h^{(i)})$, $\bar{\rho}_h := \frac{1}{2}(\rho_h + \rho_h^*)$, $I_{\text{eff}} := |l_h/\bar{\rho}_h|$, mit biquadratischer Interpolation, ohne Zusatzterm $h^2 v_1$

h	N	$ \lambda_h - \lambda $	$ l_h $	$ \bar{\rho}_h $	I_{eff}	σ_h	$\frac{1}{2} (u_h, u_h^*) $
2^{-4}	561	$3.17 \cdot 10^{-4}$	$9.09 \cdot 10^{-13}$	$9.04 \cdot 10^{-13}$	1.01	$1.96 \cdot 10^{-13}$	$1.46 \cdot 10^{-9}$
2^{-5}	2145	$7.93 \cdot 10^{-5}$	$3.77 \cdot 10^{-13}$	$2.66 \cdot 10^{-14}$	14.2	$5.66 \cdot 10^{-14}$	$2.41 \cdot 10^{-9}$

Man sieht die Ergebnisse in Tabelle 4.27, hier nur exemplarisch für die Gitterweiten 2^{-4} und 2^{-5} , da der Fehlerschätzer unter weiterer Gitterverfeinerung nur noch schlechter funktionieren kann. Der Fehlerschätzer $\eta_h = \frac{1}{2}(\rho_h + \rho_h^*)/(\frac{1}{2}(u, u^*) + \frac{1}{2}(u_h, u_h^*) - \sigma_h)$ ist hier in der Größenordnung des Eigenwertfehlers, kommt aber durch Division von deutlich kleineren Termen zustande. Um diese Problematik zu verdeutlichen, wurden hier andere Terme als in den bisherigen Tabellen ausgegeben: In der vierten und fünften Spalte sieht

man die Auswertung der linken beziehungsweise rechten Seite der Gleichung (3.9)

$$l_h := (\lambda - \lambda_h) \cdot \left(\frac{1}{2}(u, u^*) + \frac{1}{2}(u_h, u_h^*) - \sigma_h \right)$$

sowie

$$\bar{\rho}_h := \frac{1}{2}(\rho_h + \rho_h^*).$$

Wie man sieht, sind beide Werte schon sehr klein, speziell bei Gitterweite 2^{-5} ist der Effektivitätsindex (der Quotient dieser beiden Werte) daher auch schon sehr schlecht. Insgesamt ist die Anwendung des Fehlerschätzers bei *diskreter* Entartung somit sehr kritisch und man sollte sich auf jeden Fall insbesondere die Einzeltermine anschauen, um die Verlässlichkeit des Fehlerschätzers im Einzelnen zu beurteilen.

Wie bereits erwähnt, tritt der Fall *diskreter* Entartung jedoch in der Praxis fast nie auf, so dass im Allgemeinen der Fehlerschätzer aus Satz 3.2 gut funktioniert.

4.3.5 Einfluss der Viskosität

Im Folgenden wollen wir untersuchen, wie sich die Eigenwerte unter abnehmender Viskosität verhalten. Insbesondere ist es von Interesse, ob die Realteile der Eigenwerte negativ werden, da dies der kritische Fall für die hydrodynamische Stabilität ist.

In Tabelle 4.28 sieht man die Berechnung des kleinsten Eigenwerts unter abnehmendem ν bei freiem Ein- und Ausströmrand, mit Zusatzterm $h^2 v_1$. In der ersten Tabelle 4.28(a) wurde die Viskosität zunächst um eine Zehnerpotenz auf $\nu = 0.001$ verringert. Wie man sieht, treten hier sehr wohl negative Eigenwerte auf, dies liegt jedoch nur an dem Zusatzterm $h^2 v_1$. Nach (4.14) ist der exakte kleinste Eigenwert bei festgehaltenem Zusatzterm gegeben durch $\lambda_1 - h$. Da $\lambda_1 = \nu \pi^2$ proportional zur Viskosität ist, fällt der Einfluss von h mit abnehmendem ν immer stärker ins Gewicht; beispielsweise bei $h = 2^{-4}$ ist $\lambda_1 - h \approx -0.052630$. Man sieht, dass dieser künstlich gestörte Eigenwert bei den Berechnungen sehr gut approximiert wird. Erst bei Gitterweite $h = 2^{-7}$ dominiert wieder der exakte Eigenwert λ_1 über den Einfluss des Störterms und die Eigenwerte sind wieder positiv. Das arithmetische Mittel ist jedoch in jedem Fall positiv.

In der zweiten Tabelle 4.28(b) sind die analogen Ergebnisse für die um eine weitere Zehnerpotenz verringerte Viskosität zu sehen. Hier sind die exakten Eigenwerte ohne Zusatzterm so klein, dass praktisch nur noch der Einfluss des Störterms zu sehen ist.

Tabelle 4.28: Kleinere Viskosität:

Berechnung der kleinsten Eigenwerte der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.001$ bzw. $\nu = 0.0001$ unter gleichmäßiger Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten, mit freiem Ein- und Ausströmrand und Zusatzterm $h^2 v_1$, $\lambda_{h,1} := (\lambda_{h,1}^{(1)} + \lambda_{h,1}^{(2)})/2$

(a) $\nu = 0.001, \lambda_1 = \nu\pi^2 = 0.0098696\dots$

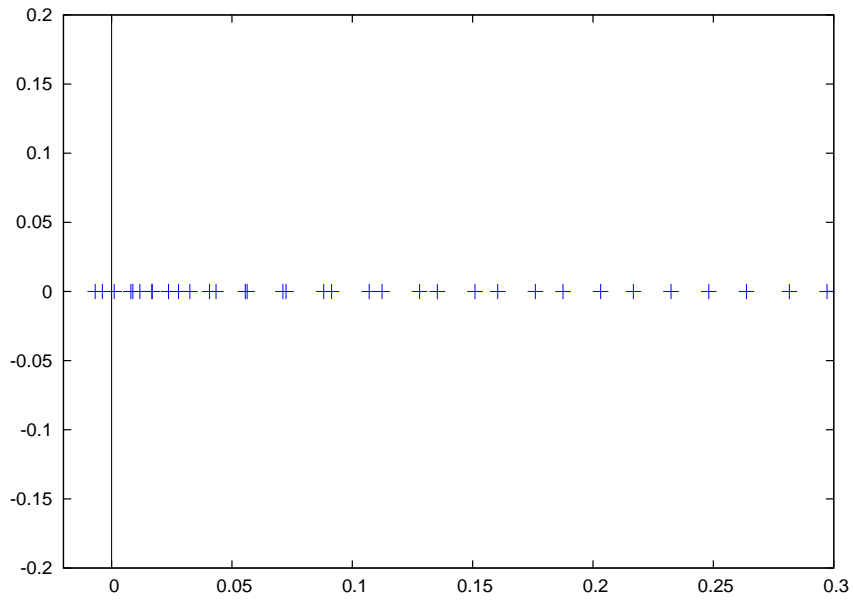
h	N	$\lambda_{h,1}^{(1)}$	$\lambda_{h,1}^{(2)}$	$\lambda_{h,1}$	$ \lambda_1 - \lambda_{h,1} $
2^{-4}	561	-0.05259864	0.07240135	0.0099014	$3.18 \cdot 10^{-5}$
2^{-5}	2145	-0.02137246	0.04112753	0.0098775	$7.90 \cdot 10^{-6}$
2^{-6}	8385	-0.00575341	0.02549659	0.0098716	$2.00 \cdot 10^{-6}$
2^{-7}	33153	0.00205760	0.01768260	0.0098701	$5.00 \cdot 10^{-7}$
Ord.		$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$

(b) $\nu = 0.0001, \lambda_1 = \nu\pi^2 = 0.00098696\dots$

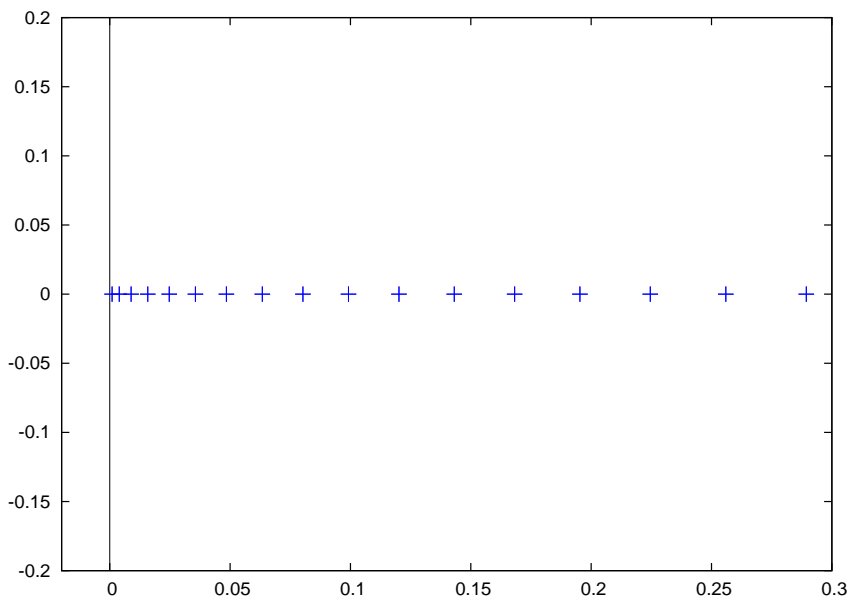
h	N	$\lambda_{h,1}^{(1)}$	$\lambda_{h,1}^{(2)}$	$\lambda_{h,1}$	$ \lambda_1 - \lambda_{h,1} $
2^{-4}	561	-0.06150986	0.06349014	0.0009886	$1.59 \cdot 10^{-6}$
2^{-5}	2145	-0.03026225	0.03223775	0.0009878	$7.90 \cdot 10^{-7}$
2^{-6}	8385	-0.01463784	0.01661216	0.0009872	$2.00 \cdot 10^{-7}$
2^{-7}	33153	-0.00682549	0.00879951	0.0009870	$4.96 \cdot 10^{-8}$
Ord.		$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$

Das arithmetische Mittel stellt jedoch wieder eine sehr gute Approximation an den exakten Eigenwert dar und ist ebenfalls immer positiv. Hierbei ist zu beachten, dass die Eigenwerte immer dichter beieinander liegen, so dass es zunehmend schwieriger wird, die beiden zusammengehörigen Eigenwerte zu identifizieren. Im vorliegenden Fall sind zum Beispiel die beiden kleinsten approximativen Eigenwerte negativ; würde man diese beiden als Approximation desselben betrachten, so käme man fälschlicherweise zu dem Schluss, es lägen negative Eigenwerte vor. In Wirklichkeit stellen diese beiden jedoch die Approximationen an $\lambda_1 - h$ und $\lambda_2 - h$ dar. Natürlich liegt das wiederum daran, dass der künstliche Störterm hier unverhältnismäßig groß ist.

Diesen Effekt sieht man noch einmal deutlich an der Darstellung des Spektrums bei $\nu = 0.0001$ in Abbildung 4.9. In 4.9(a) die Ergebnisse mit Zusatzterm; es sind negative Eigenwerte vorhanden und die Paare von Eigenwerten sind nicht mehr mit bloßem Auge erkennbar. Alle Eigenwerte liegen sehr dicht beieinander, wie man anhand der Skalen erkennen kann. Im Unterschied hierzu die Eigenwerte ohne den Zusatzterm in 4.3.5, wo



(a) mit Zusatzterm $h^2 v_1$ (negative Eigenwerte vorhanden)



(b) ohne Zusatzterm $h^2 v_1$ (alle Eigenwerte sind positiv)

Abbildung 4.9: Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.0001$ und $h = 2^{-7}$ bei freiem Ein- und Ausströmrand

wieder alle Eigenwerte positiven Realteil haben.

Bei Dirichlet-Einströmrand und freiem Ausströmrand funktioniert die Berechnung des kleinsten Eigenwerts aufgrund des Transport-Einflusses nicht mehr so gut. Die Approximation ergab jedoch, dass der kleinste Eigenwert auf jeden Fall deutlich größer als null ist. Wie bei größerer Viskosität sind die kleinsten Eigenwerte bei freiem Ein- und Ausströmrand deutlich kleiner als bei Dirichlet-Einströmprofil.

Insgesamt bleiben also bei der Burgers-Gleichung mit abnehmender Viskosität wie zu erwarten alle Eigenwerte positiv, wobei die kleinsten Eigenwerte jedoch sehr nahe bei Null liegen.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Diskretisierung des Eigenwertproblems mit einem Finite-Elemente-Verfahren und die Lösung des daraus resultierenden diskreten Problems mit dem Arnoldi-Algorithmus beschrieben. A posteriori Fehlerschätzer wurden hergeleitet und für die lokale Gitterverfeinerung sowie als Abbruchkriterium verwendet. Kriterien für die Entartung eines Eigenwertproblems wurden angegeben.

Die theoretischen Resultate wurden an einigen praktischen Beispielen überprüft. Hier zeigte sich, dass die Orthogonalisierung der verwendeten Krylow-Raum-Basis mit dem Householder-Arnoldi deutlich verlässlicher ist als mit dem normalerweise üblichen Arnoldi-modifizierten Gram-Schmidt. Die Berechnung von komplexen, negativen, mehrfachen und entarteten Eigenwerten unsymmetrischer Differentialoperatoren wurde demonstriert. Es stellte sich heraus, dass die Eigenwertberechnungen mit dem vorgestellten Verfahren auf den feineren Gittern sehr rechenzeit- und speicherintensiv sind, was lokale Gitterverfeinerung nötig macht. Anhand der Konvektions-Diffusions-Gleichung wurde gezeigt, dass der a posteriori Fehlerschätzer bei angemessener Anwendung sehr gut den Eigenwertfehler wiedergibt und sich zur lokalen Gitterverfeinerung sowie als Abbruchkriterium eignet. Am Beispiel der Burgers-Gleichung wurden die Kriterien für Entartung getestet. Der Einfluss von verschiedenen Randbedingungen auf das Spektrum wurde untersucht. Es wurde praktisch gezeigt, dass die Realteile der Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei abnehmender Viskosität gegen null gehen, aber positiv bleiben. Der a posteriori Fehlerschätzer für entartete Eigenwerte wurde überprüft. Hier wurde herausgefunden, dass der Fehlerschätzer bei Entartung des *kontinuierlichen* Problems gut funktioniert, solange die *diskrete* Approximation nicht entartet ist.

Offen ist die Frage, wie man Eigenwertberechnungen unter lokaler Gitterverfeinerung durchführen kann, wenn die Basislösung für die Linearisierung auch unter lokaler Gitterverfeinerung berechnet wurde und nicht - wie im vorliegenden Fall - analytisch gegeben ist. Weiter stellt sich die Frage, wie sich das beschriebene Abbruchkriterium in Abhängigkeit von dem zugrunde liegenden Eigenwertproblem verhält und wie man die verwendeten

Parameter optimal wählt. Darüber hinaus stellen Eigenwertberechnungen bei Strömungen mit sehr kleiner Viskosität beziehungsweise großer Reynolds-Zahl eine zukünftige Herausforderung dar.

A QR-Zerlegung mit Spaltenpivoting

Algorithmus A.1 RRQR-Algorithmus (vgl. [Lub04])

Initialisierung: $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit Spalten a_k ($k = 1, \dots, n$),
 $\varepsilon > 0$ Toleranzparameter für die numerische Rangentscheidung,
 $p_i := i$, $u_{ik} := 0$ für $i, k = 1, \dots, n$, $k := 0$, $\text{exitflag} := 0$,
while $\text{exitflag} = 0$ und $k < n$ **do**
 for $j = k + 1, \dots, n$ **do**
 $n_j := \max_{i=k+1, \dots, n} |a_{ij}|$,
 end for
 bestimme einen Index $r \in \{k + 1, \dots, n\}$ mit $n_r = \max_{i=k+1, \dots, n} n_i$,
 if $n_r \leq \varepsilon$ **then**
 $\text{exitflag} := 1$,
 else
 $k = k + 1$, $\alpha := 0$
 vertausche p_k und p_r , vertausche k -te und r -te Spalte von \mathbf{A} ,
 (Berechnung der k -ten Householder-Matrix:)
 for $i = k, \dots, n$ **do**
 $u_{ik} := a_{ik} / \|a_k\|_\infty$, $\alpha := \alpha + |u_{ik}|^2$
 end for
 $\alpha := \sqrt{\alpha}$, $\beta_k := 1 / (\alpha(\alpha + |u_{kk}|))$, $u_{kk} := u_{kk} + \text{sign}(a_{kk})\alpha$,
 (Multiplikation der k -ten Householder-Matrix mit \mathbf{A} :)
 $a_{kk} := -\text{sign}(a_{kk})\|a_k\|_\infty\alpha$,
 for $i = k + 1, \dots, n$ **do**
 $a_{ik} := 0$,
 end for
 for $j = k + 1, \dots, n$ **do**
 $s := \beta_k \sum_{i=k}^n \overline{u_{ik}} a_{ij}$,
 for $i = k, \dots, n$ **do**
 $a_{ij} := a_{ij} - s u_{ik}$,
 end for
 end for
 end if
end while

Abbildungsverzeichnis

4.1	Die 1., 2., 4. und 20. primale bzw. duale Eigenfunktionen des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = 0.1, c_1 = 7/\sqrt{58}$ und $c_2 = 3/\sqrt{58}$	43
4.2	Lokale Gitterverfeinerung bei der Berechnung der Eigenpaare des Konvektions-Diffusions-Operators mit verschiedener Viskosität und $c_1 = c_2 = 1$	51
4.3	Die 1., 2. und 4. primale bzw. duale Eigenfunktion der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ bei freiem Ein- und Ausströmrand	70
4.4	Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ und $h = 2^{-6}$ bei freiem Ein- und Ausströmrand	72
4.5	Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ und $h = 2^{-7}$ bei freiem Ein- und Ausströmrand	73
4.6	Die 1. primale bzw. duale Eigenfunktion der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ bei freiem Ausströmrand	77
4.7	Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ und $h = 2^{-6}$ bei freiem Ausströmrand und Dirichlet-Einströmrand	79
4.8	Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.01$ und $h = 2^{-7}$ bei freiem Ausströmrand und Dirichlet-Einströmrand	80
4.9	Spektrum der Burgers-Gleichung mit $\nu = 0.0001$ und $h = 2^{-7}$ bei freiem Ein- und Ausströmrand	85

Tabellenverzeichnis

3.1	Arnoldi-modifizierter Gram-Schmidt, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{60 \times 60}$	24
3.2	Householder-Arnoldi, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{60 \times 60}$	25
4.1	Maximale Gitterverfeinerung	40
4.2	Konvergenz der Eigenwerte	41
4.3	Konvergenz der Eigenfunktionen	42
4.4	A posteriori Fehlerschätzer mit exakten Eigenfunktionen	44
4.5	A posteriori Fehlerschätzer mit biquadratischer Interpolation	45
4.6	A posteriori Fehlerschätzer mit abnehmender Viskosität	47
4.7	A posteriori Fehlerschätzer unter lokaler Gitterverfeinerung	49
4.8	Lokale Gitterverfeinerung bei $\nu = 0.02$: Berechnung des kleinsten Eigenwerts des Konvektions-Diffusions-Operators mit $\nu = 0.02$ und $c_1 = c_2 = 1$ unter lokaler Gitterverfeinerung mit je 100 Iterationsschritten	50
4.9	Lokale Gitterverfeinerung bei mehreren Eigenwerten	52
4.10	A posteriori Fehlerschätzer bei "falschem" Gitter	54
4.11	Abbruchkriterium mit exakten Eigenfunktionen	56
4.12	Iterationsfehler	57
4.13	Abbruchkriterium mit biquadratischer Interpolation	58
4.14	Eigenwerte im Systemfall	60
4.15	Komplexe Eigenwerte	60
4.16	Negative Eigenwerte	61
4.17	Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei freiem Einströmrand	65
4.18	Entartung im Diskreten bei freiem Einströmrand	66
4.19	Gesplittete Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei freiem Einströmrand	68
4.20	Entartung im Kontinuierlichen bei freiem Einströmrand	69
4.21	Vergleichsrechnung mit $\nu = 0.1$ und $\Omega = (0, 1)^2$	74
4.22	Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei Dirichlet-Einströmrand	75

4.23 Entartung im Diskreten bei Dirichlet-Einströmrand	75
4.24 Gesplittete Eigenwerte der Burgers-Gleichung bei Dirichlet-Einströmrand	76
4.25 Entartung im Kontinuierlichen bei Dirichlet-Einströmrand	77
4.26 A posteriori Fehlerschätzer bei Entartung im Kontinuierlichen	81
4.27 A posteriori Fehlerschätzer bei Entartung im Diskreten	82
4.28 Kleinere Viskosität	84

Literaturverzeichnis

- [Ber99] BERTSCH, CHRISTIAN: *Finite-Elemente-Diskretisierung und ein Mehrgitterverfahren für unsymmetrische Eigenwertprobleme*. Diplomarbeit, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg, 1999.
- [BO73] BRAMBLE, J. H. and J. E. OSBORN: *Rate of Convergence for Nonselfadjoint Eigenvalue Approximations*. *Math. Comp.*, 27:525–549, 1973.
- [Bos08] BOSCH, SIEGFRIED: *Lineare Algebra*. Springer, 4., überarbeitete Auflage, 2008.
- [BR01] BECKER, ROLAND and ROLF RANNACHER: *An Optimal Control Approach to A Posteriori Error Estimation in Finite Element Methods*. *Acta Numerica* 2000, pages 1–102, 2001.
- [Cha87] CHAN, TONY F.: *Rank Revealing QR Factorizations*. *Linear Algebra Appl.*, 88/89:67–82, 1987.
- [Dem97] DEMMEL, JAMES W.: *Applied Numerical Linear Algebra*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
- [Din03] DING, YAN: *Computation of Leading Eigenvalues and Eigenvectors in the Linearized Navier-Stokes Equations Using Krylow Subspace Method*. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 17(4):327–337, 2003.
- [gas] *The finite element toolkit* GASCOIGNE. <http://www.gascoigne.uni-hd.de>.
- [GL89] GOLUB, GENE H. and CHARLES F. VAN LOAN: *Matrix Computations*. The John Hopkins University Press, 1989.
- [GVCA04] GIONA, M., V. VITACOLONNA, S. CERBELLI, and A. ADROVER: *Advection Diffusion in Nonchaotic Closed Flows: Non-Hermitian Operators, Universality, and Localization*. *Phys. Rev. E*, 70:046224, 2004.
- [GW78] GOLUB, G. H. and J. H. WILKINSON: *Ill-conditioned Eigensystems and the Computation of the Jordan Canonical Form*. *SIAM Review*, 18:578–619, 1978.

- [HB00] HEUVELINE, VINCENT and CHRISTIAN BERTSCH: *On Multigrid Methods for the Eigenvalue Computation of Nonselfadjoint Elliptic Operators*. East-West J. Numer. Math., 8:275–297, 2000.
- [Heu02] HEUVELINE, VINCENT: *Finite Element Approximations of Eigenvalue Problems for Elliptic Partial Differential Operators*. Habilitationsschrift, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg, 2002.
- [HP92] HONG, Y. P. and C.-T. PAN: *Rank Revealing QR Factorizations and the Singular Value Decomposition*. Math. Comp., 58:213–232, 1992.
- [HR01] HEUVELINE, VINCENT and ROLF RANNACHER: *A Posteriori Error Control for Finite Element Approximations of Elliptic Eigenvalue Problems*. Advances in Comput. Math., 15:1–32, 2001.
- [HR06] HEUVELINE, VINCENT and ROLF RANNACHER: *Adaptive FEM for Eigenvalue Problems with Application in Hydrodynamic Stability Analysis*. Advances in Numerical Mathematics, Proc. Int. Conf. , Sept. 16-17, 2005, Moscow: Institute of Numerical Mathematics RAS, 2006.
- [Lub04] LUBE, GERT: *QR-Verfahren im rang-defizienten Fall*. Vorlesungsskriptum zur numerischen Mathematik 1, 2004. <https://lp.uni-goettingen.de/get/text/1032>, umgesetzt von Alexander Mann.
- [Mei08] MEISTER, ANDREAS: *Numerik linearer Gleichungssysteme*. Vieweg, 3., überarbeitete Auflage, 2008.
- [PFTV86] PRESS, WILLIAM H., BRIAN P. FLANNERY, SAUL A. TEUKOLSKY, and WILLIAM T. VETTERLING: *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1986.
- [Ran06] RANNACHER, ROLF: *Numerische Mathematik 0*. Vorlesungsskriptum, 2006.
- [Ran08a] RANNACHER, ROLF: *Numerische Mathematik 2*. Vorlesungsskriptum, 2008.
- [Ran08b] RANNACHER, ROLF: *Numerische Mathematik 3*. Vorlesungsskriptum, 2008.
- [Saa96] SAAD, YOUSEF: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. PWS, 1996.
- [SB05] STOER, JOSEF und ROLAND BULIRSCH: *Numerische Mathematik 2*. Springer, 5. Auflage, 2005.
- [Wal88] WALKER, HOMER F.: *Implementation of the GMRES Method Using Householder Transformations*. SIAM J. Sci. Stat. Comput., 9:152–163, 1988.
- [Wer07] WERNER, DIRK: *Funktionalanalysis*. Springer, 6., korrigierte Auflage, 2007.

Erklärung zur selbstständigen Verfassung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, im November 2009

Antje Westenberger