Konvergenzeigenschaften von Mehrgitterverfahren für ungeordnete Systeme

Diplomarbeit am
II. Institut für Theoretische Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von
Claudia Lehmann

Dezember 2000

Gutachter der Diplomarbeit:	Prof. Dr. G. Mack
Zweitgutachter:	Prof. Dr. K. Fredenhagen

meinem Vater

Inhalt

1 Einleitung

Die iterative Lösung diskretisierter Differenzialgleichungen mithilfe lokaler Relaxationsverfahren weist das Phänomen der kritischen Verlangsamung auf. Man denke nur an die Simulation von Gittereichtheorien mit dynamischen Fermionen. Dieses Phänomen ist ein wohlbekanntes Problem, doch zugleich Motivation der Mehrgitteralgorithmen.
Eine Transformation des Problems auf immer gröbere Gitter erinnert an die Bildung effektiver Theorien: Man geht von unterschiedlichen Betrachtungsebenen, im Speziellen von Gittern verschiedener Gitterkonstanten in mehreren Dimensionen, aus. Die Natur an sich bietet schon eine Vielzahl solcher Skalen. Im physikalischen Kontext kann es sich um charakteristische Längenskalen handeln, die allerdings auch zu Beschreibungen führen, die über den rein physikalischen Gesichtspunkt hinaus gehen. Es ist die Rede von biologischen, chemischen, physiologischen und sozialen Systemen. In der Physik gewinnen gerade die ungeordneten Systeme zunehmend an Bedeutung. In der Gittereichtheorie liegt von vornherein ein gewisses Maß an Unordnung der Eichfelder vor, das durch deren Quantenfluktuation hervorgerufen wird.
Ein Übergang von einer feineren auf eine gröbere Skala hat Komplexitätsreduktion zur Folge. Solche Übergänge werden mithilfe von Mittelungsoperatoren durchgeführt. Eine Mittelung ist ein Zusammenfassen von Objekten der feinen Skala zu einem Objekt der gröberen, wobei die Beziehungen zwischen diesen Objekten gleichfalls zu berücksichtigen sind. Die Suche nach einer universell optimalen Mittelung ist ein noch nicht gelöstes Problem. Übergänge in die entgegengesetzte Richtung werden mithilfe von Interpolationsoperatoren vollzogen. Eine „gute Eigenschaft" des Kerns eines solchen Operators hinsichtlich der Lokalität wäre die Tatsache, dass er auf kompaktem Träger lebt. Ein solcher wird in dieser Arbeit als „praktischer" Interpolationskern bezeichnet. Zudem weisen diejenigen Kerne, die nicht auf kompaktem Träger leben, wir nennen sie exakte Kerne, bezüglich anderer Gesichtspunkte einen Vorteil auf.
Mit den aus den unterschiedlichen Interpolationskernen konstruierten Projektoren lässt sich der Funktionenraum über dem Gitter in einen hoch- und einen niederfrequenten Teil zerlegen. Die Teilräume der exakten Kerne sind bei geeigneter Konstruktion zueinander orthogonal. Iterationsverfahren können als Teilraumkorrekturen formuliert werden. Die zugehörigen Konvergenzbetrachtungen basieren auf einer Formulierung von Xu [1]. Es liegt nahe, die mittels der Interpolationskerne konstruierten Teilräume hierfür zu verwenden und die Konvergenz der daraus resultierenden Korrekturverfahren zu untersuchen.
Ein Interpolationsoperator kann für die Transformation eines Problems von einer Skala auf eine nächste herangezogen werden. Die Verwendung unterschiedlicher Interpolationsoperatoren führt zwangsläufig zu unterschiedlichen Problemen auf der anderen Skala, insbesondere zu anderen Problemoperatoren. Diese unterscheiden sich durch einen Korrekturterm, der im Zuge der Konvergenzbetrachtung abgeschätzt wird. Dieser Korrekturterm hat die Form eines transformierten

Fluktuationspropagators. Unter den Aspekten der Renormierungsgruppe werden zur Konstruktion einer effektiven Feldtheorie hochfrequente Feldanteile ausintegriert. In den hieraus resultierenden Graphen tritt der Fluktuationspropagator auf. Man interpretiert den Korrekturterm als Massenterm auf der größeren Skala. Massenterme sind relevante Operatoren. Auf immer gröberen Ebenen wird dieser Massenterm in Einheiten der Gitterkonstante größer und gewinnt so zunehmend an Bedeutung.

Ein kurzer Überblick über diese Arbeit:
Nach einer kurzen Einführung in Mehrgitterverfahren und die Ideen der Renormierungsgruppe werden in Kapitel 3 die Methoden von Xu [1], insbesondere dessen Theoreme zur Konvergenz der Teilraumkorrekturverfahren in einer verschärften Formulierung vorgestellt. In Kapitel 4 werden dafür in Frage kommende Unterräume unter Verwendung sogenannter „praktischer" Interpolationskerne, die sich durch kompakte Träger auszeichnen, konstruiert. Der Schwerpunkt liegt ab diesem Zeitpunkt auf der Betrachtung hoch- und niederfrequenter Unterräume bezüglich eines Zweigitterszenarios. Anschließend geht man zu den exakten Kernen über, die aus dem Formalismus von Gawedzki und Kupiainen hervorgehen. Ihr Bezug zu den praktischen Kernen wird durch die Untersuchung der Dirichlet-Randbedingungen in Kapitel 6 deutlich gemacht. Wie sich der Korrekturterm als Differenz zwischen Blockoperatoren, die sich durch Transformation bezüglich praktischer Kerne, und solcher Operatoren, die sich durch Transformation bezüglich exakter Interpolationskerne ergeben, errechnet, ist ebenfalls hier nachzulesen. Kapitel 7 ist der Konstruktion von Mittelungsoperatoren aus Eigenmoden des Problemoperators mit den dort eingeführten verallgemeinerten Neumann-Randbedingungen gewidmet. In Kapitel 9 werden die Teilraumkorrekturen unter dem Aspekt der Minimierung eines dort definierten Kostenfunktionals optimiert. Im darauffolgenden Kapitel wird die formale Erweiterung zum echten Mehrgitter betrachtet, bevor in Kapitel 11 auf eine der Massenrenormierung in der Quantenfeldtheorie analoge Interpretation des Korrekturterms, der durch die Transformation zwischen der Darstellung bezüglich exakter und praktischer Kerne entsteht, eingegangen wird.

2 Mehrgitterverfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme

In diesem Kapitel werden die Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme auf dem Gitter dargestellt. Im Speziellen werden gängige Iterationsverfahren und deren Konvergenz vorgestellt, sowie das Mehrgitterprinzip zur Lösung des Problems des critical slowing down. Es folgt eine kurze Einführung in die Prinzipien der Renormierungsgruppe zur Bildung effektiver Theorien.

2.1 Problemgleichung auf dem Gitter

Die Lösung diskretisierter Differenzialgleichungen ist ein Standardproblem der Natur- und Ingenieurswissenschaften. So bereitet beispielsweise die Lösung der Diracgleichung in äußeren Eichfeldern immer noch Probleme. Die allgemeine Formulierung der zu lösenden **Problemgleichung** lautet zunächst

$$Lu = f. \tag{1}$$

Sie lebe auf einem Gitter Λ der Gitterkonstanten a, dessen Punkte generell nun mit z, z' u.s.w. bezeichnet werden: $z = \{z^\mu\} \in (a\mathbb{Z})^d$, d sei die Dimension des Gitters, μ stehe für die Raumrichtung. u und f seien Elemente eines Hilbertraumes $\mathcal{V}$ über Λ. Der **Problemoperator** L sei also eine Abbildung, ein Endomorphismus, gemäß $L : \mathcal{V} \to \mathcal{V}$. Im Folgenden wird L als **positiv definit** angenommen.

Beispiel: Sei e_μ der Gittervektor der Länge a. Die partielle Ableitung auf dem Gitter Λ lautet $\nabla_\mu f(z) = \frac{1}{a}\{f(z + e_\mu) - f(z)\}$. Die diskretisierte Version des Laplaceoperators erhält man aus der Summation der rechts- und linksseitigen Ableitung. Mit $-e_\mu = e_{-\mu}$ folgt:

$$-\Delta f(z) = \frac{1}{a^2} \sum_{\pm\mu} [f(z) - f(z + e_\mu)]$$

Lebt der Operator L auf dem Gebiet Ω, so lebt das diskretisierte Problem auf $\Omega \cap \Lambda$. Hierbei sind die diskreten Randbedingungen auf dem Rand $\partial\Omega$ zu berücksichtigen.

In Eichtheorien und in der Allgemeinen Relativitätstheorie, sowie in systemtheoretischen Ansätzen [11] betrachtet man Vektorbündel über dem Raum Λ, d.h. jedem Punkt $z \in \Lambda$ ist ein eigener Vektorraum $\mathbb{V}_z$ zugeordnet. Die Vektorräume über den Punkten eines Gitters sind zueinander isomorph. Schließlich erhält man sogenannte Schnitte des Vektorbündels $f : z \to f(z) \in \mathbb{V}_z$. Wir können die Elemente $z, z' \in \Lambda$ auch Objekte nennen, mit fundamentalen Beziehungen oder Kanten[1] ($b = (z, z')$) zwischen nächsten Nachbarn z und z', die wiederum lineare

[1] Fundamentale Beziehungen werden auch links (engl.) genannt.

Abbildungen zwischen den Räumen $\mathbb{V}_z$ und $\mathbb{V}_{z'}$ sind. Sie haben ihren Ursprung in der Gittereichgruppe. Es gibt zu jedem Weg $\mathcal{C} : z \to z'$ in Λ einen Paralleltransporter $U(\mathcal{C}) : \mathbb{V}_z \to \mathbb{V}_{z'}$. Auf dem Gitter kann man jeden Weg aus fundamentalen Beziehungen, oder auch Relationen $b_1 \ldots b_n (n \geq 0)$ zusammensetzen: $U(\mathcal{C}) = U(b_n) \cdots U(b_1)$. Für $b : z \to z'$ lauten die Problemoperatoren $L_{zz'} = U(b)$.

Beispiel: Für ein SU(2)-Gittereichfeld hat man zweidimensionale Vektorräume $\mathbb{V}_z$, die linearen Abbildungen zwischen diesen haben Determinante 1. Der kovariante Laplaceoperator ist durch

$$\Delta\varphi(z) = \sum_{z' \in \Lambda^0} \Delta(z, z')\varphi(z') = \sum_{z' \text{n.n.} z} \big[U(z, z')\varphi(z') - \varphi(z)\big]$$

definiert. Die Gitterkonstante sei 1. (n.n. steht für: nächster Nachbar zu.)

Die diskretisierte Form des negativen kovarianten Laplaceoperators erscheint schon in der Wilson-Wirkung des Eichfeldes durch geschicktes Umformen derselben. Für ein SU(N)-Gittereichfeld lautet diese

$$S(U) = \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \beta\big\{1 - \frac{1}{N} \mathfrak{Re}\, \mathrm{Spur}\, U_{x;\mu\nu}\big\},$$

wobei $U_{x;\mu\nu}$ auch Plakettenvariable, oder Paralleltransporter um eine Plakette, genannt wird. β ist proportional zu $\frac{1}{g^2}$. g ist die Kopplungskonstante. Taucht der Laplaceoperator nun in der Wirkung auf, so ist durch dessen kleinster Eigenwert schon eine untere Schranke an diese festgelegt, die ein gewisses Maß an Unordnung des Eichfeldes von vornherein zur Folge hat [16].

Da man die Gleichung (1) auf einem möglichst feinen Gitter lösen möchte, bedient man sich sogenannter Iterationsverfahren. Man erhält schließlich eine Näherungslösung u_{approx} der exakten Lösung u. Der algebraische Fehler einer solchen Näherung ist

$$e = u - u_{approx}. \tag{2}$$

Je kleiner der Fehler, desto besser die Approximation. Das Residuum als Maß der Abweichung einer Näherungslösung von der exakten lautet

$$r = f - Lu_{approx}. \tag{3}$$

Die Problemgleichung kann direkt zur **Residualgleichung** umformuliert werden

$$Le = r. \tag{4}$$

2.2 Iterationsverfahren

Vorbemerkung: Ein Element $u \in \mathcal{V}$ lässt sich bezüglich eines Basissystems $\mathcal{B}$, oder bezüglich eines Erzeugendensystems $\mathcal{E}$, falls dessen Elemente auch linear abhängige enthält, darstellen,

$$u = \sum_{\phi \in \mathcal{E}} u_\phi^{\mathcal{E}} \phi.$$

Dann hat auch der Problemoperator eine Darstellung bezüglich dieses Systems, L hat eine Matrixdarstellung. Man spricht von der Problemmatrix. Der Wechsel von einer zu einer anderen Darstellung erfolgt über die Transformationsmatrix S,

$$L^{\mathcal{E}^1} = S^t L^{\mathcal{E}^2} S, \qquad u^{\mathcal{E}^1} = S^t u^{\mathcal{E}^2}.$$

Um die Problemgleichung (1) näherungsweise zu lösen kann man herkömmliche Relaxationverfahren verwenden. Dabei wird die Gleichung im Prinzip an jedem Punkt des Gitters gelöst, bevor man zu dem nächsten weitergeht, um sie dort wiederum zu lösen. Prinzipiell existiert ein Vielzahl solcher Verfahren, wobei wir uns in diesem Zusammenhang drei näher ansehen werden.
Sei $u^k \in \mathcal{V}$ die k-te Näherungslösung zur exakten Lösung u. Die $k+1$-te Näherung am j-ten Punkt des Gitters Λ lautet im Fall der **Jacobi-Iteration**, bei welcher das Gitter in gewöhnlicher Weise durchlaufen wird und die neue Näherung die alte ersetzt,

$$u_j^{k+1} = \frac{1}{L_{jj}} \big(f_j - \sum_{i \neq j} L_{ji} u_i^k \big),$$

und mit der Zerlegung des Problemoperators in Diagonalmatrix, untere und obere Dreiecksmatrix $L = D - U - O$:

$$\begin{aligned} u^{k+1} &= D^{-1}(U+O)u^k + D^{-1}f \\ &= u^k - D^{-1}(Lu^k - f). \end{aligned}$$

Es erweist sich bisweilen als nützlich, die Jacobi-Iteration mit einem Dämpfungsfaktor $\omega \in \{0, 1\}$ zu versehen:

$$u^{k+1} = u^k - \omega D^{-1}(Lu^k - f)$$

Auf diese Weise werden bei der **gedämpften Jacobi-Iteration** die neuen Werte u^{k+1} nicht nur aus den benachbarten Punkten berechnet.
Als eine Art Spezialfall kann die **Richardson-Iteration** aufgefasst werden,

$$u^{k+1} = u^k - \Theta(Lu^k - f),$$

mit $\Theta \in \mathbb{C}$.

Eine Alternative hierzu bietet das **Gauß-Seidel-Verfahren**, bei welchem die bei einem Durchlauf bereits iterierten Werte sofort verwendet werden.

$$u_j^{k+1} = \frac{1}{L_{jj}}\big(f_j - \sum_{i<j} L_{ji}u_i^{k+1} - \sum_{i>j} L_{ji}u_i^k\big).$$

Wie man leicht sieht, hängt das Gauß-Seidel-Verfahren von der Reihenfolge ab, in der die Gitterpunkte durchlaufen werden. (Bei beliebig rotierter lexikographischer Ordnung beispielsweise werden die einzelne Punkte der Reihe nach abgelaufen. Die Schachbrettordnung beachtet vorerst jeden zweiten Punkt lexikographisch. Ebenfalls verbreitet sind blockweise Gauß-Seidel-Verfahren, die nur abhängig von der Reihenfolge der Blocks sind, nicht von der Nummerierung innerhalb dieser [3].) In Matrixschreibweise lautet diese Iteration folgendermaßen

$$\begin{aligned} u^{k+1} &= (D-U)^{-1}Ou^k + (D-U)^{-1}f \\ &= u^k - (D-U)^{-1}(Lu^k - f). \end{aligned}$$

Die allgemeine Form der Matrixgleichung lautet

$$u^{k+1} = Mu^k + Nf,$$

mit der **Iterationsmatrix** M und der Matrix N, die für die Konvergenzbetrachtungen keine Bedeutung hat. Man erhält also

- $M^{Jac} = D^{-1}(U+O) = I - D^{-1}L$ für das **Jacobi-Verfahren**,
- $M^{Rich} = I - \Theta L$ für das **Richardson-Verfahren** und
- $M^{GS} = (D-U)^{-1}O = I - (D-U)^{-1}L$ für das **Gauß-Seidel-Verfahren**.

Satz 2.1 *Ein Iterationsverfahren konvergiert, wenn die Norm der Iterationsmatrix kleiner als eins ist, bzw. alle ihre Eigenwerte kleiner als eins sind.*

<u>Beweis:</u> Anwendung der Iterationsmatrix M auf den k-ten Fehler ergibt sofort $Me^k = e^{k+1}$, also den algebraischen Fehler der $(k+1)$-ten Iteration. □

Im Folgenden verwenden wir den **Glattheitsbegriff**, der bereits beim ISU-Verfahren [6] Anwendung gefunden hat:

Definition: Eine Funktion $u \in \mathcal{V}$ heißt **glatt** auf der Längenskala a, wenn $||Lu||^2 \ll ||u||^2$. L soll in Einheiten von $a = 1$ dargestellt werden.
Diese Formulierung impliziert insbesondere, dass die Eigenmode zum kleinsten Eigenwert die glatteste Mode des Systems ist.

Wir betrachten die zu dem Problemoperator gehörige Eigenwertgleichung

$$L\varphi(z) = \lambda\varphi(z),$$

wobei $z \in \Lambda^0$, also ein fundamentaler Gitterpunkt ist. Der niedrigste Eigenwert wird mit λ_{min} bezeichnet, die korrespondierende Eigenfunktion, der Grundzustand, ist die glatteste Mode. Prinzipiell lässt sich jede Funktion $u(z) \in \mathcal{V}$ nach den Eigenmoden entwickeln,

$$u(z) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(z)\langle\varphi_\alpha(z), u(z)\rangle.$$

Die Eigenfunktionen von M ergeben sich bei den angesprochenen Iterationsverfahren sofort. Bei der Richardson-Iteration ist der Zusammenhang zwischen den Eigenmoden von L und M einfach: $M^{Rich}\varphi(z) = (I - \Theta L)\varphi(z) = (I - \Theta\lambda)\varphi$. Im Falle der Jacobi-Iteration, ebenso im Falle der Gauß-Seidel-Iteration, bietet es sich an, **verallgemeinerte Eigenmoden** zu betrachten.

$$\begin{aligned} L\varphi(z) &= \lambda D\varphi(z) \\ \Leftrightarrow D^{-1}L\varphi(z) &= \lambda\varphi(z), \end{aligned}$$

Der Operator $(D^{-1}L)$ ist selbstadjungiert bezüglich des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle_D = \langle D\cdot,\cdot\rangle$.

Beispiel: Wir betrachten die Laplacegleichung in einer Dimension mit Dirichlet-Randbedingungen auf einem Gitter der Gitterkonstante $a = 1$, das aus N Punkten besteht. Die zugehörige Problemmatrix lautet

$$L = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

$\in M((N-2) \times (N-2))$. Hierbei ist $D^{-1} = \frac{1}{2}I$.

Da D der Diagonalteil des Problemoperators ist, kann man für die Jacobi-Iteration o.B.d.A. $D = I$ annehmen. Für $D = I$ ergibt sich eine Vereinfachung zum Fall $L_{zz} = 1$. Da der verallgemeinerte Operator $D^{-1}L$ bezüglich des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle_D$ selbstadjungiert ist, so ist der o.B.d.A. verallgemeinerte Operator L mit $L_{zz} = 1$, ebenso wie der ursprüngliche Problemoperator, bezüglich des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle$ selbstadjungiert.
Anders verhält es sich im Falle der Gauß-Seidel-Iteration. Dort steht anstelle des Diagonalteils eine Dreiecksmatrix (im Falle der symmetrischen Gauß-Seidel-Iteration, die in Abschnitt 3.2.2 noch betrachtet wird, lautet der verallgemeinerte Operator sogar $(D - O)^{-1}D(D - U)^{-1}L$).

Man sieht, dass solche Fehleranteile, die vorwiegend aus Eigenfunktionen von M zu entwickeln sind, deren zugehöriger Eigenwert nahe bei eins liegt, durch die

Iteration nur schlecht reduziert werden, nicht so die Fehleranteile, die sich aus Eigenfunktionen zu sehr kleinen ($\to 0$) Eigenwerten zusammensetzen. Dies hat zur Folge, dass die Geschwindigkeit der Fehlerreduktion im Laufe der Iteration abnimmt, da die schlecht konvergenten Anteile übrig bleiben. Man spricht von dem Phänomen der **kritischen Verlangsamung** (**critical slowing down**). Andersherum sind es gerade die kleinen Eigenwerte des Problemoperators L, deren zugehörige Eigenmoden schlecht konvergieren. Übertragen auf das Laplaceproblem sind die glatten Moden die schlecht konvergenten.

2.3 Mehrgitterverfahren

Ein Fehler, der nicht weiter zu minimieren ist wäre auf einem Gitter mit größerer Gitterkonstante für die Iteration wieder interessant. Er wäre dort weniger glatt. Also überträgt man das Problem einfach mittels **Restriktions-** oder **Mittelungsoperatoren** $\mathcal{C} : \mathcal{V} \to \mathcal{V}^1$ auf ein gröberes Gitter Λ^1, auch **Blockgitter** genannt. Der dem entsprechende Hilbertraum darüber werde mit $\mathcal{V}^1$ bezeichnet. Ein Mittelungsoperator mittelt im Prinzip über Funktionswerte des feinen Gitters, um einen Wert auf dem groben Gitter zu erhalten. Dort wird die Residualgleichung wieder approximativ gelöst, bevor der so ermittelte Fehler mittels **Interpolationsoperatoren** $\mathcal{A} : \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}$ auf das Ausgangsgitter zurückinterpoliert wird.

Beispiel: Bei dem Übergang von einem feinen auf ein grobes Gitter sollen je-

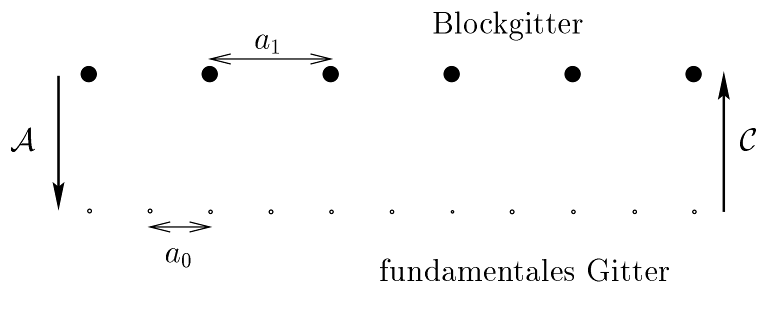


Abbildung 1: Beispiel eines Blockgitters mit $a_1 = 2a_0 = 2a$ in einer Dimension

weils drei Funktionswerte zur Mittelung herangezogen werden. Es soll um $\hat{x} \in \Lambda$ gemittelt werden. (Die Gitterkonstante des Blockgitters sei $a_1 = 2a$.)

$$\mathcal{C}_\mu f(x) = \frac{1}{2}[\frac{1}{2}f(\hat{x} - e_\mu) + f(\hat{x}) + \frac{1}{2}f(\hat{x} + e_\mu)] \equiv \sum_{z \in \Lambda} \mathcal{C}_\mu(x,z) f(z)$$

$$\mathcal{C}f(x) = \int_{z \in \Lambda} \mathcal{C}(x,z) f(z) = a^d \sum_{z \in \Lambda} [\prod_{\mu > 0} \mathcal{C}_\mu(x,z)] f(z)$$

(Die Integration auf dem Gitter ist eine Summe $\int_z := a^d \sum_z$.) Ein möglicher Interpolationsoperator könnte mit $f^1(x) \in \mathcal{V}^1$ folgendermaßen lauten:

$$\mathcal{A}_\mu f^1(z) = \begin{cases} f^1(\hat{x}) & \text{für } \; z_\mu = \hat{x}_\mu \\ \frac{1}{2}[f^1(z-e_\mu) + f^1(z+e_\mu)] & \text{für } \; z_\mu = \hat{x}_\mu \pm e_\mu \end{cases}$$

$$\mathcal{A}f^1(x) = \int_{x \in \Lambda^1} \mathcal{A}(z,x) f^1(x) = a_1^d \sum_{x \in \Lambda^1} [\prod_{\mu > 0} \mathcal{A}_\mu(z,x)] f^1(x)$$

Problemoperatoren können gemäß

$$L^1 = \mathcal{C} L \mathcal{A} \tag{5}$$

transformiert werden. Mit $e^1 = \mathcal{C}e$ und $r^1 = \mathcal{C}r$ lautet die Residualgleichung dann

$$L^1 e^1 = r^1. \tag{6}$$

Auf diese Weise wird die Näherungslösung mit dem interpolierten Fehler korrigiert:

$$u^k_{neu} = u^k_{alt} + \mathcal{A}e^1 \tag{7}$$

Schließlich wird man feststellen, dass die Lösung der Gleichung (4) ähnliche Probleme aufweist wie die Ausgangsgleichung. Dementsprechend kann man auch dieses Problem auf immer gröbere Gitter transformieren, bis man letztlich, im Idealfall, bei einem Gitter angelangt, das aus nur einem Punkt besteht, auf welchem die Gleichung exakt zu lösen ist. Wir wollen hier dem gröbsten Gitter den hochgestellten Index 1 zuweisen, so dass wir hieraus eine Sequenz von Gittern $\Lambda = \Lambda^J, \Lambda^{J-1}, \ldots, \Lambda^2, \Lambda^1$, mit den zugehörigen Hilberträumen $\mathcal{V} = \mathcal{V}^J, \mathcal{V}^{J-1}, \ldots, \mathcal{V}^2, \mathcal{V}^1$ und den Gitterkonstanten $a = a_J, a_{J-1}, \ldots a_2, a_1$ erhalten. Man betrachtet das Problem also auf verschiedenen Levels oder Skalen. Die Mittelungs- und Interpolationsoperatoren lauten

$$\mathcal{C}^{j-1,j} : \mathcal{V}^j \to \mathcal{V}^{j-1}, \qquad \mathcal{A}^{j,j-1} : \mathcal{V}^{j-1} \to \mathcal{V}^j, \tag{8}$$

wenn man jeweils von einer Gitterschicht auf die nächsthöhere mittelt und auf die jeweils darunterliegende interpoliert. Man spricht in diesem Fall von einem **echten Mehrgitter**.

Eine andere Möglichkeit bietet das sogenannte **Unigrid-Verfahren**, wie es beispielsweise das ISU-Verfahren ist [6]. Hierbei finden Mittelung und Interpolation ausschließlich zwischen dem fundamentalen Gitter und dem entsprechenden Blockgitter statt:

$$\mathcal{C}^{j,J} : \mathcal{V} \to \mathcal{V}^j, \qquad \mathcal{A}^{J,j} : \mathcal{V}^j \to \mathcal{V} \tag{9}$$

Satz 2.2 *Jedes echte Mehrgitter lässt sich als Unigrid-Verfahren implementieren. (Der umgekehrte Fall gilt jedoch nicht.)*

Beweis: Man wählt $\mathcal{A}^{J,j} = \mathcal{A}^{J,J-1} \cdot \mathcal{A}^{J-1,J-2} \cdots \mathcal{A}^{j+1,j}$. $\square$

Bemerkung: Im Falle des Unigrid-Verfahrens werden die Träger, oder Supports, der Interpolationskerne[2] mit gröberer Gitterschicht immer größer. Fasst man beispielsweise immer 2^d Gitterpunkte von Level zu Level zusammen, so sind die Träger für die Kerne des j-ten Gitters Quadrate der Kantenlänge $2^{(J-j)+1}$.

Nun gibt es überdies verschiedene Möglichkeiten zur Bestimmung der Interpolationsoperatoren aus dem Mittelungsoperatoren. Die bei Mehrgitterverfahren gebräuchlichste ist die **Galerkin**-Wahl $\mathcal{A}^{j,j-1} = \mathcal{C}^{j-1,j*}$, bzw. $\mathcal{A}^{J,j} = \mathcal{C}^{j,J*}$. Später werden wir noch auf Formalismus von Gawedzki und Kupiainen eingehen.

2.4 Allgemeine Betrachtungen zur Konvergenz

2.4.1 Operatoren und Skalarprodukte

Gegeben sei ein Operator L. Sein Adjungiertes L^* bezüglich des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle$ ist derjenige Operator, der die Gleichung $\langle Lu, v\rangle = \langle u, L^*v\rangle$ für alle $u, v \in \mathcal{V}$ erfüllt. Ist $L = L^*$, so ist L selbstadjungiert. Desweiteren ist L symmetrisch und strikt positiv definit, wenn $\langle Lv, v\rangle > 0$ für $v \in \mathcal{V}\backslash\{0\}$, nicht negativ, wenn $\langle Lv, v\rangle \geq 0$ für $v \in \mathcal{V}$.
Jeder strikt positive Operator L definiert nun das **Skalarprodukt**
$\langle u, v\rangle_L = \langle Lu, v\rangle$, bzw. $\langle u, v\rangle_L = \langle Lu, v\rangle = \langle u, Lv\rangle$, falls L selbstadjungiert ist, und die zugehörige **Norm** $\|\cdot\|_L$. Der Zusammenhang zwischen dieser und der **Spektralnorm** $\|\cdot\|_2$ lautet für eine Matrix B folgendermaßen: $\|B\|_L = \|L^{\frac{1}{2}} B L^{-\frac{1}{2}}\|_2$
Für nicht negative, bezüglich $\langle\cdot,\cdot\rangle$ selbstadjungierte Operatoren L gilt die **Cauchy-Schwarzsche Ungleichung**:

$$\langle Lu, v\rangle \leq \langle Lu, u\rangle^{\frac{1}{2}} \langle Lv, v\rangle^{\frac{1}{2}}, \text{oder auch}$$
$$\langle u, v\rangle \leq \langle L^{-1}u, u\rangle^{\frac{1}{2}} \langle Lv, v\rangle^{\frac{1}{2}}$$

für alle $u, v \in \mathcal{V}$. Seien nun λ_k die zu L gehörigen Eigenwerte, die für einen symmetrischen positiv definiten Operator alle positiv sind. Die Eigenwerte bilden das **Spektrum** $\sigma(L) = \{\lambda \in \mathbb{C} : det(L - \lambda I) = 0\}$. Der **Spektralradius** definiert sich zu $\rho(L) = \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(L)\}$. Es gilt

$$\lambda_{\min}(L) = \min_{v \in \mathcal{V}\backslash\{0\}} \frac{\langle Lv, v\rangle}{\|v\|^2}$$

$$\lambda_{\max}(L) = \max_{v \in \mathcal{V}\backslash\{0\}} \frac{\langle Lv, v\rangle}{\|v\|^2}$$

[2]Ein Interpolationskern ist im Prinzip ein Element des Raumes, auf welchen interpoliert wird, z.B. $\mathcal{A}^{J,j}(z, x) \in \mathcal{V}^J$, für festes $x \in \Lambda^j$. Diejenigen $z \in \Lambda^J$, auf welche von x aus interpoliert wird, formen den Träger oder Support des Kerns.

Desweiteren definiert man das Verhältnis des größten zum kleinsten Eigenwert, die **Konditionszahl** $\kappa(L) = \frac{\lambda_{\max}(L)}{\lambda_{\min}(L)}$ von L, die maßgeblich ist für die Konvergenz des Verfahrens der konjugierten Gradienten [1].

2.4.2 Sätze zur Konvergenz

Wir gehen aus von Satz (2.1). $\|\cdot\|$ sei eine zugehörige Matrixnorm. Die Fehlerabschätzungen lauten

$$\|e^{k+1}\| \leq \|M\| \, \|e^k\| \qquad \Leftrightarrow \qquad \|e^k\| \leq \|M\|^k \|e^0\|.$$

Es wird sofort klar, dass der folgende Satz gelten muss.

Satz 2.3 *Die Abschätzung der Iterationsmatrix $\|M\| < 1$ ist bei beliebiger Wahl der Norm $\|\cdot\|$, also insbesondere auch für $\|M\|_D < 1$, eine hinreichende Bedingung für die Konvergenz einer Iteration. Mit anderen Worten: Das Iterationsverfahren ist genau dann konvergent, wenn $\rho(M) < 1$. $\rho(M)$ nennt man auch **Konvergenzrate**.*

Eine allgemeine Form der Iterationsmatrix lautet: $M = I - W^{-1}L$. (Man spricht auch von der dritten Normalform [4].) D.h.:

- $W = D$ im Falle des Jacobi-Verfahrens
- $W = D - U$ im Falle des Gauß-Seidel-Verfahrens.

Satz 2.4 *Sei L positiv definit. Für $W + W^* > L$ konvergiert das Iterationsverfahren mit $\rho(M) \leq \|M\|_L < 1$.*

<u>Beweis:</u>

$$\begin{aligned}
\|M\|_L &= \|L^{\frac{1}{2}} M L^{-\frac{1}{2}}\|_2 \\
&= \rho((L^{\frac{1}{2}} M L^{-\frac{1}{2}})^* (L^{\frac{1}{2}} M L^{-\frac{1}{2}}))^{\frac{1}{2}} \\
&= \rho((I - L^{\frac{1}{2}} (W^{-1})^* L^{\frac{1}{2}})(I - L^{\frac{1}{2}} W^{-1} L^{\frac{1}{2}}))^{\frac{1}{2}} \\
&= \rho(I - L^{\frac{1}{2}} [(W^{-1})^* + W^{-1}] L^{\frac{1}{2}} + L^{\frac{1}{2}} (W^{-1})^* L W^{-1} L^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}} \\
&= \rho(I - L^{\frac{1}{2}} (W^{-1})^* (W + W^*) W^{-1} L^{\frac{1}{2}} + L^{\frac{1}{2}} (W^{-1})^* L W^{-1} L^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}} \\
&< \rho(I - L^{\frac{1}{2}} (W^{-1})^* L W^{-1} L^{\frac{1}{2}} + L^{\frac{1}{2}} (W^{-1})^* L W^{-1} L^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}} \\
&= \rho(I)^{\frac{1}{2}} = 1 \quad \square
\end{aligned}$$

Korollar 1 *Für das Jacobi-Verfahren lautet die Bedingung für die Konvergenz: $2D > L$. Das Gauß-Seidel-Verfahren konvergiert immer.*

<u>Beweis:</u> $W^{Jac} = D \Rightarrow W^{Jac} + W^{Jac*} = 2D$;
für das Gauß-Seidel-Verfahren folgt wegen $U = O^*$ (L ist selbstadjungiert) die Bedingung $D + L > L$, die für positiv definite Problemoperatoren erfüllt ist. $\square$

2.5 Effektive Theorien

Der Übergang von einer Skala auf eine andere erinnert sofort an die Bildung einer **effektiven Theorie**, so sollten in diesem Zusammenhang die Grundgedanken der **Renormierungsgruppe** erwähnt werden. Sei $\phi \in \mathcal{V}$ das Feld auf dem fundamentalen Gitter. Man geht hier von einer euklidischen Wirkung $S(\phi)$ einer Feldtheorie aus, welche auf einem Gitter Λ^0 lebt und dort eine Theorie über die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}$$

mit $\mathcal{D}\phi := \prod_{z\in\Lambda} d\phi(z)$, beschreibt. Der Erwartungswert einer Observablen $\mathcal{O}$ laute dann $\langle\mathcal{O}\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}}\int \mathcal{D}\phi\mathcal{O}(\phi)e^{-S(\phi)}$. Man möchte nun davon ausgehend eine Theorie konstruieren, deren Wirkung auf einem gröberen Gitter lebt. Das Gitter an sich bildet schon einen Ultraviolett-Regulator. Das Ziel der Renormierungsgruppe (nach Wilson) ist es, eine Theorie, die auf dem Gitter Λ^0 definiert ist, auf eine Theorie mit kleinerem UV-Cutoff, auf einem Gitter Λ^1 mit größerer Gitterkonstanten, abzubilden. Dies geschieht durch die Ausintegration von hochfrequenten Feldanteilen. Aus der Mittelung des Feldes $\phi \in \mathcal{V}$ mithilfe des Mittelungsoperators $\mathcal{C}$ geht das sogenannte **Blockspinfeld** $\Phi(x) = \mathcal{C}\phi(x) \in \mathcal{V}^1$ hervor. Das Ausgangsgitter Λ^0 wird bei dieser Gelegenheit in Blöcke eingeteilt, die mit Punkten $x \in \Lambda^1$ identifiziert werden. Durch Einfügen einer Gaußfunktion $\int \mathcal{D}\Phi\delta_\kappa(\mathcal{C}\phi,\Phi) = 1$ erhält man aus $\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\Phi e^{-S^1(\Phi)}$ eine Definition der effektiven Wirkung $S^1(\phi)$ gemäß

$$e^{-S^1(\Phi)} = \int \mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}\delta_\kappa(\mathcal{C}\phi,\Phi),$$

mit $\delta_\kappa(\mathcal{C}\phi,\Phi) \propto e^{-\frac{\kappa}{2}\langle\mathcal{C}\phi-\Phi,\mathcal{C}\phi-\Phi\rangle}$. Für $\kappa \to \infty$ erhält man eine δ-Funktion und damit eine sogenannte δ-Blockspintransformation [17, 22, 19, 23] .

2.6 Exkurs: Probleme bei der Wahl des Mittelungsoperators

Man betrachte nun ein Gitter Λ der Gitterkonstante a und das darauffolgende Blockgitter Λ^1 der Gitterkonstante a_1, wobei a_1 ein ganzzahliges Vielfaches von a sei. Wir schreiben $z, z' \in \Lambda$ und $x, x' \in \Lambda^1$. Desweiteren sei $v \in \mathcal{V}$ und $v_1 \in \mathcal{V}^1$. Ein Übergang auf das gröbere Gitter kann gemäß $v_1 = \mathcal{C}v$ vollzogen werden. Man kann sich vorstellen, dass der Mittelungsoperator $\mathcal{C}$ für jeden Blockgitterpunkt einen Mittelwert der Funktions- (oder Feld-) Werte der Punkte eines Gebietes auf dem fundamentalen Gitter Λ, das einem x zugeordnet sei, bildet. Dieses Gebiet wird als **Block** bezeichnet. Man könnte den in der Renormierungsgruppentheorie als Blockspinoperator bezeichneten Operator $\mathcal{C}$ beispielsweise folgendermaßen definieren:

$$v_1(x) = (\mathcal{C}v)(x) = \frac{1}{a_1^d}\int_{z\in x} v(z) = \frac{a^d}{a_1^d}\sum_{z\in x} v(z),$$

Hierbei wird nur über diejenigen z summiert, die in dem Block von x liegen, d.h. die zur Ermittelung des Wertes an der Stelle x herangezogen werden. Dies wirft eine Reihe von Fragen auf: Welche oder wieviele Punkte z sollen zu einem Block zusammengefasst werden? Wie kann der Blockspin sinnvoll gewählt werden? Um wieviel ist die Gitterkonstante a_1 größer als a? Mit diesen Fragen ist man immer wieder konfrontiert, wenn es um die Bildung einer effektiven Theorie, also um den Übergang von einer feineren auf eine gröbere Skala, in diesem Fall von einem Gitter zu einem anderen mit größerer Gitterkonstante, geht. Bei Mehrgitteralgorithmen wirkt sich in diesem Kontext die Wahl des Trägers der Interpolationskerne auf die Optimierung eins Verfahrens aus. Das GRISU-Verfahren [10] beispielsweise optimiert die Träger mittels genetischer Algorithmen.
Es handelt sich bei dieser Art von Übergängen um einen Reduktionismus. Die stochastische Dynamik auf niedrigen Skalen bestimmt die Dynamik auf den höheren (bottom-up). Stochastisch gesehen bedeutet dies auch, dass Information über den Anfangszustand verloren geht. Auf gröberen Gittern betrachtet man schließlich verhältnismäßig weniger Gitterpunkte und die Mittelung sorgt dafür, dass ein bestimmter Anteil (der hochfrequente) des Feldes für größere Skalen nicht mehr zugänglich ist. Im Übrigen ist gleichermaßen der umgekehrte Weg möglich: Die Dynamik auf niedrigeren Levels wird aus der auf gröberen bestimmt (top-down). Es stellt sich auch hier die Frage, wie der Ablauf der Dynamik auf der feineren Skala bestimmt werden kann. Es wird in diesem Fall Information „aufgeschlüsselt". Bei Übergängen, gleich in welcher Richtung, erweist es sich als sinnvoll, den Zustand zu betrachten, der im Sinne der Dynamik invariant ist. Dies ist der Gleichgewichtszustand. Als Beispiel zur Wahl des Blockspins betrachte man einen Ferromagneten. Hierbei kann ein Blockspin über die totale Magneti-

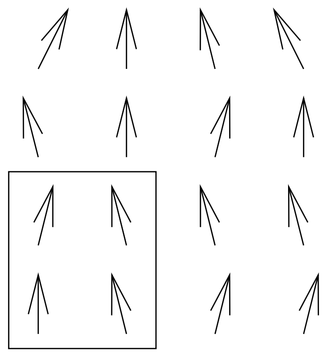


Abbildung 2: Beispiel eines Blocks dessen Magnetisierung sich aus vier Elementarmagneten ergibt

sierung eines Gebietes mehrerer Elementarmagneten definiert werden. Im Falle des Isingspins betrachtet man einen booleschen Blockspin. Hier kommt man mit einer a priori-Wahl des Blockspins aus. Hat man die totale Magnetisierung, so lassen sich Wahrscheinlichkeitsaussagen über die Elementarmagneten machen. Diese top-down-Wirkung entspricht wieder einem reduktionistischen Bild. Schwieriger gestaltet sich die Blockspinwahl in komplizierteren Systemen. In chemischen, biologischen oder selbst gesellschaftlichen Systemen [13] geht man von verschiedenen Betrachtungsebenen aus. Für alle diese Fälle betrachtet man den Blockspin als **zusammengesetztes Objekt**. Und welche Objekte soll man nun zu einem solchen machen, wenn ein System nun keine a priori-Wahl des Blockspins anbietet? Unterschiedliche Zusammenschlüsse führen zu unterschiedlichen Blockspins, und damit zu einer wachsenden Anzahl von Möglichkeiten, insbesondere wenn man zu noch größeren Skalen übergeht. Das Problem, all diese Möglichkeiten simultan zu betrachten, wird schließlich zu komplex. Eine Blockspinkonstruktion als kognitiver Prozess bietet möglicherweise einen Ansatz des Auswegs: Sind die Objekte (z.B. Organismen) in der Lage, Aussagen oder Prognosen über die Dynamik ihrer Umgebung zu machen, so ergeben sich hieraus bestimmte Blockspinkandidaten. Welche von diesen man letztlich ausprobieren müsste, ist ein noch nicht gelöstes Problem [12, 24].

3 Unterraumkorrekturverfahren

Es werden nun Projektionsoperatoren eingeführt, mit deren Hilfe Teilräume des Funktionenraumes über einem Gitter betrachtet werden. Die Iterationsverfahren werden anschließend als Unterraumkorrekturverfahren formuliert. Diese Methode wurde im Wesentlichen von Xu [1] entwickelt. Unter Verwendung der von ihm definierten Parameter werden zwei Fundamentaltheoreme zur Abschätzung der Konditionszahl und der Iterationsmatrix in verschärfter Form dargestellt.

3.1 Projektionsoperatoren

Wir erinnern uns kurz an den Formalismus des Kapitels 2.1. Sei $\mathcal{V}$ der Funktionenraum über dem hyperkubischen Gitter Λ, mit Punkten $z, z', \ldots \in \Lambda$, $\mathcal{V} = \{f | f : \Lambda \to \mathbb{V}\}$, wobei $\mathbb{V}$ zunächst ein beliebiger, endlich dimensionaler Vektorraum ist. Man kann sogenannte Vektorbündel über Λ betrachten, wobei jedem Punkt $z \in \Lambda$ ein Vektorraum $\mathbb{V}_z$ zugeordnet ist. Diese Vektorräume sind isomorph. Schließlich ergeben sich nun also Schnitte des Vektorbündels $f : z \to f(z) \in \mathbb{V}_z$ (mit Werten $f(z) \in \mathbb{V}_z$).
$\mathcal{V}$ sei nun eben ein komplexer, endlich dimensionaler Hilbertraum, versehen mit dem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Der Problemoperator $L : \mathcal{V} \to \mathcal{V}$ sei strikt positiv. Die Problemgleichung lautet

$$Lu = f, \tag{10}$$

mit $u, f \in \mathcal{V}$. Wir betrachten nun fixierte Unterräume $\mathcal{V}_i \in \mathcal{V}, i = 1, ..., J$, so dass sich der Vektorraum $\mathcal{V}$ gemäß

$$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^{J} \mathcal{V}_i \tag{11}$$

zerlegen lässt. Grundsätzlich werden hier keine linearen Unabhängigkeiten gefordert.
Xu [1] folgend definieren wir für jedes i:

$$L_i : \mathcal{V}_i \to \mathcal{V}_i$$

via

$$\langle L_i u_i, v_i \rangle = \langle L u_i, v_i \rangle$$

für alle $u_i, v_i \in \mathcal{V}_i$. Es sei $\mathcal{V}^i$ der Raum der Funktionen auf dem i-ten Blockgitter Λ^i, mit Punkten $x, x', \ldots \in \Lambda^i$, L^i ein noch zu bestimmender darauf operierende Operator.

$$L^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V}^i$$

Mehrgitteralgorithmen basieren auf einer Sequenz von Unterräumen:

$$\mathcal{M}_1 \subset \mathcal{M}_2 \subset ... \subset \mathcal{M}_J = \mathcal{V}$$

Bemerkung: Man könnte beispielsweise $\mathcal{M}_i = \sum_{j \geq i} \mathcal{V}_j$ wählen.

Nun kann man für jedes i die **orthogonalen Projektoren**

$$Q_i : \mathcal{V} \to \mathcal{V}_i \tag{12}$$

und

$$P_i : \mathcal{V} \to \mathcal{V}_i \tag{13}$$

durch die Forderungen

$$\begin{aligned} \langle Q_i u, v_i \rangle &= \langle u, v_i \rangle \\ \langle P_i u, v_i \rangle_L &= \langle u, v_i \rangle_L, \end{aligned}$$

für alle $u \in \mathcal{V}, v_i \in \mathcal{V}_i$, definieren [1].

Satz 3.1 *Q_i ist strikt positiv, somit selbstadjungiert, bezüglich des Skalarprodukts $\langle \cdot, \cdot \rangle$. P_i ist strikt positiv, somit selbstadjungiert, bezüglich des Skalarprodukts $\langle \cdot, \cdot \rangle_L$. Desweiteren sind die Projektoren idempotent.*

Beweis: $Q_i u, P_i u \in \mathcal{V}_i \Rightarrow \langle Q_i u, v \rangle = \langle Q_i u, Q_i v \rangle = \langle u, Q_i \rangle$
$\langle P_i u, v \rangle_L = \langle P_i u, P_i v \rangle_L = \langle u, P_i v \rangle_L$ $\square$

Lemma 1

$$L_i P_i = Q_i L \tag{14}$$

Beweis: $\langle Q_i L u, v_i \rangle = \langle L u, v_i \rangle = \langle u, v_i \rangle_L = \langle P_i u, v_i \rangle_L = \langle P_i u, L v_i \rangle = \langle P_i u, L_i v_i \rangle$ $\square$

Die Restriktion der Problemgleichung (10) auf $\mathcal{V}_i$ lautet

$$L_i u_i = f_i, \tag{15}$$

mit $u_i = P_i u$ und $f_i = Q_i f$.

Allgemeine Anmerkung: In Hinblick auf einen universellen Formalismus ist zu überlegen, Problemoperatoren als Abbildung von einem Vektorraum $\mathcal{V}$ in seinen Dualraum $\mathcal{V}^*$ zu betrachten. Dabei verliert Q_1 allerdings seine Eigenschaft als idempotenter Projektor.

3.2 Präkonditionierung und Korrekturen

Sei B ein strikt positiver Operator, $Lu = f$ die Problemgleichung. Unter **Prä- oder Vorkonditionierung** versteht man schließlich die Betrachtung der Gleichung

$$BLu = Bf.$$

B ist dann der sogenannte **Präkonditionierer**, und in dieser Rolle ein guter, sofern der dadurch modifizierte Problemoperator BL eine wesentlich kleinere Konditionszahl besitzt: $\kappa(BL) \ll \kappa(L)$.
BL ist nicht zwingend symmetrisch: $(BL)^* = L^*B^* = LB^*$

Bemerkung: Man erinnere sich an die Vorbemerkung in Abschnitt 2.2. Sei S der Operator, der die Transformation von dem Erzeugendensystem $\mathcal{E}$ zum Basissystem $\mathcal{B}$ beschreibt, mit $L^{\mathcal{E}} = S^t L^{\mathcal{B}} S$, $f^{\mathcal{E}} = S^t f^{\mathcal{B}}$, so kann man von einer Art semidefiniter Präkonditionierung des Gleichungssystems $L^{\mathcal{B}} u^{\mathcal{B}} = f^{\mathcal{B}}$ sprechen [2].

3.2.1 Methode der parallelen Unterraumkorrektur(Jacobi-Iteration)

u^k sei die k-te Näherungslösung der Problemgleichung, das zugehörige Residuum lautet $r^k = f - Lu^k$.
Schränkt man die Residualgleichung $Le = r^k$ auf den Unterraum $\mathcal{V}_i$ ein, so erhält man $e_i = L_i^{-1} Q_i r^k \approx R_i Q_i r^k$, wobei R_i **approximatives Inverses** von L_i ist und Q_i der in (3.1) definierte Projektor. Xu definiert den Operator

$$B = \sum_{i=1}^{J} R_i Q_i. \tag{16}$$

Satz 3.2 *Unter der Annahme, dass R_i symmetrisch und positiv ist, ist auch B symmetrisch und positiv definit.*

Beweis: $\langle Bv, v\rangle \overset{(16)}{=} \sum_{i=1}^{J} \langle R_i Q_i v, v\rangle \overset{Def.Q_i}{=} \sum_{i=1}^{J} \langle R_i Q_i v, Q_i v\rangle \geq 0, \forall v \in \mathcal{V}$, R_i symmetrisch $\Rightarrow B$ symmetrisch. □

Die Korrektur der Näherungslösung ergibt sich schließlich aus Addition der Korrekturen der einzelnen Unterräume:

$$u^{k+1} = u^k + B(f - Lu^k) \tag{17}$$

Diese parallele (oder auch additive) Unterraumkorrekturmethode ist nichts als eine verallgemeinerte Jacobi-Iteration. Überdies erhält man aus (17):

$$u - u^{k+1} = (I - T)(u - u^k),$$

wobei

$$T = BL = \sum_{i=1}^{J} T_i$$
$$T_i = R_i Q_i L = R_i L_i P_i$$

Satz 3.3 *Es gilt $T_i v = T_i v_i$, desweiteren ist T selbstadjungiert bezüglich des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle_L$.*

Beweis: $T_i v = R_i L_i P_i v \overset{\text{Satz 3.1}}{=} R_i L_i P_i^2 v = R_i L_i P_i v_i = T_i v_i$; $\langle Tv, v\rangle_L = \langle BLv, Lv\rangle = \langle v, Tv\rangle_L$ folgt sofort aus der Selbstadjungiertheit von B. □

Bemerkung: Man sollte beachten, dass dieses Jacobi-Verfahren auf lineare Abhängigkeiten, bezüglich der Zerlegung in die Unterräume $\mathcal{V}_i$, empfindlich reagiert. Diese Tatsache ist leicht einzusehen, wenn man sich daran erinnert, dass sich die Korrekturen der einzelnen $\mathcal{V}_i$ addieren. Wird einer dieser Teilräume mehrfach berücksichtigt, so wird auch dementsprechend oft korrigiert.

3.2.2 Methode der sukzessiven Unterraumkorrektur (Gauß-Seidel-Iteration)

Hierbei ist ein Iterationsschritt in J Teilschritte bei dem unsymmetrischen Verfahren, bzw. in $2J$ Schritte bei dem symmetrischen Verfahren unterteilt. Man betrachtet also Näherungslösungen u^k mit $k \notin \mathbb{Z}$ (für $J \neq 1$).
Die **unsymmetrische** Iteration ergibt sich zu

$$u^{k+\frac{i}{J}} = u^{k+\frac{i-1}{J}} + R_i Q_i (f - L u^{k+\frac{i-1}{J}}) \tag{18}$$

für $i = 1, \ldots J$. Wir betrachten wiederum

$$u - u^{k+\frac{i}{J}} = (I - T_i)(u - u^{k+\frac{i-1}{J}}),$$

mit $T_i = R_i Q_i L = R_i L_i P_i$, welches dem der parallelen Korrektur entspricht. Insgesamt ergibt sich

$$u - u^{k+1} = M_J (u - u^k)$$

mit der **Iterationsmatrix** M_J, für welche hierbei

$$M_J = (I - T_J)(I - T_{J-1}) \ldots (I - T_1)$$

gilt. Die Iterationsvorschrift für den **symmetrischen** Fall lautet:

$$\begin{aligned} u^{k+\frac{i}{2J}} &= u^{k+\frac{i-1}{2J}} + R_i Q_i (f - L u^{k+\frac{i-1}{2J}}) \\ u^{k+\frac{J+i}{2J}} &= u^{k+\frac{J+i-1}{2J}} + R_{J-i+1} Q_{J-i+1} (f - L u^{k+\frac{J+i-1}{2J}}) \end{aligned}$$

für jeweils $i = 1 \ldots J$ (J Teilschritte werden jeweils auf- und abgelaufen). Mit der zugehörigen Iterationsmatrix

$$M_J^S = (I - T_1) \ldots (I - T_J)(I - T_J) \ldots (I - T_1) = M_J^* M_J.$$

3.3 Abschätzungen

Zur Abschätzung der Konditionszahl $\kappa(BL)$ und der Iterationsmatrix M_J sollen zunächst die Parameter K_0 und $K_1(S)$ folgendermaßen definiert werden:

- Für jedes $v \in \mathcal{V}$ existiert eine Zerlegung $v = \sum_{i=1}^{J} v_i$ mit $v_i \in \mathcal{V}_i$, so dass

$$\sum_{i=1}^{J} \langle R_i^{-1} v_i, v_i \rangle \leq K_0 \langle v, v \rangle_L. \tag{19}$$

Die K_0-Abschätzung hängt von der Güte der Approximation von R_i an L_i^{-1} ab. Zur Bestimmung des K_0 richte man sein Augenmerk zunächst auf den kleinsten Eigenwert von $R_i L_i$, es sei $\omega_0 := \min_{1 \leq i \leq J} \lambda_{\min}(R_i L_i)$. Desweiteren sei C_0 eine Abschätzung der Nichtdiagonalterme:

$$\sum_{i=1}^{J} \langle v_i, v_i \rangle_L \leq C_0 \langle v, v \rangle_L \tag{20}$$

für die Zerlegung $v = \sum_{i=1}^{J} v_i$. Dann ist in jedem Fall $K_0 \leq \frac{C_0}{\omega_0}$ [1].

- Sei $S \subset \{(i,j)\ , i,j = 1, \ldots J\}$, dann ist für jedes $u_i, v_i \in \mathcal{V}$ $K_1(S)$ definiert durch die Forderung

$$\sum_{(i,j) \in S} \langle T_i u_i, T_j v_j \rangle_L \leq K_1(S) \Big(\sum_{i=1}^{J} \langle T_i u_i, u_i \rangle_L \Big)^{1/2} \Big(\sum_{i=1}^{J} \langle T_i v_i, v_i \rangle_L \Big)^{1/2}.$$

Für eine verschärfte Form der Fundamentaltheoreme sind folgende Spezialfälle von Interesse:

(i) Für maximales $S_{\max} = \{(i,j), i,j = 0, \ldots J\}$ ist $K_1(S_{\max})$ definiert durch die Forderung

$$\sum_{i=1}^{J} \sum_{j=1}^{J} \langle T_i u_i, T_j v_j \rangle_L \leq K_1(S_{\max}) \Big(\sum_{i=1}^{J} \langle T_i u_i, u_i \rangle_L \Big)^{1/2} \Big(\sum_{i=1}^{J} \langle T_i v_i, v_i \rangle_L \Big)^{1/2}. \tag{21}$$

(ii) Für trianguläres $S_{\mathrm{tr}} = \{(i,j); i > j\}$ ist $K_1(S_{tr})$ definiert durch die Forderung

$$\sum_{i=1}^{J} \sum_{j=1}^{i-1} \langle T_i u_i, T_j v_j \rangle_L \leq K_1(S_{\mathrm{tr}}) \Big(\sum_{i=1}^{J} \langle T_i u_i, u_i \rangle_L \Big)^{1/2} \Big(\sum_{i=1}^{J} \langle T_i v_i, v_i \rangle_L \Big)^{1/2}. \tag{22}$$

Die Unterscheidung zwischen triangulärem und maximalem S ist eine Verallgemeinerung der Formulierung von Xu. Hiermit lassen sich die Xu'schen **Fundamentaltheoreme** verschärft formulieren.

Theorem 1 *Sei B ein Vorkonditionierer der sukzessiven Unterraumkorrektur, dann gilt*

$$\kappa(BL) \leq K_0 K_1(S_{\max}). \tag{23}$$

Theorem 2 *Für den Algorithmus (18) gilt mit* $\omega_1 = \max_i \rho(R_i L_i)$*:*

$$\|M_J\|_L^2 \leq 1 - \frac{2-\omega_1}{K_0(1+K_1(S_{\text{tr}}))^2} \tag{24}$$

Beweis zu Theorem 1: Mit $v = \sum_{i=1}^J v_i$ ist

$$\begin{aligned}
\|v\|^2 = \langle v, v\rangle_L = \sum_{i=1}^J \langle v_i, v\rangle_L &\overset{Def. P_i}{=} \sum_{i=1}^J \langle v_i, P_i v\rangle_L = \sum_{i=1}^J \langle (R_i R_i^{-1}) v_i, L_i P_i v\rangle \\
= \sum_{i=1}^J \langle R_i^{-1} v_i, R_i L_i P_i v\rangle &\overset{Cauchy-Schwarz}{\leq} \sum_{i=1}^J \langle R_i^{-1} v_i, v_i\rangle^{\frac{1}{2}} \langle T_i v, v\rangle_L^{\frac{1}{2}} \\
\leq \Big(\sum_{i=1}^J \langle R_i^{-1} v_i, v_i\rangle\Big)^{\frac{1}{2}} \Big(\sum_{i=1}^J \langle T_i v, v\rangle\Big)^{\frac{1}{2}} &\overset{(19)}{\leq} K_0^{\frac{1}{2}} \|v\|_L \langle Tv, v\rangle_L^{\frac{1}{2}} \\
\Rightarrow K_0^{-1} \leq \lambda_{\min}(BL) \leq \frac{\langle Tv, v\rangle_L}{\|v\|_L^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\|Tv\|_L^2 \leq \sum_{i,j=1}^J \langle T_i v, T_j v\rangle_L &\overset{(21)}{\leq} K_1(S_{\max}) \langle Tv, v\rangle_L \leq K_1(S_{\max}) \|Tv\|_L \|v\|_L \\
\Rightarrow \frac{\|Tv\|_L}{\|v\|_L} &\leq \lambda_{\max}(BL) \leq K_1(S_{\max}) \\
\Rightarrow \kappa(BL) &= \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} = K_0 K_1(S_{\max}) \quad \square
\end{aligned}$$

Beweis zu Theorem 2: Hierzu sind mehrere Teilschritte notwendig.
Zuerst betrachte man die Abschätzung $\|M_J\|_L \leq \delta^2$, was gleichbedeutend ist mit $\|v\|_L^2 \leq \frac{1}{1-\delta^2}(\|v\|_L^2 - \|M_J v\|_L^2)$. In einem weiteren Schritt wird die Gültigkeit der Ungleichung $(2-\omega_1)\sum_{i=1}^J \langle T_i M_{i-1} v, M_{i-1} v\rangle_L \leq \|v\|_L^2 - \|M_J v\|_L^2$, für alle $v \in V$, gezeigt:

$$\begin{aligned}
&\|M_i v\|_L^2 + \|(M_{i-1} - M_i)\|_L^2 + 2\langle (M_{i-1} - M_i) v, M_i v\rangle_L = \|M_{i-1}\|_L^2 \\
&\overset{(*)}{\Rightarrow} \|M_{i-1}\|_L^2 - \|M_i v\|_L^2 = \|T_i M_{i-1} v\|_L^2 + 2\langle T_i M_{i-1} v, M_i v\rangle_L \\
&\qquad \overset{(*),\text{Satz 3.3}}{=} \langle T_i M_{i-1} v, T_i M_{i-1} v\rangle_L + \langle T_i (I - T_i) M_{i-1} v, M_{i-1} v\rangle_L \\
&\qquad = \langle (2I - T_i) T_i M_{i-1} v, M_{i-1} v\rangle_L \\
&\qquad \geq (2-\omega_1) \langle T_i M_{i-1} v, M_{i-1} v\rangle_L
\end{aligned}$$

$(*)$: Es ist $M_{i-1} - M_i = T_i M_{i-1}$, insbesondere folgt hieraus die Äquivalenz von $I - M_{i-1}$ und $T_j M_{j-1}$.
Nach (22) gilt:

$$\sum_{S_{\text{tr}}} \langle T_i v, T_j M_{j-1} v\rangle_L \leq K_1(S_{\text{tr}}) \Big(\sum_{i=1}^J \langle T_i v, v\rangle_L\Big)^{\frac{1}{2}} \Big(\sum_{i=1}^J \langle T_j M_{j-1} v, M_{j-1} v\rangle_L\Big)^{\frac{1}{2}}$$

und damit schließlich:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{J}\langle T_i v, v\rangle_L &\leq \sum_{i=1}^{J}\langle T_i v, M_{i-1}v\rangle_L + \sum_{i=1}^{J}\langle T_i v, (I-M_{i-1})v\rangle_L \\
&\overset{(*)}{=} \sum_{i=1}^{J}\langle T_i v, M_{i-1}v\rangle_L + \sum_{S_{\mathrm{tr}}}\langle T_i v, T_j M_{j-1}v\rangle_L \\
&\leq \Big(\sum_{i=1}^{J}\langle T_i v, v\rangle_L\Big)^{\frac{1}{2}}\Big(\sum_{i=1}^{J}\langle T_i M_{i-1}v, M_{i-1}v\rangle_L\Big)^{\frac{1}{2}} \\
&\quad + K_1(S_{\mathrm{tr}})\Big(\sum_{i=1}^{J}\langle T_i v, v\rangle_L\Big)^{\frac{1}{2}}\Big(\sum_{i=1}^{J}\langle T_j M_{j-1}v, M_{j-1}v\rangle_L\Big)^{\frac{1}{2}} \\
\Rightarrow K_0^{-1} \leq \sum_{i=1}^{J}\langle T_i v, v\rangle_L &\leq (1-K_1(S_{\mathrm{tr}}))^2\frac{1}{2-\omega_1}\big(\|v\|_L^2 - \|M_J v\|_L^2\big)\ , \quad \square
\end{aligned}$$

3.4 Beispiel: Jacobi-Iteration auf dem fundamentalen Gitter

Wir wollen nun Theorem 2 auf den Fall eines einzigen Gitters anwenden. Die Iterationsmatrix lautet $M = I - D^{-1}L$, d.h. der Problemoperator werde hier durch seine Diagonalmatrix approximiert.

Bemerkung: Bei der Betrachtung von nur einem Teilraum entspricht die unsymmetrische sukzessive Korrektur (18) ohnehin der parallelen. Mit $J = 1$ folgt (17), was natürlich einen direkten Vergleich mit der gewöhnlichen Jacobi-Iteration erlaubt.

Es sei $\lambda_L\langle v,v\rangle \leq \langle Lv,v\rangle \leq \Lambda_L\langle v,v\rangle$ und $\|D\|$ der Eintrag der Diagonalmatrix D. (Zunächst sei L hierbei die Problemmatrix in ihrer nicht zu $L_{zz} = 1$ verallgemeinerten Form.) K_0 ergibt sich sofort aus Gleichung (19) zu

$$K_0 = \frac{\|D\|}{\lambda_L},$$

wegen $\langle Dv,v\rangle \leq \|D\|\lambda_L^{-1}\langle v,v\rangle$. Überdies erhält man

$$K_1(S_{\mathrm{tr}}) = 0 \qquad\qquad K_1(S_{\max}) = \frac{\Lambda_L}{\|D\|}.$$

Für maximales $S_{\max}$ folgt dies aus Einsetzen in Gleichung (21): $\langle D^{-1}Lv, D^{-1}Lv\rangle_L = \langle D^{-1}LD^{-1}Lv, Lv\rangle \leq \|D\|^{-1}\Lambda_L\langle D^{-1}Lv, v\rangle_L$. Außerdem ist: $\omega_1 = \rho(D^{-1}L) = \frac{\Lambda_L}{\|D\|}$.

Schließlich erhält man aus den Theoremen:

$$\kappa(BL) = \frac{\Lambda_L}{\lambda_L} \qquad \text{und}$$

$$\|M\|_L \leq 1 - \frac{1}{\lambda_L}(2\|D\| - \Lambda_L)$$

Mithilfe von Satz (2.3) ist leicht einzusehen, dass das Verfahren für $2\|D\| > \Lambda_L$ konvergiert, was im Einklang mit Korollar 1 ist.

4 Konstruktion der Unterräume

In Hinblick auf praktische Anwendungen ist die Konstruktion geeigneter Projektionsoperatoren unerlässlich. Vorerst werden hierzu Interpolationsoperatoren herangezogen, deren Kerne auf kompaktem Träger leben. Diese Eigenschaft ist, verglichen mit einer anderen Wahl der Interpolationskerne, eine nicht zu vernachlässigende Forderung. Die Konstruktion der Projektoren auf die entsprechenden Unterräume wird zunächst allgemein formuliert, insbesondere werden passende Restriktionsoperatoren ermittelt, die zusammen mit den Interpolatoren die Projektion ausmachen. Daraus ergibt sich eine Normierungsbedingung, sowie bestimmte Möglichkeiten der Transformation des Problemoperators auf das Blockgitter. Schließlich konkretisieren wir die Zerlegung der Teilräume in der Formulierung eines Zweigitterproblems, wo zudem eine Einteilung in hoch- und niederfrequente Moden vorgenommen wird.

4.1 Praktische Interpolationskerne

Wir betrachten die Sequenz von Unterräumen, wie in Kap. (3.1):

$$\mathcal{M}_1 \subset \mathcal{M}_2 \subset \ldots \subset \mathcal{M}_J = \mathcal{V}$$

und nehmen an, dass $\mathcal{M}_i = \sum_{j \leq i} \mathcal{V}_i$. Man betrachtet die Projektionsabbildungen

$$Q_i : \mathcal{V} \to \mathcal{V}_i \tag{25}$$

$$P_i : \mathcal{V} \to \mathcal{V}_i, \tag{26}$$

und geht nun davon aus, dass deren Konstruktion mithilfe eines Interpolationsoperators,

$$\mathcal{I}^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V}_i \subset \mathcal{V},$$

der auf kompakten Träger lebt, vollzogen werden kann. Dann wählt man $\mathcal{V}_i = \mathcal{I}^i \mathcal{V}^i$. Es seien $\mathcal{C}^i$ und $\mathcal{E}^i$ Restriktionsabbildungen der Form

$$\mathcal{E}^i, \mathcal{C}^i : \mathcal{V} \to \mathcal{V}^i. \tag{27}$$

Somit lauten die Projektoren

$$Q_i = \mathcal{I}^i \mathcal{C}^i$$
$$P_i = \mathcal{I}^i \mathcal{E}^i.$$

Satz 4.1 *Gegeben sei ein Interpolationsoperator $\mathcal{I}^i$ derart, dass die Abbildung $\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V}^i$ invertierbar sei. Definiert man die Mittelungsoperatoren $\mathcal{C}^i$ und $\mathcal{E}^i$ zu $\mathcal{C}^i = (\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}$ und $\mathcal{E}^i = (\mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}L$, so erhält man Projektoren der Form*

$$\begin{aligned} Q_i &= \mathcal{I}^i(\mathcal{I}^*\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*} = \mathcal{I}^i\mathcal{C}^i \\ P_i &= \mathcal{I}^i(\mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}L. \end{aligned}$$

Überdies gelten die ***Normierungsbedingungen***

$$\begin{aligned} \mathcal{C}^i\mathcal{I}^i &= 1 \\ \textit{und} \quad \mathcal{E}^i\mathcal{I}^i &= 1. \end{aligned} \tag{28}$$

<u>Beweis:</u> Es sei $V^i \in \mathcal{V}^i$ und somit $v_i = (\mathcal{I}^i V^i) \in \mathcal{V}_i$. Schließlich gehe man unter Verwendung des Ansatzes $Q_i = \mathcal{I}^i\mathcal{C}^i$ von der Definition: $\langle Q_i u, v_i\rangle = \langle \mathcal{I}^i\mathcal{C}^i u, \mathcal{I}^i V^i\rangle = \langle u, \mathcal{I}^i V^i\rangle = \langle u, v_i\rangle$ aus, woraus man die Identität $\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i\mathcal{C}^i = \mathcal{I}^{i*}$ erhält, mit $\mathcal{C}^i = (\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}$, das dem angenommenen Mittelungsoperator entspricht. Einsetzen dessen ergibt den Projektor Q_i. Analog verfahre man mit dem Projektor P_i: $\langle P_i u, v_i\rangle_L = \langle L\mathcal{I}^i\mathcal{E}^i u, \mathcal{I}^i V^i\rangle = \langle Lu, \mathcal{I}^i V^i\rangle = \langle u, v_i\rangle_L \Leftrightarrow \mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i\mathcal{E}^i = \mathcal{I}^{i*}L$ mit $\mathcal{E}^i = (\mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}L$. Die Normierungsbedingung folgt sofort. $\square$

Korollar 2 *Mit dem durch $\mathcal{C}^i = (\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}$ definierten* ***Restriktionsoperator*** *erhält man $L_i = \mathcal{I}^i\mathcal{C}^i L = Q_i L$.*

<u>Beweis:</u> L_i ergibt sich durch Einsetzen und geeignetes Umformen des Lemma 1

$$\begin{aligned} L_i\mathcal{I}^i(\mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}L &= \mathcal{I}^i(\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}L \\ \Rightarrow L_i &= \mathcal{I}^i(\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}L. \quad \square \end{aligned}$$

Satz 4.2 *Der Interpolationsoperator ist durch den Mittelungsoperator festgelegt.*

$$\mathcal{I}^i = \mathcal{C}^{i*}(\mathcal{C}^i\mathcal{C}^{i*})^{-1}$$

Dies entspricht einer verallgemeinerten ***Galerkin-Wahl****.*

<u>Beweis:</u> Mit $\mathcal{C}^i = (\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)^{-1}\mathcal{I}^{i*}$ folgt $\mathcal{C}^i\mathcal{C}^{i*} = (\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)^{-1}$ und schließlich $\mathcal{I}^i = \mathcal{C}^{i*}(\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)$ $\square$.

Nun kann man den Problemoperator des Ausgangsgitters auf verschiedene Weise auf das i-te Blockgitter transformieren.

Definition:

$$\begin{aligned} L^i &:= \mathcal{C}^i L\mathcal{I}^i = \mathcal{C}^i L_i\mathcal{I}^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V}^i \\ \hat{L}^i &:= \mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i = \mathcal{I}^{i*}L_i\mathcal{I}^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V}^i \end{aligned} \tag{29}$$

Satz 4.3 *Unter der Bedingung $\mathcal{C}^i\mathcal{I}^i = 1$ gelten die folgenden Gleichungen:*

$$\begin{aligned} \mathcal{I}^i L^i = L_i\mathcal{I}^i &= \mathcal{C}^{i*}\hat{L}^i \\ L^i &= (\mathcal{I}^{i*}\mathcal{I}^i)^{-1}\hat{L}^i \end{aligned}$$

4.2 Formulierung des Zweigitterproblems

Man gehe im Folgenden von einem fundamentalen Gitter Λ mit zugehörigem Funktionenraum $\mathcal{V}$ und einem Blockgitter Λ^1 und dessen Funktionenraum $\mathcal{V}^1$ aus, so dass die zur Bildung der Projektoren herangezogenen Operatoren Abbildungen gemäß

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &: \mathcal{V} \to \mathcal{V}^1 \\ \text{und}\quad \mathcal{I} &: \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}_1 \end{aligned}$$

sind. Es sei nun

$$Q_1 = \mathcal{I}\mathcal{C} : \mathcal{V} \to \mathcal{V}_1.$$

Unter der Annahme, dass sich der Vektorraum $\mathcal{V}$ nach Gleichung (11), im Zweigitterfall eben nach $\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 + \mathcal{V}_2$, zerlegen lässt, definieren wir uns einen weiteren Projektor

$$Q_2 = I - \mathcal{I}\mathcal{C} : \mathcal{V} \to \mathcal{V}_2.$$

Bemerkung: Die daraus resultierende Sequenz der Unterräume lautet $\mathcal{M}_1 = \mathcal{V}_1 \subset \mathcal{M}_2 = \mathcal{V}$.

Man kann jedes $v \in \mathcal{V}$ gemäß $v = v_1 + v_2$ zerlegen, wobei

$$\begin{aligned} v_1 &= Q_1 v = \mathcal{I}\mathcal{C}v = \mathcal{I}V^1 && \text{mit}\quad v_1 \in \mathcal{V}_1 = \mathcal{I}\mathcal{V}^1 \\ v_2 &= Q_2 v = (I - \mathcal{I}\mathcal{C})v && \text{mit}\quad v_2 \in \mathcal{V}_2 = (I - \mathcal{I}\mathcal{C})\mathcal{V}. \end{aligned}$$

Unter Verwendung des Mittelungsoperators $\mathcal{C} = (\mathcal{I}^*\mathcal{I})^{-1}\mathcal{I}^*$ aus Satz 4.1 und der daraus folgenden Normierungsbedingung (28) verschwindet das Blockmittel der Elemente $v_2 \in \mathcal{V}_2$, wegen $\mathcal{C}\mathcal{V}_2 = \mathcal{C}(I - \mathcal{I}\mathcal{C})\mathcal{V} = 0$. Die Information über den Teilraum $\mathcal{V}_2$, der damit Kern der Mittelungsoperation ist, geht also beim Übergang auf das Blockgitter verloren. Im Fourierspektrum zeigt sich, dass es sich hierbei um die hochfrequenten Anteile handelt. Wir schreiben im weiteren Verlauf auch $\mathcal{V}^h := \mathcal{V}_2$ für den **Raum hochfrequenter Moden**.
Andererseits bleibt die Information des Teilraums $\mathcal{V}_1 = \mathcal{I}\mathcal{V}^1$ unter der Mittelung erhalten. $\mathcal{V}_1$ ist das Bild der Blockspins $\mathcal{C}v = V^1 \in \mathcal{V}^1$ unter einer Interpolationsabbildung $\mathcal{I} : \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}_1$. $\mathcal{V}^l := \mathcal{V}_1$ ist der **Raum der niederfrequenten Moden**.

Satz 4.4 *Der Funktionenraum $\mathcal{V}$ hat eine Darstellung gemäß*

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_\mathcal{C} \oplus \mathcal{I}\mathcal{V}^1,$$

wobei $v \in \mathcal{V}_\mathcal{C}$, falls $\mathcal{C}v = 0$. $\mathcal{V}_\mathcal{C}$ ist der Kern der Abbildung $\mathcal{C}$.

Beweis: Jedes $v \in \mathcal{V}$ lässt sich nach $v = \mathcal{I}V^1 + v_2$ zerlegen, mit $V^1 = \mathcal{C}v \in \mathcal{V}^1$; also $\mathcal{I}V^1 \in \mathcal{I}\mathcal{V}^1$ und $v_2 \in \mathcal{V}_{\mathcal{C}}$, da $\mathcal{C}v_2 = 0$. Desweiteren ist die Zerlegung wegen des verschwindenden Skalarprodukts, $\langle \mathcal{I}V^1, v_2 \rangle \overset{4.2}{=} \langle V^1, (\mathcal{C}\mathcal{C}^*)^{-1}\mathcal{C}v^h \rangle = 0$, orthogonal.$\square$

Anmerkung: Die mithilfe von $\mathcal{I}$ konstruierten hoch- und niederfrequenten Räume sind nicht orthogonal bezüglich des Skalarprodukts $\langle \cdot, \cdot \rangle_L$. Folglich lässt sich also der Ausdruck $\langle v, Lv \rangle$ nicht ohne gemischte Terme in einen nieder- und einen hochfrequenten Anteil aufspalten: $\langle v, Lv \rangle \neq \langle v_1, L_1 v_1 \rangle + \langle v_2, L_2 v_2 \rangle$. Für die K_0-Abschätzung nach Xu (Gl. (19)), wird eben dieser Ausdruck benötigt. Wir werden später darauf zurückkommen.

5 Exakte Interpolationskerne

Als exakte Interpolationskerne $\mathcal{A}^i$ sollen nun solche Kerne bezeichnet werden, deren Bilder, für verschiedene i, orthogonal zum Kern des Mittelungsoperators $\mathcal{V}_{\mathcal{C}^i}$ bezüglich des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle_L$ sind. Konstruiert man die zugehörigen Interpolationsoperatoren nach dem Formalismus von Gawedzki und Kupiainen, so gilt dies vorerst für die Kerne der Operatoren mit endlichem κ.

5.1 Formales zu den Interpolationskernen

Wiederum sei Λ ein hyperkubisches Gitter, zunächst beliebiger Dimension. Wir bezeichnen den Hilbertraum, genauer den Raum der Funktionen von Λ in einen anderen Vektorraum $\mathbb{V}$, z. B. $\mathbb{R}$ oder $\mathbb{C}$, mit $\mathcal{V}$, $\mathcal{V} = \{f | f : \Lambda \to \mathbb{V}\}$. $\mathcal{V}^i$ sei dementsprechend der Funktionenraum über dem i-ten Blockgitter Λ^i. Es sei nun

$$\mathcal{C}^i : \mathcal{V} \to \mathcal{V}^i$$

ein Mittelungsoperator. Sei $\mathcal{A}$ der exakte Interpolationsoperator

$$\mathcal{A}^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V}$$

eine Abbildung zwischen den Hilberträumen des i-ten Blockgitters und des fundamentalen Gitters. Im Allgemeinen kann man von dem **Gawedzki-Kupiainen-**Formalismus ausgehen [17]. Hier wird der Interpolationsoperator über die Extremierung der freien Wirkung ($S_{frei}(\phi) = \frac{1}{2}\langle\phi, L\phi\rangle$) bestimmt. Die Relationen lauten

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^i &= v\mathcal{C}^{i*}u^{-1} \\ u &= \mathcal{C}^i v\mathcal{C}^{i*} + \frac{1}{\kappa} \quad \to \mathcal{C}^i v\mathcal{C}^{i*}, \quad \text{für } \kappa \to \infty, \end{aligned} \tag{30}$$

mit dem Propagator $v = L^{-1}$ und dem sogenannten Blockpropagator u.
Die **Nebenbedingung** lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{C}^i\mathcal{A}^i &= I - \frac{1}{\kappa}u^{-1} =: \mathcal{K}^{-1} \\ &\to I, \text{ für } \kappa \to \infty. \end{aligned}$$

Für den Fluktuationspropagator, dem Propagator des hochfrequenten Feldes, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \Gamma_i &= (L + \kappa\mathcal{C}^{i*}\mathcal{C}^i)^{-1} \\ &= L^{-1}(I - \mathcal{C}^{i*}\mathcal{A}^i) = (I - \mathcal{A}^i\mathcal{C}^i)L^{-1} \end{aligned}$$

Es gilt nun allgemein (aus (30)):

$$L\mathcal{A}^i = \mathcal{C}^{i*}u^{-1} \tag{31}$$

und eben:

$$L\Gamma_i = I - \mathcal{C}^{i*}\mathcal{A}^{i*} \tag{32}$$

Es handelt sich hier um Interpolationskerne, die keinen kompakten Träger, also keine strikte Lokalität, besitzen. Wir sprechen in diesem Fall von **exakten Interpolationskernen**. Diese besitzen exponentiell abfallende Schwänze, die außerhalb ihres Trägers mit wachsendem κ stärker oszillieren (siehe auch [20]). (Die Software zur graphischen Darstellung findet man in [21].)

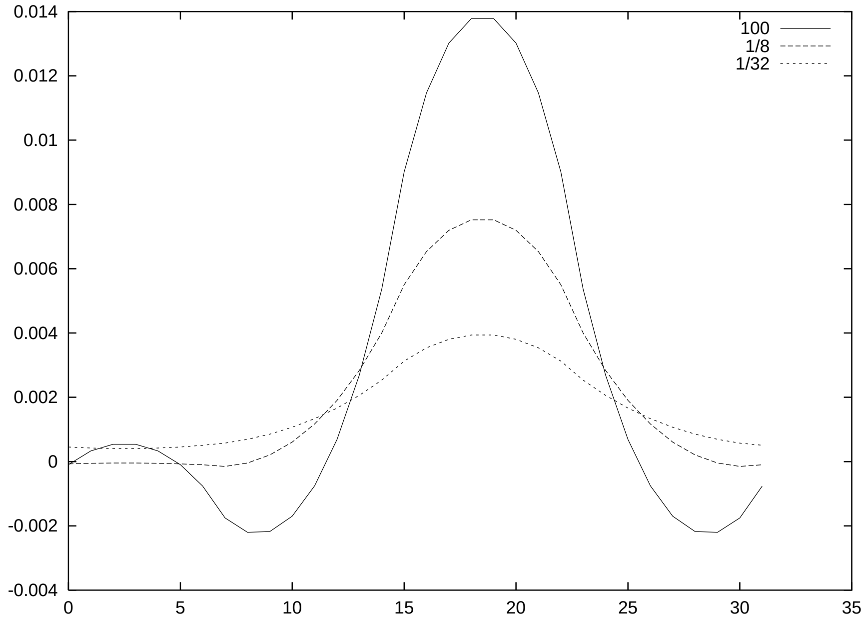


Abbildung 3: Exakte $\mathcal{A}$-Kerne für $\kappa = 100$, $\frac{1}{8}$, $\frac{1}{32}$, hier auf einem Gitter bestehend aus 35 Punkten.

5.2 Hoch- und niederfrequenter Raum

Man kann nun mithilfe des exakten Interpolationskerns ebenfalls einen Projektionsoperator und den dazugehörigen Unterraum konstruieren. Wie schon in Kapitel (4.2) gehen wir wieder von einem fundamentalen Gitter Λ und einem Blockgitter Λ^1 aus. $\mathcal{V}$ und $\mathcal{V}^1$ seien die zugehörigen Hilberträume. Sei nun $\mathcal{V}_1 \subset \mathcal{V}$ ein Unterraum und $\tilde{Q}_1' := \mathcal{A}'\mathcal{C}$ ein Projektor auf diesen. Wir verwenden die für die Universalität interessanten exakten Interpolations- und Mittelungsoperatoren

$$\begin{aligned} \mathcal{A}' &:= \mathcal{A}\mathcal{K} = \mathcal{A}(I - \frac{1}{\kappa}u^{-1})^{-1} && : \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}_1 \\ \mathcal{C}' &:= \mathcal{K}\mathcal{C} = (I - \frac{1}{\kappa}u^{-1})^{-1}\mathcal{C} && : \mathcal{V} \to \mathcal{V}^1. \end{aligned}$$

$\mathcal{A}$ sei hierbei der exakte Interpolationsoperator bei beliebigem κ. Für unendliches κ gilt $\mathcal{A}'\mathcal{K} = \mathcal{A}$. Die Operatoren erfüllen die Normierungsbedingung

$$\mathcal{C}\mathcal{A}' = \mathcal{C}'\mathcal{A} = 1. \tag{33}$$

Ein beliebiges $v \in \mathcal{V}$ lässt sich nun gemäß

$$v = \tilde{Q}_1'v + (I - \tilde{Q}_1')v = \mathcal{A}'\mathcal{C}v + (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})v =: v_1 + v_2$$

zerlegen. Man betrachtet die zwei Unterräume

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_2 &= (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})\mathcal{V} = \{v \in \mathcal{V}; \mathcal{C}v = 0\} \\ \mathcal{V}_1 &= \mathcal{A}'\mathcal{C}\mathcal{V}. \end{aligned}$$

Bemerkung: Diese Unterräume sind vorerst nicht mit den in Abschnitt 4.2 konstruierten zu verwechseln.

Offensichtlich verschwindet das Blockmittel der Elemente von $\mathcal{V}_2$, $\mathcal{C}v_2 = (\mathcal{C} - \mathcal{C}\mathcal{A}'\mathcal{C})v = 0$. Man erhält wiederum einen **hochfrequenten** Anteil $\mathcal{V}_2$, $v_1 \in \mathcal{V}_1$ und einen **niederfrequenten** Anteil $\mathcal{V}_1$ (er ist das Bild eines Blockspins unter einer Interpolationsabbildung $\mathcal{A}'$) von $\mathcal{V}$.

Satz 5.1 *Hoch- und niederfrequente Anteile, die ausgehend von exakten Interpolationsoperatoren $\mathcal{A}' := \mathcal{A}\mathcal{K}$ konstruiert werden, sind bezüglich des Skalarprodukts $\langle \cdot, \cdot \rangle_L$ zueinander orthogonal. Dies gilt auch für endliches κ, unter der Verwendung der Normierungsbedingung (33).*

Beweis: $\langle (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})v, L\mathcal{A}'\mathcal{C}v' \rangle \stackrel{(31)}{=} \langle (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})v, \mathcal{C}^* u^{-1}\mathcal{C}'v' \rangle = \langle \mathcal{C}(I - \mathcal{A}'\mathcal{C})v, u^{-1}\mathcal{C}'v' \rangle = 0$ $\square$

6 Praktische Interpolationskerne im Kontext

Es wird nun eine „Brücke“ zwischen den exakten und den in Kapitel 4 eingeführten praktischen Interpolationskernen mit kompaktem Träger geschlagen. Insbesondere unterscheiden sie sich um einen Term, der unter vorherrschenden Dirichlet-Randbedingungen auf dem Trägerrand des praktischen Kerns interpretiert wird. Man erhält unterschiedliche Interpolationsoperatoren, die somit zu unterschiedlichen Transformationen zwischen Blockgitter und Gitter und schließlich zu verschiedenen Operatoren auf dem Blockgitter führen. Diese unterscheiden sich durch einen Korrekturterm. Es zeigt sich, dass ein Blockoperator, der aus der Transformation der exakten Operatoren hervorgeht, als Schur-Komplement interpretiert werden kann

6.1 Ansatz

Um den in Kap. (4.1) eingeführten praktischen Interpolationskern $\mathcal{I}$ in Verbindung mit dem exakten Kern $\mathcal{A}$ zu bringen, kann man nun folgenden **Ansatz** machen:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}^i(z,x) &= \mathcal{A}^i(z,x) + \int_{z'} \Gamma_i(z,z')h_i(z',x), \\ \text{kurz} \quad \mathcal{I}^i &= \mathcal{A}^i + \Gamma_i h_i \end{aligned} \tag{34}$$

wobei $z, z' \in \Lambda$ Punkte des fundamentalen Gitters sind, $x \in \Lambda^i$ ein Punkt des i-ten Blockgitters ist. Die zugehörigen Operatoren sind hierbei Abbildungen der Art:

$$\begin{aligned} &\mathcal{A}^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V} \qquad && \Gamma_i : \mathcal{V} \to \mathcal{V} \\ &\mathcal{I}^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V}_i && h_i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V} \end{aligned}$$

Γ_i ist der bereits eingeführte Fluktuationspropagator, h_i wird in dem folgendenen Abschnitt, im Zuge der Betrachtung der Randbedingungen, auch als Randbeitrag interpretiert.

6.2 Dirichlet-Randbedingungen

Wir betrachten das Gebiet $\Omega \subset \Lambda$ als Träger des praktischen Interpolationskerns, $\partial\Omega$ sei dessen Rand. Liegen an einem Punkt $z \in \partial\Omega$ homogene Dirichlet-Randbedingungen vor, so verschwindet der Funktionswert an diesem Punkt. Unmittelbar außerhalb des Gebietes verschwindet also die Funktion $f(z)$, $z \in \Lambda$.

$$\begin{aligned} L^{Dirichlet,\Omega} f(z) &= \int_{z' \in \Omega} L(z,z')f(z') \\ &= Lf(z) - \int_{z' \notin \Omega} L(z,z')f(z') \end{aligned} \tag{35}$$

Der Term $\int_{z'\notin\Omega} L(z,z')f(z')$ enthält nur Beiträge von den Kanten des Gebietsrandes. Betrachtet man nun als Funktion den praktischen Interpolationskern $\mathcal{I}$, so kann man die Randbeiträge h_i folgendermaßen definieren:

$$
\begin{aligned}
h_i(z,x) &= \int_{z'\notin\Omega} L(z,z')\mathcal{I}^i(z',x) \\
&\stackrel{(35)}{=} (L - L^{Dirichlet,\Omega})\mathcal{I}^i(z,x) \qquad (36)
\end{aligned}
$$

für festes $x \in \Lambda^i$. Die Idee ist es nun den Kern $\mathcal{I}$ wie einen „exakten" Interpolationskern für Problemoperatoren mit Dirichlet-Randbedingungen zu betrachten. Ausgehend von Gl. (31) schreibt man

$$
L^{Dirichlet,\Omega}\mathcal{I}^i = \mathcal{C}^{i*}(L^{Dirichlet,\Omega})^i, \qquad (37)
$$

wobei $(L^{Dirichlet,\Omega})^i$ ein auf das Blockgitter transformierter Problemoperator mit Dirichlet-Randbedingungen sei.

Satz 6.1 *Es gelte die Normierungsbedingung $\mathcal{C}^i\mathcal{I}^i = I$ und Gleichung (37). Sei nun h_i gemäß Gleichung (36) definiert, so ergibt sich der praktische Interpolationskern $\mathcal{I}^i$ entsprechend Gleichung (34) zu $\mathcal{I}^i = \mathcal{A}^i + \Gamma_i h_i$.*

Beweis: $\Gamma_i h_i = \Gamma_i L\mathcal{I}^i - \Gamma_i L^{Dirichlet,\Omega}\mathcal{I}^i = \Gamma_i L\mathcal{I}^i - \Gamma_i\mathcal{C}^{i*}(L^{Dirichlet,\Omega})^i \stackrel{\mathcal{C}^i\Gamma_i=0}{=} \Gamma_i L\mathcal{I}^i \stackrel{(31)}{=} (I - \mathcal{A}^i\mathcal{C}^i)\mathcal{I}^i \stackrel{\mathcal{C}^i\mathcal{I}^i=I}{=} \mathcal{I}^i - \mathcal{A}^i$ $\square$

In diesem Fall ist $h_i(z,x)$ nur an den Außenpunkten des Trägers mit Dirichlet-Randbedingungen von null verschieden. Andererseits kann man den Randbeitrag h_i als Differenz zwischen praktischem Kern $\mathcal{I}^i$ und exaktem $\mathcal{A}^i$, auf welche der Problemoperator angewandt wird, definieren:

Satz 6.2 *Unter der Annahme, es gilt*

$$
h_i = L\mathcal{I}^i - L\mathcal{A}^i
$$

und das Blockmittel des Fluktuationspropagators verschwindet ($\mathcal{C}^i\Gamma_i = 0$), erhält man ebenfalls Gl. (34).

Beweis: $\Gamma_i h_i = \Gamma(L\mathcal{I}^i - L\mathcal{A}^i) \stackrel{(32)}{=} \Gamma_i L\mathcal{I}^i - \Gamma_i\mathcal{C}^{i*}u^{-1} \stackrel{\mathcal{C}^i\Gamma_i=0,(31)}{=} (I - \mathcal{A}^i\mathcal{C}^i)\mathcal{I}^i = \mathcal{I}^i - \mathcal{A}^i$ $\square$

Bemerkung: Eine allgemeinere Formulierung der Dirichlet-Randbedingungen lautet folgendermaßen: Sei S ein System mit Objektmenge χ. Werden die Punkte $z \in \Lambda$ zu Blöcken zusammengefasst, so ist dies gleichbedeutend mit einer Konstruktion von Untersystemen S_x mit entsprechenden Objektmengen χ_x. Wir schreiben: $Lu(z) = \sum_{z'} L(z,z')u(z')$, mit $L(z,z') : \mathbb{V}_{z'} \to \mathbb{V}_z$, wodurch die Kanten

$b : z' \to z$ gegeben sind. $S^0 = \bigcup S_x$ sei die disjunkte Vereinigung der Untersysteme, die im Falle der Dirichlet-Randbedingungen folgendermaßen konstruiert werden kann:

$$L(z,z')^{Dirichlet,\Omega} = \begin{cases} L(z,z') & \text{für } z,z' \in \chi_x \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Wie die Abbildung zeigt, entstehen zwischen den Blöcken Zwischenwände, die

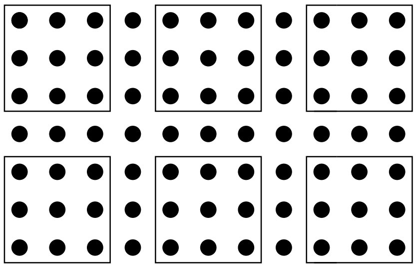


Abbildung 4: Aufteilung der Blöcke für Dirichlet-Randbedingungen

man eigentlich vermeiden möchte. Eine Blockkonstruktion, bei welcher $L(z,z') = 0$ nur in der Mitte einer Kante b mit Quelle und Ziel in benachbarten Blöcken, wird bezüglich der Neumann-Randbedingungen betrachtet.

6.3 Operatoren auf dem Blockgitter

Ausgehend von der Definition des praktischen Interpolationskerns (34) wird nun ein Blockpropagator eingeführt, mit dessen Hilfe der praktische Interpolationsoperator eine an Gleichung (31) erinnernde Umformung erfahren kann. Die explizite Gestalt dieses Propagators kann aus den bekannten Relationen der vorherigen Abschnitts abgeleitet werden. Schließlich erfolgt die gleiche Prozedur für endliches κ. In diesem Fall erhält man einen anschaulichen Ausdruck für den Zusammenhang der Problemoperatoren auf dem Blockgitter, die einerseits via exakter andererseits mittels praktischer Interpolationsoperatoren transformiert werden. Problemoperatoren, die durch Verwendung exakter Operatoren auf das Blockgitter gebracht werden, können als Schur-Komplement interpretiert werden.

6.3.1 Allgemeiner Fall

Wir können uns nun den sogenannten **approximierten Blockpropagator**

$$u_{approx}^{-1} := u^{-1} - \mathcal{A}^{i*} h_i$$

definieren.

Satz 6.3 *Für den approximierten Interpolationskern erhält man den der Relation (31) entsprechenden Ausdruck:*

$$L\mathcal{I}^i = h_i + \mathcal{C}^{i*} u^{-1}_{approx} \tag{38}$$

Beweis: $L\mathcal{I}^i \overset{(34)}{=} L\mathcal{A}^i - L\Gamma_i h_i \overset{(32),(31)}{=} \mathcal{C}^{i*}u^{-1} + h_i - \mathcal{C}^{i*}\mathcal{A}^{i*}h_i = \mathcal{C}^{i*}(u^{-1} - \mathcal{A}^{i*}h_i) + h_i = h_i + \mathcal{C}^{i*}u^{-1}_{approx}$ $\square$

Satz 6.4 *Unter Annahme der Gleichung (38) lautet der approximative Blockpropagator*

$$u^{-1}_{approx} = \mathcal{K}\mathcal{A}^{i*}L\mathcal{A}^i - \mathcal{A}^{i*}h_i \qquad \text{mit} \quad \mathcal{K} = (I - \frac{1}{\kappa}u^{-1})^{-1}$$

desweiteren erhält man

$$\mathcal{K}^{-1}u^{-1}_{approx} + h_i^*\Gamma_i\mathcal{C}^{i*}u^{-1}_{approx} = \mathcal{I}^{i*}(L\mathcal{I}^i - h_i).$$

Beweis: u^{-1}_{approx} ergibt sich sich aus

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}^{i*}u^{-1} - \mathcal{C}^{i*}\mathcal{A}^{i*}h_i &= \mathcal{C}^{i*}u^{-1}_{approx} \\
\overset{\mathcal{C}^i\mathcal{A}^i = \mathcal{K}^{-1}}{\Leftrightarrow} \mathcal{K}\mathcal{A}^{i*}L\mathcal{A}^i - \mathcal{A}^{i*}h_i &= u^{-1}_{approx} \\
\Leftrightarrow \mathcal{A}^{i*}L\mathcal{A}^i - \mathcal{K}^{-1}\mathcal{A}^{i*}h_i &= \mathcal{K}^{-1}u^{-1}_{approx}
\end{aligned}$$

und schließlich gilt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}^{i*}(L\mathcal{I}^i - h_i) &\overset{(38)}{=} \mathcal{I}^{i*}(h_i + \mathcal{C}^{i*}u^{-1}_{approx} - h_i) = \mathcal{I}^{i*}\mathcal{C}^{i*}u^{-1}_{approx} = (\mathcal{C}^i\mathcal{I}^i)^*u^{-1}_{approx} \\
&\overset{(34)}{=} (\mathcal{C}^i\mathcal{A}^i)^*u^{-1}_{approx} + (\mathcal{C}^i\Gamma_i h_i)^*u^{-1}_{approx} = \mathcal{K}^{-1}u^{-1}_{approx} + h_i^*\Gamma_i\mathcal{C}^{i*}u^{-1}_{approx}. \ \square
\end{aligned}$$

Satz 6.5 *Ausgehend von Gleichung (38) lautet die explizite Form des Blockpropagators, der in Gleichung (31) ($L\mathcal{A}^i = \mathcal{C}^{i*}u^{-1}$) auftritt,*

$$\begin{aligned}
u^{-1} &= \mathcal{K}\mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i + (I - \mathcal{K})\mathcal{I}^{i*}h_i - h_i^*\Gamma_i h_i \\
&= \mathcal{K}\mathcal{A}^{i*}L\mathcal{A}^i.
\end{aligned} \tag{39}$$

Beweis: $u^{-1} = u^{-1}_{approx} + \mathcal{A}^{i*}h_i = \mathcal{K}\mathcal{A}^{i*}L\mathcal{A}^i = \mathcal{K}\mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i + (I - \mathcal{K})\mathcal{I}^{i*}h_i - h_i^*\Gamma_i h_i.$ $\square$

6.3.2 Konventionen für den Fall $\kappa \to \infty$

Wir definieren nun einen auf das i-te Blockgitter transformierte Problemoperator gemäß

$$\tilde{L}^i := \mathcal{A}^{i*}L\mathcal{A}^i : \mathcal{V}^i \to \mathcal{V}^i.$$

Satz 6.6 *Für den Fall $\kappa \to \infty$, was gleichbedeutend ist mit $\mathcal{C}^i\mathcal{A}^i = 1$, gilt*

$$L\mathcal{A}^i = \mathcal{C}^{i*}\tilde{L}^i. \tag{40}$$

Beweis: Für unendliches κ erhält man für den Blockpropagator aus Satz 6.5, wegen $\mathcal{K} \overset{\kappa\to\infty}{\to} I$, $u^{-1} = \mathcal{A}^{i*}L\mathcal{A}^i =: \tilde{L}^i$. Dann gilt Gleichung (31). □

Das Analogon zu u^{-1}_{approx} sei nun L_{approx}, das sich, entsprechend Gleichung (38), zu

$$L\mathcal{I}^i =: h_i + \mathcal{C}^{i*}L^i_{approx}$$

definieren lässt. Es gilt demnach

$$L^i_{approx} = \tilde{L}^i - \mathcal{I}^{i*}h_i + h_i^*\Gamma_i h_i.$$

Satz 6.7 *Für endliches κ und $\mathcal{C}^i\mathcal{I}^i = 1$ erhält man für die effektiven Problemoperatoren*

$$L^i_{approx} = \mathcal{A}^{i*}(L\mathcal{A}^i - h_i) = \mathcal{I}^{i*}(L\mathcal{I}^i - h_i) \tag{41}$$

und

$$\tilde{L}^i = L^i_{approx} + \mathcal{A}^{i*}h_i = \mathcal{I}^{i*}L\mathcal{I}^i - h_i^*\Gamma_i h_i = \mathcal{A}^{i*}L\mathcal{A}^i. \tag{42}$$

Beweis: $\mathcal{I}^{i*}(L\mathcal{I}^i - h_i) = \mathcal{I}^{i*}(h_i + \mathcal{C}^{i*}L^i_{approx} - h_i) = \mathcal{I}^{i*}\mathcal{C}^{i*}L^i_{approx} = (\mathcal{C}^i\mathcal{I}^i)^*L^i_{approx} = L^i_{approx}$ □

Lemma 2 *Bezeichnen wir $\tilde{L}^i = \mathcal{A}^iL\mathcal{A}^i$ als **exakten Blockproblemoperator**, so folgt sofort aus Satz (6.7) mit Gl. (29) die Relation*

$$L^i_{exakt} := \tilde{L}^i = \hat{L}^i - h_i^*\Gamma_i h_i. \tag{43}$$

*$h_i^*\Gamma_i h_i$ ist positiv und somit selbstadjungiert und soll als **Korrekturterm** bezeichnet werden.*

Bemerkung: In Abschnitt 8.4 wird Gleichung (43) noch in Hinblick auf endliches κ verallgemeinert.

6.3.3 Schur-Komplement

Man betrachte wiederum eine Zerlegung in Blöcke $[x]$, die Räume zwischen diesen werden Separatoren genannt. Sei die Problemgleichung bezüglich irgend eines Basissystems dargestellt. Dieses werde nun in gleicher Weise partitioniert, so dass man schließlich aus der Problemgleichung eine Matrixgleichung der Form

$$\begin{pmatrix} L_{xx} & L_{xy} \\ L_{yx} & L_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_x \\ f_y \end{pmatrix}$$

erhält. Prinzipiell ist in dieser Form L_{xx} dem Inneren der Blöcke und L_{yy} dem Separatorgebiet zugeordnet. L_{xy} und L_{yx} stellt eine Koppelung zwischen diesen Gebieten dar. Dann lautet das Schur-Komplement:

$$K_{yy} := L_{yy} - L_{yx} L_{xx}^{-1} L_{xy},$$

mithilfe dessen sich das Inverse der Problemmatrix bezüglich eines Basissystems darstellen lässt [2]. Wir betrachten die Zerlegung in hoch- und niederfrequenten Teilraum unter Verwendung der eingeführten Projektoren:

- $Q_1 = \mathcal{I}\mathcal{C}$; $Q_2 = I - \mathcal{I}\mathcal{C}$
  für praktische Interpolationskerne $\mathcal{I}$
- $\tilde{Q}_1 = \mathcal{A}\mathcal{C}$; $\tilde{Q}_2 = I - \mathcal{A}\mathcal{C}$
  für exakte Interpolationskerne $\mathcal{A}$

Korollar 3 *Der exakte Problemoperator auf dem Blockgitter ist ein* ***Schur-Komplement****:*

$$L^1_{exakt} = \hat{L}^1 - h^* L_2^{-1} h$$

Für den hochfrequenten Teilraum ist $\Gamma = L_2^{-1}$. Hier verschwindet des Blockmittel. Wir multiplizieren die Gleichung von links mit $\mathcal{C}^*$ und von rechts mit $\mathcal{C}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}^* L^1_{exakt} \mathcal{C} &= \mathcal{C}^* \hat{L}^1 \mathcal{C} - \mathcal{C} h^* L_2^{-1} h \mathcal{C} \\ \mathcal{C}^* \mathcal{A}^* L \mathcal{A} \mathcal{C} &= \mathcal{C}^* \mathcal{I}^* L \mathcal{I} \mathcal{C} - \mathcal{C} h^* L_2^{-1} h \mathcal{C} \\ \tilde{Q}_1^* L \tilde{Q}_1 &= \underbrace{Q_1^* L Q_1}_{\text{ist begrenzt auf den Block } [x]} - \mathcal{C}^* h^* L_2^{-1} h \mathcal{C} \end{aligned}$$

Der Term $\mathcal{C}^* h^* L_2^{-1} h \mathcal{C}$ enthält die schon zuvor zu Randbeiträgen deklarierten Operatoren h.

7 Kanonische Wahl des Mittelungsoperators

Bereits in Abschnitt 4.2 wurde der Funktionenraum in einen hoch- und einen niederfrequenten eingeteilt. Ein Element des hochfrequenten Raumes soll nach hochfrequenten Eigenmoden des Problemoperators entwickelt werden. Wenn das Blockmittel der hochfrequenten Moden verschwinden soll, so ließe sich nach diesem Kriterium ein Mittelungsoperator konstruieren. Um einen geeigneten Mittelungsoperator zu konstruieren, gehen wir von einem genäherten Problemoperator aus, der mit verallgemeinerten von-Neumann-Randbedingungen versehen wird, so dass er nicht mehr zwischen verschiedenen Blöcken koppelt.

7.1 Von-Neumann-Randbedingungen

Vorab erinnere man sich an eine allgemeinere Formulierung der von-Neumann-Randbedingung für den gewöhnlichen Laplaceoperator: Wir gehen wiederum von einem Gebiet $\Omega \subset \Lambda$ aus, dessen Rand mit $\partial\Omega$ bezeichnet wird. Liegen homogene Neumann-Randbedingungen an einem Punkt $z \in \partial\Omega$ vor, so verschwindet die normale Ableitung der Funktion an diesem Punkt, bzw. die kovariante Ableitung bei Betrachtung des kovarianten Laplaceoperators.

Satz 7.1 *Für den Laplaceoperator mit von-Neumann-Randbedingungen gilt die Ungleichung*

$$-\Delta^{N,\Omega} \leq -\Delta.$$

Beweis:

$$\begin{aligned} -\Delta &\equiv \sum_{\mu} \nabla_\mu \nabla_{-\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\pm\mu} D_\mu^* D_\mu \\ -\Delta^{N,\Omega} &= \frac{1}{2} \sum_{\pm\mu:(z+\mu,z)\notin\partial\Omega} D_\mu^* D_\mu, \end{aligned}$$

mit $(D_\mu f)(z) = U(z, z+\mu) f(z+\mu) - f(z)$ und dem Paralleltransporter U, für $f(z) \in \mathbb{V}_z$. Es folgt schließlich:

$$\langle f, -\Delta - (-\Delta^{N,\Omega}) f \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\pm\mu:(z+\mu,z)\in\partial\Omega} \langle f, D_\mu^* D_\mu f \rangle \geq 0 \quad \square$$

Leider gilt Satz 7.1 nicht für beliebige Problemoperatoren. Dazu gehört beispielsweise auch das Quadrat des Diracoperators. Mack verallgemeinerte schließlich den Fall der Neumann-Randbedingungen: Wir gehen wieder aus von der Betrachtung der Untersysteme S_x mit den Objektmengen χ_x wie in Abschnitt 6.2. Ziel ist es eine Zerlegung des Gesamtsystems in disjunkte Blöcke ohne sogenannte Zwischenwände zu erreichen, mit einer verallgemeinerten Version des Satzes 7.1, auch für nicht notwendig positive Operatoren mit Randbedingungen.

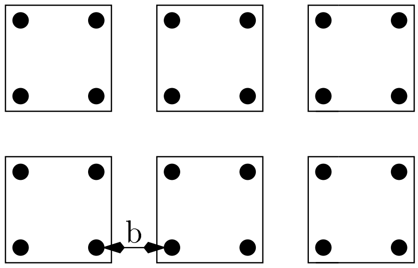


Abbildung 5: Aufteilung der Blöcke für verallgemeinerte von-Neumann-Randbedingungen.

Sei ${}^{z'}P_z : \mathbb{V}_z \to \mathbb{V}_z$ ein positiv semidefiniter Operator derart, dass

$$ {}^{z'}P_z^2 = L(z,z')L(z',z). $$

Wir schreiben nun

$$ L(z,z') = U(z,z')\ {}^{z'}P_z, $$

was einer Polarzerlegung [14] entspricht, wenn $U(z,z')$ unitär ist.

Bemerkung: In einer Vereinheitlichung des Formalismus zur Lösung von Problemgleichungen ist zu überlegen, die Polarzerlegung eines Operators von vornherein zu etablieren. Man denke an die Formulierung des kovarianten Laplaceoperators in dem zweiten Beispiel von Abschnitt 2.1 , wie er beispielsweise in Diffusionsgleichungen vorkommt. Ein weitere Problemgröße, eine Diffusionskonstante, wird mit dem Laplaceoperator zu einem verallgemeinerten Operator, der unter Umständen nicht unitär ist. $D\Delta\phi(z) = \sum_{z' n.n.z}[DU(z,z')\phi(z') - D\phi(z)]$ D ist der positive Teil des verallgemeinerten Operators.

Man definiere nun $\mathcal{K}_{z,z'}$, welches selbstadjungiert und positiv sei, gemäß $\mathcal{K}^*_{z,z'}\mathcal{K}_{z,z'} = {}^{z'}P_z$, so dass ${}^{z'}P_z^{\frac{1}{2}}\mathcal{K}_{z,z'} = L(z,z')$.
Der positive Ausdruck $\mathcal{K}(f) = \frac{1}{2}\sum_z\sum_{z'\neq z}\|\mathcal{K}_{z,z'}f(z') - {}^{z'}P_z^{\frac{1}{2}}f(z)\|^2$ lässt sich damit schließlich folgendermaßen umformen:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}(f) &= \frac{1}{2}\sum_z \Big\{ \sum_{z'\neq z} \langle \mathcal{K}_{z,z'}f(z') - {}^{z'}P_z^{\frac{1}{2}}f(z), \mathcal{K}_{z,z'}f(z') - {}^{z'}P_z^{\frac{1}{2}}f(z)\rangle \Big\} \\
&= \frac{1}{2}\sum_z \Big\{ \sum_{z'\neq z} \big(\langle {}^{z'}P_z f(z), f(z)\rangle - \langle L(z,z')f(z'), f(z)\rangle \\
&\quad - \langle f(z), L(z,z')f(z')\rangle + \langle {}^{z'}P_z f(z'), f(z')\rangle \big) \Big\} \\
&= \sum_{\langle z,z'\rangle, z\neq z'} \big(\langle {}^{z'}P_z f(z), f(z)\rangle - \langle L(z,z')f(z'), f(z)\rangle \big) \\
&= -\sum_{\langle z,z'\rangle} \langle \tilde{L}(z,z')f(z'), f(z)\rangle
\end{aligned}
$$

Hierbei ist

$$\tilde{L}(z,z') = \begin{cases} L(z,z') & \text{für} \quad z \neq z' \\ -\sum_{z'' \neq z} {}^{z''}P_z & \text{für} \quad z = z' \end{cases}$$

Letztlich existiert eine Zerlegung des Problemoperators gemäß:

$$L = \tilde{L} + D + P,$$

mit $D(z,z) = L(z,z)$ und $P(z,z) = \sum_{z'} {}^{z'}P_z$. Wir definieren nun für einen Block χ_x mit verallgemeinerten Randbedingungen

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^N(f) &= \frac{1}{2}\sum_z \sum_{z' \neq z, z, z' \in \chi_x} \|\mathcal{K}_{z,z'} f(z') - {}^{z'}P_z^{\frac{1}{2}} f(z)\|^2 \leq \mathcal{K}(f) \\ &= -\sum_{\langle z,z' \rangle} \langle \tilde{L}^N(z,z') f(z'), f(z) \rangle. \end{aligned}$$

Hieraus folgt sofort $-\tilde{L}^N \leq -\tilde{L}$ und für $L^N = \tilde{L}^N + D + P$ auch $-L^N \leq -L$, wobei

$$\tilde{L}^N(z,z') = \begin{cases} 0 & \text{für} \;\; z \in \chi_x \wedge z' \in \chi_{x'} \\ L(z,z') & \text{für} \;\; z, z' \in \chi_x \wedge z \neq z' \\ -\sum_{z'' \neq z, z, z' \in \chi_x} {}^{z''}P_z & \text{für} \;\; z = z'. \end{cases}$$

Dies bedeutet insbesondere, dass $L^N(z,z)$ von $L(z,z)$ verschieden ist, wenn z ein Randpunkt von S_x ist.
Es ist an dieser Stelle zu bemerken, dass sich mithilfe dieses Formalismus auch verallgemeinerte Dirichlet-Randbedingungen ohne die in Abbildung 4 dargestellten Zwischenwände konstruieren lassen.

7.2 Konstruktion der $\mathcal{C}$-Kerne

Wir gehen aus von einer Zerlegung in Untersysteme S_x, man spricht auch von Blöcken $[x]$, und betrachten die Eigenwertgleichung des Problemoperators mit unseren verallgemeinerten Randbedingungen:

$$L^N \varphi_\alpha^x(z) = \epsilon_\alpha(x) \varphi_\alpha^x(z),$$

wobei die Träger der Eigenmoden Teilraum der Blöcke sind ($supp(\varphi_\alpha^x) \subseteq [x]$).

Bemerkung: Es sei darauf hingewiesen, dass es sich bei $\varphi_\alpha^x(z)$ nicht um die in Abschnitt 2.2 eingeführten verallgemeinerten Eigenmoden handelt. Eine Berücksichtigung dieser, was einer Konstruktion der $\mathcal{C}$-Kerne nach den verallgemeinerten Eigenmoden entspricht, ist allerdings gleichermaßen möglich.

Da L^N nicht zwischen den Blöcken koppelt, können diese getrennt voneinander betrachtet werden.
Wir wählen nun ein $\varepsilon > 0$ und versuchen den Mittelungsoperator $\mathcal{C}$ so zu konstruieren, dass auf dem Unterraum $\mathcal{V}_\mathcal{C} = \ker \mathcal{C}$ die Ungleichung $\varepsilon \leq L$, bzw. $\varepsilon\langle u, u\rangle \leq \langle u, Lu\rangle$, erfüllt ist. Im Idealfall handele es sich hierbei um den kleinsten Eigenwert der Einschränkung von L auf dem Unterraum $\mathcal{V}_\mathcal{C}$, $\epsilon_{\alpha_{krit}}$, es wäre der **Infrarot-Cutoff**. (Wir werden diesen in Kapitel 11 noch näher behandeln.)
Unter der Annahme, die Eigenmoden von L^N seien normiert, $\langle\varphi^x_\alpha(z), \varphi^{x'}_\beta(z)\rangle = \delta^{xx'}\delta_{\alpha\beta}$, entwickeln wir eine Funktion $u \in \mathcal{V}$ nach diesen Eigenmoden:

$$u(z) = \sum_\alpha \varphi^x_\alpha(z)\langle\varphi^x_\alpha(z), u(z)\rangle = \sum_\alpha \varphi^x_\alpha(z) u^x_\alpha$$

Satz 7.2 *Auf dem Unterraum $\mathcal{V}_\mathcal{C}$ ist die Forderung $\varepsilon \leq L$ für normierte Eigenmoden gewährleistet.*

Beweis:

$$\langle u, Lu\rangle \geq \langle u, L^N u\rangle = \sum_{x,x'}\sum_{\alpha,\beta} \bar{u}^x_\alpha u^{x'}_\beta \langle\varphi^x_\alpha(z), L^N\varphi^{x'}_\beta(z)\rangle = \sum_x\sum_\alpha |u^x_\alpha|^2\epsilon_\alpha(x) \geq \varepsilon\langle u, u\rangle$$

□

Für ein $u \in \mathcal{V}_\mathcal{C}$ verschwindet das Blockmittel ($\mathcal{C}u = 0$). Diese Funktionen lassen sich dann nur aus Eigenmoden entwickeln, deren zugehöriger Eigenwert $\epsilon_\alpha \geq \varepsilon$ ist.
Nun nummeriere man diejenigen Eigenmoden von L^N, deren zugehöriger Eigenwert $\epsilon_\alpha(x) < \varepsilon \leq \epsilon_{\alpha_{krit}}$ ist, durch. Das sind eben die glatten Moden (vgl. Definition aus Abschnitt 2.2) oder die niederfrequenten. Diese Eigenmoden werden nun zur Konstruktion des Mittelunsoperators herangezogen, so dass für den Fall, dass $\mathcal{C}$ normiert ist, Folgendes gilt:

$$\mathcal{C}u(z) = \sum_{\alpha<\alpha_{krit}} \varphi^x_\alpha(z)\langle\varphi^x_\alpha(z), \mathcal{C}u(z)\rangle = \sum_{\alpha<\alpha_{krit}} \varphi^x_\alpha(z)(\mathcal{C}u)^x_\alpha$$
$$\Rightarrow (\mathcal{C}u)^x_\alpha = \langle\varphi^x_\alpha(z), u(z)\rangle,$$

für $\varphi^x_\alpha(z)$ mit $\epsilon_\alpha(x) < \varepsilon$.

8 Konvergenz für das Zweigitterszenario

Die Fundamentaltheoreme 1 und 2 sollen nun ihre Anwendung in der Betrachtung zweier Gitterschichten finden. Man betrachtet die Zerlegung in hoch- und niederfrequenten Raum, zu Beginn bezüglich Projektoren, die mithilfe exakter Interpolationsoperatoren konstruiert werden. Wir gehen hierbei von den Projektionsoperatoren $\tilde{Q}'_1$ und $\tilde{Q}'_2$ des Abschnitts 5.2 aus. Diese Teilräume haben wegen ihrer Orthogonalität bezüglich des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle_L$ den Vorteil verschwindender gemischter Terme, der die Abschätzung erleichtert. Konstruiert man die Teilräume via praktischer $\mathcal{I}$-Kerne, so entsteht ein gemischter Term $\langle v^h, v^l\rangle$, welcher bei der Abschätzung berücksichtigt werden muss.

8.1 Konvergenzabschätzung für exakte Interpolationskerne

Ausgehend von den exakten, „modifizierten“ Interpolationsoperatoren $\mathcal{A}'$ betrachten wir die dadurch enstehende Zerlegung in hoch- und niederfrequenten Unterraum (vgl. Abschnitt 5.2). Von Wichtigkeit für die Konvergenzabschätzungen nach Xu ist das Skalarprodukt $\langle v, Lv\rangle$. Da die zwei Teilräume orthogonal zueinander sind, verschwinden die gemischten Terme und es gilt:

$$\begin{aligned}
\langle v,v\rangle_L &= \langle v_2,v_2\rangle_L + \langle v_1,v_2\rangle_L + \langle v_2,v_1\rangle_L + \langle v_1,v_1\rangle_L \\
&= \langle v_2, Lv_2\rangle + \langle v_1, Lv_1\rangle \\
&= \langle v_2, Lv_2\rangle + \langle v_1, L\mathcal{A}'\mathcal{C}v_1\rangle \\
&= \langle v_2, L_2v_2\rangle + \langle v_1, \mathcal{C}^*u^{-1}\mathcal{C}'v_1\rangle \\
&\overset{(39)}{=} \underbrace{\langle v_2, L_2v_2\rangle}_{\text{hochfrequent}} + \underbrace{\langle V^1, \mathcal{A}'^*L\mathcal{A}'V^1\rangle}_{\text{niederfrequent}} \\
&= \langle v_2, L_2v_2\rangle + \langle V^1, \tilde{L}^1V^1\rangle
\end{aligned}$$

$$V^1 = \mathcal{C}v_1 \in \mathcal{V}^1$$

Innerhalb dieser zwei Unterräume muss man sich für ein Iterationsverfahren entscheiden. Zu berücksichtigen bleibt im Wesentlichen die Güte der Approximation des inversen Problemoperators auf den Unterräumen, R_i. Zerlegt man den Problemoperator in Diagonal-, strikte obere und untere Dreiecksmatrix: $L = D - O - U$, so ist

- $(R^{Jac})^{-1} = D$ für das **Jacobi-Verfahren**,
  mit $M^{Jac} = D^{-1}(U+O) = I - D^{-1}L = I - R^{Jac}L$;
- $(R^{GS})^{-1} = D - U$ für das **Gauß-Seidel-Verfahren**,
  mit $M^{GS} = (D-U)^{-1}O = I - (D-U)^{-1}L = I - R^{GS}L$;
- $(R^{sGS})^{-1} = (D-U)D^{-1}(D-O)$ für das **symmetrische Gauß-Seidel-Verfahren**.

Die Xusche Konvergenzabschätzung verlangt aufgrund der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung, dass R_i selbstadjungiert ist. $(R^{GS})^{-1} = D - U$ ist nicht symmetrisch, und deshalb für die Betrachtung nicht relevant. Man erinnere sich an Abschnitt 2.2, wo die verallgemeinerten Eigenmoden bereits erwähnt wurden. Für die Abschätzung braucht man

- eine obere und eine untere Schranke auf dem hochfrequenten Unterraum und
- eine obere und eine untere Schranke des verallgemeinerten Operators auf dem Blockgitter stellvertretend für die Schranken auf dem niederfrequenten Unterraum,

d.h. wir wenden uns nun den oberen und unteren **Schranken** an R_iL_i, bzw. an R^1L^1 auf dem Blockgitter, zu. Es sei λ_i der kleinste, Λ_i der größte verallgemeinerte Eigenwert,

$$\lambda_i\langle v,v\rangle \leq \langle v, R_iL_iv\rangle \leq \Lambda_i\langle v,v\rangle, \qquad \text{kurz } \lambda_i \leq R_iL_i \leq \Lambda_i. \tag{44}$$

Auf dem hochfrequenten Unterraum $\mathcal{V}_2$, oder auch $\mathcal{V}_\mathcal{C}$, gilt wegen des verschwindenden Blockmittels:

$$Lv = (L + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C})v, \qquad \text{für } v \in \mathcal{V}_2.$$

In Abschnitt 7 zeichnete sich ein guter Mittelungsoperator dadurch aus, dass $\epsilon \leq L = L + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C}$ auf $\mathcal{V}_\mathcal{C}$, d.h. dass der Problemoperator auf $\mathcal{V}_\mathcal{C}$ eine nicht zu kleine untere Schranke hat. Hieraus schlussfolgert man:

$$\sigma\langle v,v\rangle \leq \langle v, R_2(L + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C})v\rangle, \qquad \text{kurz } \sigma \leq R_2L, \tag{45}$$

für $v \in \mathcal{V}_2$.

Satz 8.1 *Ist λ_1 die untere Schranke an R_1L, so ist dies auch die untere Schranke an den verallgemeinerten Operator $R^1\tilde{L}^1$ auf dem Blockgitter,*

$$\lambda_1\langle V^1,V^1\rangle \leq \langle V^1, R^1\tilde{L}^1V^1\rangle, \qquad \textit{kurz } \lambda_1 \leq R^1\tilde{L}^1, \tag{46}$$

wenn $R^1 = \mathcal{C}R_1\mathcal{C}^*$. Dann folgt $(R^1)^{-1} = \mathcal{A}'^*(R_1)^{-1}\mathcal{A}'$.

<u>Beweis:</u>

$$\begin{aligned} R^1 = \mathcal{C}R_1\mathcal{C}^* &\overset{(44)}{\geq} \lambda_1\mathcal{C}L^{-1}\mathcal{C}^* \overset{(30)}{=} \lambda_1(u - \frac{1}{\kappa}) \\ &\overset{Def.\mathcal{K}}{=} \lambda_1\mathcal{K}^{-1}u \overset{(39)}{=} \lambda_1(\mathcal{K}\mathcal{A}^*L\mathcal{A}\mathcal{K})^{-1} = \lambda_1(\tilde{L}^1)^{-1} \\ (R^1)^{-1} = \mathcal{A}'^*(R_1)^{-1}\mathcal{A}' &\leq \frac{1}{\lambda_1}\mathcal{A}'^*L\mathcal{A}' \ \square \end{aligned}$$

Wir betrachten nun zunächst die K_0-Abschätzung (vgl. Kap.(3.3)):

Satz 8.2 *R_1 sei approximatives Inverses des Problemoperators auf dem niederfrequenten Teilraum, R_2 das auf dem hochfrequenten. Unter Annahme der Schranken (44) und (46), erhält man bei Verwendung exakter Interpolationskerne $\mathcal{A}'$ für die K_0-Abschätzung folgendes Resultat:*

$$K_0 = \max\left\{\frac{1}{\lambda_1}; \frac{1}{\sigma}\right\}$$

<u>Beweis:</u>

$$\begin{aligned}
\langle R_1^{-1}v_1, v_1\rangle + \langle R_2^{-1}v_2, v_2\rangle &= \langle R_1^{-1}\mathcal{A}'\mathcal{C}v, \mathcal{A}'\mathcal{C}v\rangle + \langle R_2^{-1}v_2, v_2\rangle \\
&\overset{\text{Satz 8.1}}{\leq} \langle (R^1)^{-1}V^1, V^1\rangle + \langle R_2^{-1}v_2, v_2\rangle \\
&\leq \lambda_1^{-1}\langle \tilde{L}^1V^1, V^1\rangle + \sigma^{-1}\langle Lv_2, v_2\rangle \\
&\leq \max\left\{\frac{1}{\lambda_1}; \frac{1}{\sigma}\right\}\langle v, Lv\rangle = K_0\langle v, Lv\rangle \quad \square
\end{aligned}$$

Es sei nun eine obere Schranke auf dem Blockgitter weiterhin gegeben:

$$\langle V^1, R^1\tilde{L}^1V^1\rangle \leq \Lambda^1\langle V^1, V^1\rangle, \qquad \text{kurz } R^1\tilde{L}^1 \leq \Lambda^1. \tag{47}$$

Satz 8.3 *Die K_1-Abschätzung unter Verwendung des approximativen Inversen R_i, mit $R_1 = \mathcal{A}'R^1\mathcal{A}'^*$ und der Schranken (44) und (47) sieht folgendermaßen aus:*

$$\begin{aligned}
K_1(S_{\mathrm{tr}}) &= 0 \\
K_1(S_{\max}) &= \max\left\{\Lambda^1; \Lambda_2\right\}.
\end{aligned}$$

<u>Beweis:</u> Für trianguläres S_{tr} ergibt sich wegen der Orthogonalität die triviale K_1-Abschätzung $K_1(S_{\mathrm{tr}}) = 0$, wegen

$$\begin{aligned}
0 &= \langle T_2u_2, T_1v_1\rangle_L \\
&\leq K_1(S_{\mathrm{tr}})\big(\langle T_1u_1, u_1\rangle_L + \langle T_2u_2, u_2\rangle_L\big)^{\frac{1}{2}}\big(\langle T_1v_1, v_1\rangle_L + \langle T_2v_2, v_2\rangle_L\big)^{\frac{1}{2}},
\end{aligned}$$

da $T_i = R_iQ_iL \in \mathcal{V}_i$, $i \in \{1, 2\}$. Für das gesamte $S_{\max}$ gilt hier überdies:

$$\begin{aligned}
\text{linke Seite} \quad &\rightarrow \quad \langle R_1\mathcal{A}'\mathcal{C}Lv, LR_1\mathcal{A}'\mathcal{C}Lv\rangle + \langle R_2(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})Lv, LR_2(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})Lv\rangle \\
&= \quad \langle R_1LR_1\mathcal{A}'\mathcal{C}Lv, \mathcal{A}'\mathcal{C}Lv\rangle + \langle R_2LR_2(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})Lv, (I-\mathcal{A}'\mathcal{C})Lv\rangle \\
&\overset{Def. Q_i}{=} \quad \langle \mathcal{A}'R^1\mathcal{A}'^*L\mathcal{A}'R_1\mathcal{A}'^*\mathcal{A}'\mathcal{C}Lv, Lv\rangle + \langle R_2LR_2(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})Lv, Lv\rangle \\
&\overset{(47),(44)}{\leq} \quad \Lambda^1\langle \mathcal{A}'R^1\mathcal{A}'^*\mathcal{A}'\mathcal{C}Lv, Lv\rangle + \Lambda_2\langle R_2(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})Lv, Lv\rangle \\
&= \quad \Lambda^1\langle R_1\mathcal{A}'\mathcal{C}Lv, Lv\rangle + \Lambda_2\langle R_2(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})Lv, Lv\rangle \\
&\leq \quad \max\left\{\Lambda^1; \Lambda_2\right\}\Big(\langle R_1\mathcal{A}'\mathcal{C}Lv, Lv\rangle + \langle R_2(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})L, Lv\rangle\Big) \\
&= \quad K_1(S_{\max})\big(\langle R_1Q_1Lv, v\rangle_L + \langle R_2Q_2Lv, v\rangle_L\big) \quad \square
\end{aligned}$$

Ähnlich lässt sich auch $\omega_1 = \max_i \rho(R_iL_i) = \max\left\{\rho(R_1L_1), \rho(R_2L_2)\right\}$ bestimmen. Wir schreiben: $\omega_1 = \max\left\{\|R_1L_1\|; \|R_2L_2\|\right\} \leq \max\left\{\Lambda_1; \Lambda_2\right\}$.

Korollar 4 *Insgesamt erhält man also mithilfe der Schranken (44), (45), (46), (47) folgende Abschätzung für die Kondition*

$$\kappa(BL) \leq \max\left\{\frac{1}{\lambda_1}; \frac{1}{\sigma}\right\} \max\left\{\Lambda^1; \Lambda_2\right\}$$

und eine Abschätzung der Iterationsmatrix nach

$$\|M_2\|_L^2 \leq 1 - \Big(2 - \max\left\{\Lambda_1; \Lambda_2\right\}\Big)\Big(\max\left\{\frac{1}{\lambda_1}; \frac{1}{\sigma}\right\}\Big)^{-1},$$

für $R^{-1} = D$ oder $R^{-1} = (D-U)D^{-1}(D-O)$ (vgl. Kap.(3.3),Gl.(23,24)).

Diese Konvergenzabschätzungen sind auf den Fall $\kappa \to \infty$ leicht zu übertragen. Es muss dann mit $\tilde{L}^1 = \mathcal{A}^* L \mathcal{A}$ statt mit $\mathcal{A}'^* L \mathcal{A}'$ abgeschätzt werden.

8.2 Maß der Güte für praktische Kerne

In Abschnitt 4.2 wurde bereits angemerkt, dass hoch- und niederfrequenter Teilraum, die mithilfe praktischer Interpolationsoperatoren gebildet werden, nicht zueinander orthogonal sind. Folglich enthält das Skalarprodukt $\langle v, Lv\rangle$ einen Beitrag $\langle v^h, Lv^l\rangle \neq 0$, wobei $v^h \in (I - \mathcal{I}\mathcal{C})\mathcal{V}$ und $v^l \in \mathcal{I}\mathcal{C}\mathcal{V}$, der nun berechnet und schließlich abgeschätzt werden soll. Ausgehend von der Darstellung bezüglich exakter Interpolationskerne $\mathcal{A}$ wird dieser über die Transformationsvorschrift zur Darstellung bezüglich praktischer Kerne ermittelt.

Hierzu betrachte man zunächst den Fall $\kappa \to \infty$. Für exakte Kerne sind alle Aussagen aus Kapitel (5.2) gültig. Man schreibt: $\mathcal{A}' \to \mathcal{A}$ und $\mathcal{C}' \to \mathcal{C}$, da $\mathcal{K} \to I$. Die Projektionsoperatoren werden mit $\tilde{Q}$ bezeichnet. Es sei

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &: \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V} & \qquad \mathcal{C} &: \mathcal{V}_1 \to \mathcal{V}^1 \\ \Gamma &: \mathcal{V} \to \mathcal{V} & \qquad h &: \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V} \end{aligned}$$

Man zerlegt $v \in \mathcal{V}$ gemäß

$$\begin{aligned} v &= \tilde{v}^l + \tilde{v}^h \qquad (48) \\ \text{mit} \quad \tilde{v}^l &= \tilde{Q}_1 v = \mathcal{A}\mathcal{C}v \\ \text{und} \quad \tilde{v}^h &= \tilde{Q}_2 v = (I - \mathcal{A}\mathcal{C})v \end{aligned}$$

in einen hoch- und einen niederfrequenten Anteil.

Satz 8.4 *Sei nun $\mathcal{I}$ der praktische Interpolationskern, wie er in Kapitel 4 eingeführt wurde. Mit $\mathcal{C}\mathcal{A} = 1$ sind die Projektionsoperatoren $\tilde{Q}_1 = \mathcal{A}\mathcal{C}$ und $\tilde{Q}_2 = I - \mathcal{A}\mathcal{C}$ idempotent. Desweiteren ist $(I - \mathcal{I}\mathcal{C})(I - \mathcal{A}\mathcal{C}) = (I - \mathcal{A}\mathcal{C})$.*

Beweis: $\mathcal{ACAC} \overset{\mathcal{CA}=I}{=} \mathcal{AC}$; $(I-\mathcal{IC})(I-\mathcal{AC}) = (I-\mathcal{AC}) = I-\mathcal{IC}-\mathcal{AC}+\mathcal{ICAC}$ $\square$.

Desweiteren existiert die in Kapitel (4.2) dargelegte Zerlegung

$$\begin{aligned} v^l &= Q_1 v = \mathcal{IC}v \\ v^h &= Q_2 v = (I-\mathcal{IC})v \end{aligned}$$

Satz 8.5 *Es sei $h \neq 0$ für praktische Kerne und $\mathcal{CA} = 1$. Dann existieren die Basen (v^h, v^l) und $(\tilde{v}^h, \tilde{v}^l)$ von $\mathcal{V}$, die sich nach*

$$\begin{pmatrix} v^l \\ v^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+\Gamma h\mathcal{C} & 0 \\ -\Gamma h\mathcal{C} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{v}^l \\ \tilde{v}^h \end{pmatrix} \tag{49}$$

$$= \begin{pmatrix} \mathcal{A}+\Gamma h & 0 \\ -\Gamma h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V^1 \\ \tilde{v}^h \end{pmatrix} \tag{50}$$

transformieren lassen.

Beweis: Einsetzen von (34) ergibt: $v^l = \mathcal{IC}v = \mathcal{AC}v + \Gamma h\mathcal{C}v = \tilde{v}^l + \Gamma h\mathcal{C}\tilde{v}^l$ und $v^h = (I-\mathcal{IC})v = (I-\mathcal{AC}-\Gamma h\mathcal{C})v = \tilde{v}^h - \Gamma h\mathcal{C}\tilde{v}^l$, da $\mathcal{C}\tilde{v}^h = 0$. $\square$

Satz 8.6 *Es sei $\mathcal{CA} = 1$. Die Transformation des Skalarprodukts lautet dann:*

$$\langle v^h, v^l\rangle_L = \langle v^h, hV^1\rangle \tag{51}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
&\langle v^h, v^l\rangle_L = \langle (I-\mathcal{AC}-\Gamma h\mathcal{C})v, (\mathcal{AC}+\Gamma h\mathcal{C})v\rangle_L \\
&= \langle (I-\mathcal{AC})v, \mathcal{AC}v\rangle_L - \langle L\Gamma h\mathcal{C}v, \mathcal{AC}v\rangle - \langle \Gamma h\mathcal{C}v, L\Gamma h\mathcal{C}v\rangle + \langle (I-\mathcal{AC})v, L\Gamma h\mathcal{C}v\rangle \\
&= 0 - \langle (1-\mathcal{C}^*\mathcal{A}^*)h\mathcal{C}v, \mathcal{AC}v\rangle - \langle \Gamma h\mathcal{C}v, (I-\mathcal{C}^*\mathcal{A}^*)h\mathcal{C}v\rangle + \langle (I-\mathcal{AC})(I-\mathcal{AC})v, h\mathcal{C}v\rangle \\
&= -\langle h\mathcal{C}v, (I-\mathcal{AC})\mathcal{AC}v\rangle - \langle (I-\mathcal{AC})\Gamma h\mathcal{C}v, h\mathcal{C}v\rangle + \langle (I-\mathcal{AC})v, h\mathcal{C}v\rangle \\
&\overset{\text{Satz 8.4}}{=} \langle -\Gamma h\mathcal{C}v + (I-\mathcal{AC})v, h\mathcal{C}v\rangle = \langle h^*(I-\mathcal{IC})v, V^1\rangle \quad \square
\end{aligned}$$

8.3 Konvergenzabschätzung für praktische Interpolationskerne

Die Ergebnisse aus Abschnitt 8.1 gilt es nun auf den Fall praktischer Interpolationskerne zu übertragen. Das „Unpraktische“ an diesen praktischen Kernen ist ihr nichtverschwindender Nichtdiagonalterm bei der Darstellung bezüglich hoch- und niederfrequenter Räume. Das Skalarprodukt lautet demzufolge (mit Gl. (51))

$$\begin{aligned} \langle v, v\rangle_L &= \langle v^h, L_2 v^h\rangle + \langle V^1, \hat{L}^1 V^1\rangle + 2\langle v^h, hV^1\rangle & (52) \\ &= \langle v^h, L_2 v^h\rangle + \langle V^1, (\tilde{L}^1 + h^*\Gamma h)V^1\rangle + 2\langle v^h, hV^1\rangle, & (53) \end{aligned}$$

mit $\hat{L}^1 = \mathcal{I}^* L\mathcal{I}$. Der letzte Term soll über die Diagonalelemente abgeschätzt werden:

Definition 1 *Es sei* $\hat{L}^1 = \mathcal{I}^* L \mathcal{I}$ *der praktische Operator auf dem Blockgitter,* $h^*\Gamma h$ *der Korrekturterm. Wir nennen* δ*, das die Ungleichung*

$$h^*\Gamma h \leq (1-\delta)\hat{L}^1$$

erfüllt, die ***Güte der Interpolation****.*

Satz 8.7 *Für positive Problemoperatoren* L *ist die Güte der Interpolation positiv,* $\delta > 0$*.*

Beweis: Man geht davon aus, dass der Korrekturterm kleiner als der „praktische" Blockoperator ist. Dies ist wahr für positive Problemoperatoren, dann ist $\tilde{L}^1 = L^1_{exakt} = \mathcal{I}^* L \mathcal{I} - h^*\Gamma h > 0$. Es folgt $h^*\Gamma h < \hat{L}^1$. Es gibt nun ein $\delta > 0$ derart, dass die Ungleichung $h^*\Gamma h \leq (1-\delta)\hat{L}^1$ erfüllt. □

Lemma 3 *Es gilt die Abschätzung*

$$|\langle v^h, hV^1\rangle| \leq k_0[\langle v^h, L_2 v^h\rangle + \langle V^1 \hat{L}^1 V^1\rangle], \tag{54}$$

mit $k_0 = \frac{1-\delta}{2}$*.*

Beweis: Aus Satz 8.7 folgt: Es gibt ein $\delta > 0$ derart, dass folgende Ungleichungen erfüllt sind.

$$\begin{aligned} h^*\Gamma h &\leq (1-\delta)\hat{L}^1 =: k_1 \hat{L}^1 \\ &\stackrel{(43)}{=} (1-\delta)[\tilde{L}^1 + h^*\Gamma h] \\ \Leftrightarrow h^*\Gamma h &\leq \frac{1-\delta}{\delta}\tilde{L}^1 =: \tilde{k}_1 \tilde{L}^1 \end{aligned} \tag{55}$$

Man sieht sofort, dass für kleines k_1 (δ groß) auch $\tilde{k}_1$ klein sein muss.
Der Nichtdiagonalterm an sich kann nun über die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned} |\langle v^h, hV^1\rangle| &\stackrel{\Gamma\text{positiv}}{\leq} \langle v^h, \Gamma^{-1} v^h\rangle^{\frac{1}{2}} \langle hV^1, \Gamma h V^1\rangle^{\frac{1}{2}} \leq k_1 \langle v^h, L_2 v^h\rangle^{\frac{1}{2}} \langle V^1 \hat{L}^1 V^1\rangle^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \frac{k_1}{2}[\langle v^h, L_2 v^h\rangle + \langle V^1, \hat{L}^1 V^1\rangle] =: k_o[\langle v^h, L_2 v^h\rangle + \langle V^1, \hat{L}^1 V^1\rangle] \\ &= k_0[\langle v^h, L_2 v^h\rangle + (1+\tilde{k}_1)\langle V^1, \tilde{L}^1 V^1\rangle] \quad \square \end{aligned} \tag{56}$$

Wir verwenden die in Abschnitt 8.1 bereits eingeführten Schranken (44) und (45). Desweiteren formulieren wir Satz 8.1 in Hinblick auf die Transformation mit praktischen Kernen um:

Satz 8.8 *Ist* λ_1 *die untere Schranke an* $R_1 L$*, so ist dies auch eine untere Schranke an den verallgemeinerten Operator* $R^1 \tilde{L}^1$ *auf dem Blockgitter,*

$$\lambda_1 \langle V^1, V^1\rangle \leq \langle V^1, R^1 \tilde{L}^1 V^1\rangle, \qquad \textit{kurz } \lambda_1 \leq R^1 \tilde{L}^1, \tag{57}$$

wenn $R^1 = \mathcal{C} R_1 \mathcal{C}^*$*. Transformiert man das Inverse von* R_1 *gemäß* $(R^1)^{-1} = \mathcal{I}^*(R_1)^{-1}\mathcal{I}$ *auf das Blockgitter, so ist eine unter Schranke gegeben durch:*

$$(1+\tilde{k}_1)\tilde{L}^1 \geq \lambda_1 (R^1)^{-1}. \tag{58}$$

Beweis: Aus Satz 8.1 folgt:

$$R^1 = \mathcal{C}R_1\mathcal{C}^* \geq \lambda_1(L^1_{exakt})^{-1} \overset{\kappa\to\infty}{=} \lambda_1[\mathcal{I}^*L\mathcal{I} - h^*\Gamma h]^{-1}$$
$$\text{und} \quad (R^1)^{-1} = \mathcal{I}^*R_1^{-1}\mathcal{I} \leq \frac{1}{\lambda_1}\mathcal{I}^*L\mathcal{I} \overset{(55)}{=} \frac{1}{\lambda_1}(1+\tilde{k}_1)\tilde{L}^1. \quad \square$$

Satz 8.9 *R_1 sei approximatives Inverses des Problemoperators auf dem Unterraum $\mathcal{ICV} = \mathcal{V}^l$, R_2 entsprechend auf dem Unterraum, $(I - \mathcal{IC})\mathcal{V} = \mathcal{V}^h$. k_0 sei der in (54) definierte Parameter. Unter Annahme der Schranke (45) auf $\mathcal{V}^h$, erhält man mithilfe des Satzes 8.8 für die K_0-Abschätzung:*

$$K_0 = \max\Big\{\frac{1}{\lambda_1(1-2k_0)}; \frac{1}{\sigma(1-2k_0)}\Big\}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\langle v, Lv\rangle &= \langle v^h, L_2v^h\rangle + \langle V^1, \hat{L}^1V^1\rangle + 2\langle v^h, hV^1\rangle \\
&\geq \langle v^h, L_2v^h\rangle + \langle V^1, \hat{L}^1V^1\rangle - 2|\langle v^h, hV^1\rangle| \\
&\overset{(54),(55)}{\geq} (1-2k_0)\{\langle v^h, L_2v^h\rangle + \langle V^1, \tilde{L}^1V^1\rangle\} \\
&\overset{(58)}{\geq} (1-2k_0)\{\sigma\langle R_2v^h, v^h\rangle + \lambda_1\langle (R_1^1)^{-1}V^1, V^1\rangle\} \\
&= (1-2k_0)\{\sigma\langle R_2v^h, v^h\rangle + \lambda_1\langle (R_1^1)^{-1}\mathcal{I}V^1, \mathcal{I}V^1\rangle\} \\
&= K_0^{-1}\{\langle R_1v^l, v^l\rangle + \langle R_2v^h, v^h\rangle\} \quad \square
\end{aligned}$$

Satz 8.10 *Unter Verwendung der Schranken (44) und (47), der Transformation $R_1 = \mathcal{I}R^1\mathcal{I}^*$ und der in (54) und (55) definierten Parametern erhält man für trianguläres S für die K_1-Abschätzung folgendes Resultat*

$$K_1(S_{\mathrm{tr}}) = k_0 \max\big\{\Lambda_2; (1+\tilde{k}_1)\Lambda^1\big\}.$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\langle T_2v, T_1v\rangle_L &= \langle R_1(Lv)^h, R_1(Lv)^l\rangle_L \\
&\overset{(51)}{=} \langle R_2(Lv)^h, h\mathcal{C}R_1(Lv)^l\rangle \\
&\overset{(54)}{=} k_0[\langle R_2Q_2Lv, LR_2Q_2Lv\rangle + \langle R_1Q_1Lv, LR_1Q_1Lv\rangle] \\
&= k_0[\langle R_2Q_2Lv, LR_2Q_2Lv\rangle + \langle R_1LR_1Q_1Lv, Q_1Lv\rangle] \\
&= k_0[\langle R_2Q_2Lv, LR_2Q_2Lv\rangle + \langle \mathcal{I}R^1\mathcal{I}^*L\mathcal{I}R^1\mathcal{I}^*Q_1Lv, Q_1Lv\rangle] \\
&= k_0[\langle R_2Q_2Lv, LR_2Q_2Lv\rangle + \langle \mathcal{I}R^1\hat{L}^1R^1\mathcal{I}^*Q_1Lv, Q_1Lv\rangle] \\
&= k_0[\langle R_2Q_2Lv, LR_2Q_2Lv\rangle + \langle \mathcal{I}R^1(\tilde{L}^1 + h^*\Gamma h)R^1\mathcal{I}^*Q_1Lv, Q_1Lv\rangle] \\
&\overset{(55)}{\leq} k_0[\langle R_2LR_2Q_2Lv, Q_2Lv\rangle + (1+\tilde{k}_1)\langle \mathcal{I}R^1\tilde{L}^1R^1\mathcal{I}^*Q_1Lv, Q_1Lv\rangle] \\
&\overset{Def.Q_i}{\leq} k_0\Lambda_2\langle R_2Q_2Lv, v\rangle_L + k_0(1+\tilde{k}_1)\Lambda^1\langle R_1Q_1Lv, v\rangle_L \quad \square
\end{aligned}$$

Satz 8.11 *Mithilfe der Schranken (44) und (47) und der in (54) und (55) definierten Parametern lautet die K_1-Abschätzung für maximales S bei der Verwendung der Projektoren aus praktischen Interpolationskernen*

$$K_1(S_{\max}) = \max\left\{[1+2k_0(1+\tilde{k}_1)]\Lambda^1; (1+2k_0)\Lambda_2\right\}.$$

Beweis: Dies ergibt sich sofort in Analogie mithilfe des Beweises von $K_1(S_{\max})$ für exakte Interpolationskerne und des Beweises zu Satz 8.10. Die Abschätzung von $\langle T_1 v, T_2 v\rangle_L$ ist mit der von $\langle T_2 v, T_1 v\rangle_L$ identisch, was den Faktor 2 vor k_0 zur Folge hat. □

ω_1 wird analog zu dem, das bei der Teilraumkonstruktion mit exakten Interpolationsoperatoren ermittelt wurde, abgeschätzt.

$$\omega_1 \le \max\left\{\Lambda_1; \Lambda_2\right\}$$

Lemma 4 *In Analogie zu Korollar 4 erhält man bei Verwendung der approximierten Interpolationskerne für die Kondition:*

$$\kappa(BL) \le \max\left\{\frac{1}{\lambda_1(1-2k_0)}; \frac{1}{\sigma(1-k_0)}\right\} \max\left\{[1+2k_0(1+\tilde{k}_1)]\Lambda^1; (1+2k_0)\Lambda_2\right\}$$

und für die Iterationsmatrix:

$$\|M_2\|_L^2 \le 1 - \frac{2-\max\{\Lambda_1;\Lambda_2\}}{\max\left\{\frac{1}{\lambda_1(1-2k_0)}; \frac{1}{\sigma(1-k_0)}\right\}\left(1+k_0\max\left\{\Lambda_2; (1+\tilde{k}_1)\Lambda^1\right\}\right)}.$$

Es sollte nochmal darauf hingewiesen werden, dass Λ_2 einer Schranke Λ an RL entspricht. λ_1 ist in diesem Fall auch als kleinster Eigenwert an RL zu verstehen.

8.4 Zusammenfassende und verallgemeinerte Betrachtungen

Zunächst erinnern wir uns an die Ergebnisse aus Abschnitt 8.1 unter Verwendung der „modifizierten" exakten Interpolationskerne. Anschließend wird ein Methode dargestellt, die für beliebiges κ den Zusammenhang zwischen praktischen und exakten Kernen analog zu unseren bisherigen Betrachtungen beschreibt. Dies führt zu gleichfalls modifizierten Kernen $\mathcal{I}'$. Im Anschluss daran werden die Resultate des vorherigen Abschnitts auf die Verwendung dieser Kerne übertragen.

Zur Erinnerung: Die Schranken an den verallgemeinerten Operator $R_i L_i$ auf den Unterräumen $\mathcal{V}_i$ lauten:

$$\begin{aligned}
&\lambda_i\langle v,v\rangle \le \langle v, R_i L_i v\rangle \le \Lambda_i\langle v,v\rangle, && \text{kurz } \lambda_i \le R_i L_i \le \Lambda_i\\
&\sigma\langle v,v\rangle \le \langle v, R_2(L+\kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C})v\rangle, && \text{kurz } \sigma \le R_2 L\\
&\lambda_1\langle V^1,V^1\rangle \le \langle V^1, R^1\tilde{L}^1 V^1\rangle \le \Lambda^1\langle V^1,V^1\rangle && \text{kurz } \lambda_1 \le R^1\tilde{L}^1 \le \Lambda^1,
\end{aligned} \tag{59}$$

mit $v \in \mathcal{V}_i$ und $V^1 \in \mathcal{V}^1$.

Theorem 3 *Gegeben sei eine Zerlegung des Vektorraumes $\mathcal{V}$ in einen hoch- und einen niederfrequenten Teilraum $\mathcal{V}^h$ und $\mathcal{V}^l$, die sich jeweils mithilfe der Projektoren $\tilde{Q}'_1 = (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})$ und $\tilde{Q}'_2 = \mathcal{A}'\mathcal{C}$ konstruieren lassen. Insbesondere sei $\mathcal{C}\mathcal{A}' = I$. Man verwende die Schranken (59), dann konvergiert das Iterationsverfahren*

$$u^{k+\frac{i}{2}} = u^{k+\frac{i-1}{2}} R_i \tilde{Q}'_i (f - L u^{k+\frac{i-1}{2}}),$$

mit $i = 1, 2$, also für das Zweigitter, mit der Konvergenzrate

$$\rho(M_2) \leq 1 - \Big(2 - \max\big\{\Lambda_1; \Lambda_2\big\}\Big)\Big(\max\big\{\frac{1}{\lambda_1}; \frac{1}{\sigma}\big\}\Big)^{-1}.$$

Wir haben in Abschnitt 8.2 den gemischten Term für die praktischen Interpolationskerne ermittelt. Man geht nun von der definierenden Gleichung (34) dieser Kerne aus, die zunächst natürlich für beliebiges κ gilt. Wir definieren nun Γ', das mithilfe solcher exakten Interpolationskerne bestimmt werde, für welche κ unendlich ist. Dann kann man auch schreiben:

$$\Gamma' = (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})L^{-1}$$

Natürlich handelt es sich hierbei wieder um einen Hochfrequenzpropagator dessen Blockmittel verschwindet ($\mathcal{C}\Gamma' = 0$), wenn man von der verallgemeinerten Normierungsbedingung $\mathcal{C}\mathcal{A}'$ ausgeht. Dies führt zu einer allgemeineren Formulierung des praktischen Interpolationssoperators für beliebige κ:

Vorbemerkung: Wir lösen uns in diesem Fall von der Galerkin-Wahl, nehmen zunächst einen beliebigen Mittelungsoperator $\mathcal{C}$ an.

Theorem 4 *Falls $\mathcal{C}\mathcal{I} = \mathcal{C}\mathcal{A}$, was insbesondere gleichbedeutend ist mit $\mathcal{C}\mathcal{I}' = \mathcal{C}\mathcal{A}' = 1$, mit $\mathcal{I}' = \mathcal{I}\mathcal{K}$, so kann man den praktischen Interpolationskern $\mathcal{I}$ gemäß*

$$\mathcal{I} = \mathcal{A} + \Gamma' h', \tag{60}$$

schreiben, mit $\mathcal{I}, \mathcal{A} : \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}$, $h' : \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}^h$ und $\Gamma' = L_0^{-1} : \mathcal{V}^h \to \mathcal{V}^h$. Damit wird der Randterm zu

$$h' = L\mathcal{I}.$$

<u>Beweis:</u>

$$\begin{aligned} \mathcal{A} + \Gamma' L\mathcal{I} &= \mathcal{A} + (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})\mathcal{I} = \mathcal{I} + \mathcal{A} - \mathcal{A}'\mathcal{C}\mathcal{A} \\ &= \mathcal{I} + \mathcal{A} - \mathcal{A}\mathcal{K}\mathcal{C}\mathcal{A} = \mathcal{I} + \mathcal{A} - \mathcal{A}\mathcal{C}'\mathcal{A} \overset{\mathcal{C}'\mathcal{A}=I}{=} \mathcal{I} \quad \square \end{aligned}$$

Bemerkung: Der gemischte Term (51) aus Satz 8.6 wird schließlich zu $\langle v^h, h'V^1\rangle$.

Satz 8.12 *Für die Propagatoren $\Gamma = (I - \mathcal{A}\mathcal{C})L^{-1}$ und $\Gamma' = (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})L^{-1}$ gilt die Ungleichung:*

$$\Gamma \geq \Gamma'.$$

Beweis:

$$\Gamma' = L^{-1} - \mathcal{A}'\mathcal{C}L^{-1} \overset{(31)}{=} L^{-1} - \mathcal{A}'u\mathcal{A}^* = L^{-1} - \mathcal{A}\mathcal{K}u\mathcal{A}^*$$
$$\overset{(*)}{\leq} L^{-1} - \mathcal{A}u\mathcal{A}^* = \Gamma$$

$(*)$ gilt, da die Eigenwerte von u, und damit von u^{-1}, positiv sind und

$$\mathcal{K} = (I - \frac{1}{\kappa}u^{-1})^{-1} \geq I. \ \square$$

Wir multiplizieren nun die Gleichung (60) mit $\mathcal{K} = (I - \frac{1}{\kappa}u^{-1})^{-1}$ von rechts. Es folgt:

$$\mathcal{I}' = \mathcal{I}\mathcal{K} = \mathcal{A}' + \Gamma' \underbrace{h'\mathcal{K}}_{:= \bar{h}}.$$

Auf diese Weise werden die Forderungen des Abschnitts 6.3.2 automatisch erfüllt und wir schreiben in diesem Sinne:

$$\mathcal{A}'^*L\mathcal{A}' = \mathcal{I}'^*L\mathcal{I}' - \bar{h}^*\Gamma'\bar{h}$$

Multiplikation von rechts und von links mit $\mathcal{K}^{-1}$ ergibt:

$$\mathcal{A}^*L\mathcal{A} = \mathcal{I}^*L\mathcal{I} - h'^*\Gamma'h' \tag{61}$$

Somit kann nun das folgende Theorem für beliebiges κ formuliert werden.

Theorem 5 *Gegeben sei eine weitere Zerlegung des Vektorraumes $\mathcal{V}$ in einen hoch- und einen niederfrequenten Teilraum $\mathcal{V}^h$ und $\mathcal{V}^l$, die sich mithilfe der Projektoren $Q_1' = (I - \mathcal{I}'\mathcal{C})$ und $Q_2' = \mathcal{I}'\mathcal{C}$ konstruieren lassen. Insbesondere sei $\mathcal{C}\mathcal{I}' = I$. Man verwende wieder die Schranken (59), desweiteren existiere eine Abschätzung des Nichtdiagonalterms gemäß*

$$|\langle v^h, \bar{h}V^1\rangle| \leq \bar{k}_0[\langle v^h, L_2 v^h\rangle + \langle V^1\mathcal{I}'^*L\mathcal{I}'V^1\rangle]$$

und außerdem sei

$$\bar{h}^*\Gamma'\bar{h} \leq \bar{k}_1\mathcal{A}'^*L\mathcal{A}',$$

dann konvergiert das Iterationsverfahren

$$u^{k+\frac{i}{2}} = u^{k+\frac{i-1}{2}}R_iQ_i'(f - Lu^{k+\frac{i-1}{2}}),$$

mit $i = 1, 2$, also für das Zweigitter mit der Konvergenzrate

$$\rho(M_2) \leq 1 - \frac{2 - \max\{\Lambda_1; \Lambda_2\}}{\max\left\{\frac{1}{\lambda_1(1-2\bar{k}_0)}; \frac{1}{\sigma(1-\bar{k}_0)}\right\}\left(1 + \bar{k}_0 \max\left\{\Lambda_2; (1+\bar{k}_1)\Lambda^1\right\}\right)}.$$

8.5 Jacobi-Iteration: Abschätzung der Schranken

Wir wenden nun die Ergebnisse der letzten Abschnitte konkret auf den Fall an, bei welchem die Bestimmung des approximativen Inversen Problemoperators R_i entsprechend dem Jacobi-Verfahren vollzogen wird. Um eine bessere Abschätzung der Schranken des verallgemeinerten Operators RL auf dem niederfrequenten Unterraum und damit schließlich eine bessere Konvergenzabschätzung zu erhalten, muss R_1 aus dem Diagonalteil der Problemmatrix auf dem Blockgitter bestimmt werden.

Wir betrachten die über praktische Interpolationskerne konstruierte Zerlegung in die Teilräume $\mathcal{V}^l = \mathcal{V}_1$ und $\mathcal{V}^h = \mathcal{V}_2$. Das approximative Inverse kann auf dem hochfrequenten Unterraum über $R_2^{-1} = D_2 := diag(L_2) = diag(L + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C})$ bestimmt werden, wenn κ nicht zu große Werte annimmt. Das approximative Inverse auf dem niederfrequenten Unterraum soll über die Diagonalmatrix $(D^1)^{-1}$ auf dem Blockgitterraum bestimmt werden.

Satz 8.13 *Wir gehen von dem verallgemeinerten Operator $D^{-1}L$ aus, mit*

$$\lambda \leq D^{-1}L,$$

und der Gültigkeit der Gleichung (61), mit $\mathcal{I} = \mathcal{A}+\Gamma' h'$. Es sei $(D^1)^{-1} = \mathcal{C}D^{-1}\mathcal{C}^*$. Desweiteren transformiere sich das approximative Inverse R^1 auf dem Blockgitter gemäß $R_1 = \mathcal{I}R^1\mathcal{I}^*$ auf den hochfrequenten Unterraum. Überdies sei R^1 zu $R^1 = (D^1)^{-1}\mathcal{K}$ definiert, mit $\mathcal{K} = (I - \frac{1}{\kappa}u^{-1})^{-1} : \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}^1$. Dann lauten die Schranken des Operators $R^1\tilde{L}^1 = R^1\mathcal{A}^*L\mathcal{A} : \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}^1$ für endliches κ:

$$\frac{\lambda\kappa}{\kappa + \lambda} \leq R^1\tilde{L}^1 \leq \kappa.$$

<u>Beweis:</u> Aus $\lambda \leq D^{-1}L$ folgt analog zu dem Beweis von Satz 8.1

$$\begin{array}{rcl}
(D^1)^{-1} & = & \mathcal{C}D^{-1}\mathcal{C}^* \geq \lambda\mathcal{C}L^{-1} = \lambda(u - \frac{1}{\kappa}) \\
& = & \lambda(\mathcal{K}\mathcal{A}^*L\mathcal{A}\mathcal{K})^{-1}\mathcal{C}^* = \lambda\mathcal{K}^{-1}(\tilde{L}^1)^{-1}\mathcal{K}^{-1} \\
\Leftrightarrow \frac{1}{\lambda} & \geq & uD^1 - \frac{1}{\kappa}D^1 = (\mathcal{K}\mathcal{A}^*L\mathcal{A})^{-1}D^1 - \frac{1}{\kappa}D^1 \\
& \overset{Def.R^1}{=} & (\tilde{L}^1)^{-1}(R^1)^{-1} - \frac{1}{\kappa}D^1 \\
\Leftrightarrow (R^1\tilde{L}^1)^{-1} & \leq & \frac{1}{\lambda} + \frac{\|D^1\|}{\kappa} \quad \Rightarrow \quad (\frac{1}{\lambda} + \frac{\|D^1\|}{\kappa})^{-1} \leq R^1\tilde{L}^1 \\
\text{und} \qquad 0 & \leq & (u - \frac{1}{\kappa})D^1 = uD^1 - \frac{1}{\kappa}D^{-1} \\
\frac{D^1}{\kappa} & \leq & uD^1 - \frac{1}{\kappa}D^{-1} + \frac{D^1}{\kappa} = (R^1\tilde{L}^1)^{-1}
\end{array}$$

$\|D^1\|$ sei der maximale Eintrag der Diagonalmatrix auf dem Blockgitter. In Anlehnung an Abschnitt 2.2 setzen wir o.B.d.A. $D^1 = I$ und damit den Diagonalteil von $\tilde{L}^1$ zu I. □

Die so optimierten Schranken sind auf Theorem 5 zu übertragen:

Korollar 5 *Gegeben sei eine Zerlegung des Vektorraumes $\mathcal{V}$ in einen hoch- und einen niederfrequenten Teilraum $\mathcal{V}^h = \mathcal{V}_2$ und $\mathcal{V}^l = \mathcal{V}_1$, die mithilfe der Projektoren $Q_1 = (I - \mathcal{IC})$ und $Q_2 = \mathcal{IC}$ konstruiert werden. Insbesondere sei $\mathcal{CI} = \mathcal{CA}$. Es sei $\lambda_i \leq D_i^{-1} L_i \leq \Lambda_i$, desweiteren existiere eine Abschätzung des Nichtdiagonalterms gemäß*

$$|\langle v^h, h' V^1 \rangle| \leq k_0' [\langle v^h, L_2 v^h \rangle + \langle V^1 \mathcal{I}'^* L \mathcal{I}' V^1 \rangle]$$

und außerdem sei

$$h'^* \Gamma' h' \leq k_1' \mathcal{A}^* L \mathcal{A},$$

dann konvergiert das Iterationsverfahren

$$u^{k+\frac{i}{2}} = u^{k+\frac{i-1}{2}} R_i Q_i (f - L u^{k+\frac{i-1}{2}}),$$

mit $i = 1, 2$, also für das Zweigitter mit der Konvergenzrate

$$\rho(M_2) \leq 1 - \frac{2 - \max\{\Lambda_1; \Lambda_2\}}{\max\left\{\frac{1}{\lambda^1 (1 - 2k_0')}; \frac{1}{\sigma(1 - k_0')}\right\}\left(1 + k_0' \max\left\{\Lambda_2; (1 + k_1')\Lambda^1\right\}\right)},$$

wobei $\lambda^1 = \frac{\lambda\kappa}{\kappa + \lambda}$ und $\Lambda^1 = \kappa$.

Für endliches κ und unter der Annahme, das approximative Inverse des Problemoperators eines Teilraums kann aus der Jacobi-Iteration hergeleitet werden (d.h. man geht über eine Abschätzung des verallgemeinerten Operators $D^{-1}L$ auf der jeweiligen Gitterschicht und bestimmt das approximative Inverse eines Unterraums hierfür) ergeben sich gute obere und untere Schranken auf dem niederfrequenten Unterraum. Auf dem hochfrequenten Unterraum $\mathcal{V}_\mathcal{C}$ sollte das approximative Inverse von dem Fluktuationspropagator explizit abgeleitet werden. Für den Fall $\kappa \to infty$ wäre eine bessere Schranke zu finden.

9 Minimierung des Kostenfunktionals

Wir lösen uns im Prinzip von der Xu'schen Betrachtung und wenden uns einem alternativem Zugang zu. Es wird zunächst ein Energiefunktional, das sogenannte Kostenfunktional, eingeführt. Schließlich soll die Näherungslösung u so korrigiert werden, dass sie dieses Energiefunktional minimiert. Es handelt sich hierbei um Teilraumkorrekturen, die mit exakten und schließlich auch mit praktischen Interpolationskernen konstruiert werden. In beiden Fällen wird ein Faktor ermittelt, um welchen das Kostenfunktional bei optimaler Korrektur erniedrigt wird. Man könnte durch diese optimale Korrektur ein „gutes" approximatives Inverses R_i des Problemoperators des Xu'schen Formalismus ermitteln.

9.1 Kostenfunktional für exakte $\mathcal{A}$-Kerne

Wir betrachten wiederum die Eigenwertgleichung in ihrer nicht verallgemeinerten Form

$$L\varphi(z) = \epsilon\varphi(z),$$

mit den fundamentalen Gitterpunkten $z \in \Lambda^0$. Man kann die Interpolationskerne, also die Spalten der Interpolationsoperatoren, auch nach den Eigenmoden des Problemoperators entwickeln:

$$\mathcal{A}^i(z,x) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(z)\langle\varphi_\alpha(z), \mathcal{A}^i(z,x)\rangle,$$

für festes $z \in \Lambda^0$, $x \in \Lambda^i$ (i-tes Blockgitter).

Wie es ebenfalls beim ISU-Verfahren [6] praktiziert wurde, kann man nun die Interpolationskerne direkt als glatteste Moden ansetzen. Die Idee ist es also, die Kerne über die Lösung der Eigenwertgleichung zu bestimmen:

$$L\mathcal{A}^i(z,x) = \epsilon_{i\,\min}(x)\mathcal{A}^i(z,x)$$

Nach dem Ritzschen Variationsprinzip kann man die **Extremalitätsforderung** folgendermaßen formulieren:

$$\begin{aligned} \operatorname{Spur} \tilde{L}^i(x,x) = \epsilon_i(x) &= \min \\ \Leftrightarrow \operatorname{Spur} \sum_{z,z' \in \Lambda^0} \mathcal{A}^{i*}(x,z)L(z,z')\mathcal{A}^i(z',x) &= \min, \end{aligned}$$

wobei die Normierungsbedingung mittels Lagrangemultiplikatoren einzubringen sind. (Für den Fall $\kappa \to \infty$ ist die Nebenbedingung $\mathcal{CA} = I$ zu berücksichtigen.)

Beispiel: Sei $L = -\Delta + m^2$ auf einem Gitter mit den Punkten $z = 0 \ldots s-1$ in einer Dimension, $\mathcal{A}(z) = \mathcal{N} \sin \frac{\pi(z+1)}{s+1}$, so dass $\mathcal{A}(-1) = \mathcal{A}(s) = 0$, mit der Normierungskonstanten $\mathcal{N}$. Das Blockgitter bestehe aus einem Gitterpunkt. $\mathcal{A}(z)$

ist die kleinste Eigenmode des Laplaceoperators. Die exakten Eigenmoden des Laplaceoperators kann man schreiben als: $\varphi_k(z) = \frac{1}{\sqrt{s}} e^{ikz}$, mit $k = \frac{2\pi\alpha}{s}, \alpha = 0 \ldots s-1$. Schließlich erhält man als Projektion des Interpolationsoperators (langwelligste Mode) auf die exakten Eigenmoden des Laplaceoperators:

$$\langle \varphi_k, \mathcal{A} \rangle = \mathcal{N} \frac{\sin l - \sin l(s+1) + e^{ik} \sin ls}{2e^{ik}[\cos k - \cos l]},$$

mit $l = \frac{\pi}{s+1}$.

Aus dieser Extremalitätsforderung ergibt sich sofort eine allgemeine Form eines **Kostenfunktionals**, welches es zu minimieren gilt. Für die Problemgleichung $Lu = f$ lautet es:

$$E(u) = \frac{1}{2} \langle u, Lu \rangle - \langle u, f \rangle \tag{62}$$

Bäker führte dieses Energiefunkional als Maß für die Güte der Lösung der Eigenwertgleichung ein (vgl. [6]). Man betrachte hoch- und niederfrequente Anteile.

$$E(u) = \frac{1}{2} \big(\langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^h \rangle + \langle \tilde{u}^l, L\tilde{u}^l \rangle + \langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^l \rangle + \langle \tilde{u}^l, L\tilde{u}^h \rangle \big) - \langle \tilde{u}^h, f \rangle - \langle \tilde{u}^l, f \rangle = \min$$

Bei der Betrachtung exakter Interpolationskerne verschwinden die gemischten Terme, so dass sich hoch- und niederfrequentes Kostenfunktional getrennt formulieren lassen:

$$\begin{aligned} E^h(u) &= \frac{1}{2} \langle (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})u, L(I - \mathcal{A}'\mathcal{C})u \rangle - \langle (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})u, f \rangle \\ E^l(u) &= \frac{1}{2} \langle U^1, \mathcal{A}'^* L \mathcal{A}' U^1 \rangle - \langle \mathcal{A}' U^1, f \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle U^1, \tilde{L}'^1 U^1 \rangle - \langle U^1, \mathcal{A}'^* f \rangle, \end{aligned}$$

mit $U^1 = \mathcal{C}u$ und $\tilde{L}'^1 = \mathcal{K}\tilde{L}^1\mathcal{K} = \mathcal{A}'^* L \mathcal{A}' \overset{\kappa \to \infty}{\to} \tilde{L}^1$.

Wir wollen die Näherungslösung u so updaten, dass das Kostenfunktional der verbesserten Lösung minimiert wird:

$$u \to u + \delta u,$$

d.h. den Term δu auf diese Weise ermitteln. Desweiteren setzen wir nun ein nieder- und ein hochfrequentes **Updating** folgendermaßen an:

$$\begin{aligned} u &\to u + \tilde{\Theta}_h (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})(f - Lu) \\ U^1 &\to U^1 + \tilde{\Theta}_l (\mathcal{A}'^* f - \tilde{L}'^1 U^1) \\ \text{oder} \quad u &\to u + \tilde{\Theta}_l \mathcal{A}' \mathcal{A}'^* (f - Lu) \end{aligned}$$

Dementsprechend sollen also die Faktoren $\tilde{\Theta}_l$ und $\tilde{\Theta}_h$ bestimmt werden. Es erweist sich als günstig das hochfrequente Updating allerdings gemäß

$$u \quad \to \quad u + \tilde{\Theta}_h (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)(f - Lu)$$

anzusetzen, da auf diese Weise tatsächlich nur die hochfrequenten Anteile beitragen:

$$\begin{aligned}(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)(f - Lu) &= (I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)(f - L\tilde{u}^h - L\mathcal{A}'\mathcal{C}u) \\ &= (I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)(f - L\tilde{u}^h) - (I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)\mathcal{C}^* L\mathcal{C}'^* u \\ &\overset{\mathcal{A}'^*\mathcal{C}^*=I}{=} (I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)(f - L\tilde{u}^h)\end{aligned}$$

Satz 9.1 *Das Minimum des hochfrequenten Kostenfunktionals wird für*

$$\tilde{\Theta}_h = \frac{\langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h \rangle}{\langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, L[(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h \rangle}$$

erreicht.

<u>Beweis:</u> O.B.d.A. setzen wir $f = 0$.

$$\begin{aligned}\Rightarrow E^h(u + \delta u) = &\frac{1}{2}\langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^h \rangle - \tilde{\Theta}_l \langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, L\tilde{u}^h \rangle \\ &+ \frac{\tilde{\Theta}^2}{2} \langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, L[(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h \rangle,\end{aligned}$$

wobei $[(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h = (I - \mathcal{A}'\mathcal{C})[(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]$. $E^h(u) = \min$ für

$$\tilde{\Theta}_h \langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, L[(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h \rangle = \langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, L\tilde{u}^h \rangle$$

Desweiteren ist $\langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, L\tilde{u}^h \rangle = \langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h \rangle$. □

Das Updating des hochfrequenten Kostenfunktionals lautet demnach:

$$\begin{aligned}E^h(u) \to \quad & E^h(u) - \frac{1}{2} \frac{|\langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h \rangle|^2}{\langle [(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, L[(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h \rangle} \\ = \quad & E^h(u) + \delta E^h(u)\end{aligned}$$

Unter Verwendung der Schranken $\lambda_L \leq L \leq \Lambda_L$ an den Problemoperator und einer größeren unteren Schranke $\sigma \leq L$ auf $\mathcal{V}_\mathcal{C}$, erhält man

$$\frac{1}{\Lambda_L} \leq \tilde{\Theta}_h \leq \frac{1}{\sigma}.$$

Wir benutzen hier die Abschätzung von $L + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C}$, da das Problem auf dem hochfrequenten Teilraum lebt: $(L + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C})u^h = Lu^h$.

Satz 9.2 *Das hochfrequente Kostenfunktional wird bei optimal gewähltem $\tilde{\Theta}_h$ um den Faktor $\frac{\sigma}{\Lambda_L}$ erniedrigt.*

Beweis:

$$\begin{aligned}
E^h(u) &\rightarrow \frac{1}{2}\big(\langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^h\rangle - \tilde{\Theta}_h\langle[(I-\mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, [(I-\mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h\rangle\big)\\
&= \frac{1}{2}\big(\langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^h\rangle - \tilde{\Theta}_h\langle[(I-\mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)Lu]^h, L\tilde{u}^h\rangle\big)\\
&= \frac{1}{2}\big(\langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^h\rangle - \tilde{\Theta}_h\langle[(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})(I-\mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)L\tilde{u}^h, L\tilde{u}^h\rangle\big)\\
&= \frac{1}{2}\big(\langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^h\rangle - \tilde{\Theta}_h\langle\tilde{u}^h(I-\mathcal{C}^*\mathcal{A}'^*)L^2(I-\mathcal{A}'\mathcal{C})\tilde{u}^h\rangle\big)\\
&= \frac{1}{2}\big(\langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^h\rangle - \tilde{\Theta}_h\langle\tilde{u}^h L^2\tilde{u}^h\rangle\big)\\
&\leq \frac{1}{2}\big(1-\frac{\sigma}{\Lambda_L}\big)\langle \tilde{u}^h, L\tilde{u}^h\rangle = \big(1-\frac{\sigma}{\Lambda_L}\big)E^h(u) \quad \square
\end{aligned}$$

Analog ist das niederfrequente Kostenfunktional zu betrachten:

Satz 9.3 *Es sei $\lambda'_L \leq \tilde{L}'^1$ eine untere Schranke an den Problemoperator $\tilde{L}'^1 = \mathcal{A}'^* L\mathcal{A}'$ auf dem Blockgitter, dann wird das niederfrequente Kostenfunktional bei optimalem $\tilde{\Theta}_l$ um den Faktor λ'_L erniedrigt.*

Beweis: Wiederum folgt für $f = 0$:

$$E^l(U^1 + \delta U^1) = \frac{1}{2}\langle U^1, \tilde{L}'^1 U^1\rangle - \tilde{\Theta}_l\langle \tilde{L}'^1 U^1, \tilde{L}'^1 U^1\rangle + \frac{\tilde{\Theta}_l^2}{2}\langle \tilde{L}'^1 U^1, \tilde{L}'^1 U^1\rangle$$

Dieses Kostenfunktional wird minimal für $\tilde{\Theta}_l = 1$. Schließlich erhält man:

$$\begin{aligned}
E^l(U^1) \rightarrow &\frac{1}{2}\big(\langle U^1, \tilde{L}'^1 U^1\rangle - \langle \tilde{L}'^1 U^1, \tilde{L}'^1 U^1\rangle\big)\\
&\leq \frac{1}{2}\big(1-\lambda'_L\big)\langle U^1, \tilde{L}'^1 U^1\rangle = \big(1-\lambda'_L\big)E^l(U^1) \quad \square
\end{aligned}$$

Anmerkung: Für den Fall $\kappa \to \infty$ ist lediglich die Abschätzung von $\tilde{L}'^1 = \mathcal{A}'^* L\mathcal{A}'$ infolge des Übergangs $\mathcal{A}' \to \mathcal{A}$ durch eine von $\tilde{L}^1 = \mathcal{A}^* L\mathcal{A}$ zu ersetzen.

Man kann nun andernfalls die gewöhnlichen Iterationsverfahren daraufhin überprüfen, wie sie das Kostenfunktional minimieren, oder andererseits den Dämpfungsparameter ω des Jacobi-Verfahrens in Hinblick auf das minimalste Kostenfunktional ermitteln (vgl. Kap. 2.2), wenn man dafür statt L den verallgemeinerten Operator $D^{-1}L$ abschätzt.

9.2 Kostenfunktional für praktische $\mathcal{I}$-Kerne

Im Folgenden wollen wir nun die entsprechenden Updatings für die Teilräume, die mithilfe der praktischen Interpolationskerne konstruiert werden, betrachten. Eine Zerlegung des Kostenfunktionals in ein hoch- und ein niederfrequentes ist hier nicht ohne gemischte Terme möglich, da die Teilräume $\mathcal{IC}\mathcal{V}$ und $(I-\mathcal{IC})\mathcal{V}$ nicht zueinander orthogonal sind. Trotzallem nehmen wir die zu den soeben untersuchten analogen Updatings der Form

$$\begin{aligned} u &\rightarrow u + \Theta_h(I-\mathcal{IC})(f-Lu) \\ u &\rightarrow u + \Theta_l\mathcal{II}^*(f-Lu) \end{aligned}$$

an.

Bemerkung: $(I-\mathcal{IC})$ steht im Prinzip ebenso für $(I-\mathcal{IC})(I-\mathcal{C}^*\mathcal{I}^*)$, wenn man die Galerkin-Wahl $\mathcal{C}=(\mathcal{I}^*\mathcal{I})^{-1}\mathcal{I}^*$ aus Kap. 4.1 berücksichtigt.

Satz 9.4 *Das hochfrequente Updating lautet mit dem niederfrequenten Anteil:*

$$u \rightarrow u - \Theta_h(I-\mathcal{IC})[Lu^h + hU^1],$$

wobei L angewandt auf dem hochfrequenten Teilraum wiederum durch $L+\kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C}$ ersetzt werden kann.

Beweis: Für $f=0$ folgt

$$\begin{aligned} u \rightarrow & u - \Theta_h(I-\mathcal{IC})[Lu^h + L\mathcal{I}U^1] \\ & \overset{(34)}{=} u - \Theta_h(I-\mathcal{IC})[Lu^h + L\mathcal{A}U^1 + L\Gamma hU^1] \\ & \overset{(32),(40)}{=} u - \Theta_h(I-\mathcal{IC})[Lu^h + \mathcal{C}^*\tilde{L}^1U^1 + (I-\mathcal{C}^*\mathcal{A}^*)hU^1] \\ & = u - \Theta_h(I-\mathcal{IC})[Lu^h + \mathcal{C}^*\tilde{L}^1U^1 + (I-\mathcal{C}^*\mathcal{I}^*)hU^1 + \mathcal{C}^*h^*\Gamma hU^1] \\ & \overset{I-\mathcal{IC}=I-\mathcal{C}^*\mathcal{I}^*}{=} u - \Theta_h(I-\mathcal{IC})[Lu^h + \mathcal{C}^*\tilde{L}^1U^1 + hU^1 + \mathcal{C}^*h^*\Gamma hU^1] \\ & \overset{(I-\mathcal{C}^*\mathcal{I}^*)\mathcal{C}^*=0}{=} u - \Theta_h(I-\mathcal{IC})[Lu^h + hU^1] \quad \square \end{aligned}$$

Die Beimischung von hochfrequenten Anteilen in dem niederfrequenten Updating ergibt sich über den Weg der exakten Kerne.

Satz 9.5 *Das niederfrequente Updating lässt sich schreiben als:*

$$\begin{aligned} u &\rightarrow u - \Theta_l\mathcal{I}\big(\hat{L}^1U^1 + h^*u^h,\big) \\ \textit{oder}\quad U^1 &\rightarrow U^1 - \Theta_l\big(\hat{L}^1U^1 + h^*u^h\big) \end{aligned}$$

Beweis: Um den hochfrequenten Anteil zu separieren, ersetzen wir zunächst $\mathcal{I}$ durch $\mathcal{A} + \Gamma h$ und nehmen wiederum o.B.d.A. $f = 0$ an:

$$\begin{aligned} u \to & u - \Theta_l \mathcal{I}\mathcal{I}^* Lu \\ & = u - \Theta_l(\mathcal{A} + \Gamma h)(\mathcal{A}^* + h^*\Gamma)Lu \\ & \overset{(32)}{=} u - \Theta_l(\mathcal{A} + \Gamma h)[\mathcal{A}^* Lu + h^*(I - \mathcal{A}\mathcal{C})u] \\ & \overset{(40)}{=} u - \Theta_l(\mathcal{A} + \Gamma h)[\tilde{L}^1 \mathcal{C}u + h^*(I - \mathcal{A}\mathcal{C})u] \\ & \overset{\mathcal{C}u = U^1}{=} u - \Theta_l(\mathcal{A} + \Gamma h)[\tilde{L}^1 U^1 + h^*(I - \mathcal{I}\mathcal{C})u + h^*\Gamma h\mathcal{C}u] \\ & = u - \Theta_l \mathcal{I}[\{\tilde{L}^1 + h^*\Gamma h\}U^1 + h^* u^h]. \end{aligned}$$

Es ist $\hat{L}^1 = \tilde{L}^1 + h^*\Gamma h$ (43). Die zweite Zeile ergibt sich durch Anwendung von $\mathcal{C}$. □

Lemma 5 *In Matrixschreibweise lautet das hochfrequente Updating für $f = 0$*

$$\begin{pmatrix} u^h \\ U^1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} I - \Theta_h L & -\Theta_h(I - \mathcal{I}\mathcal{C})h \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^h \\ U^1 \end{pmatrix} \tag{63}$$

und das niederfrequente Updating

$$\begin{pmatrix} u^h \\ U^1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} I & 0 \\ -\Theta_l h^* & I - \Theta_l \hat{L}^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^h \\ U^1 \end{pmatrix}. \tag{64}$$

Korollar 6 *Offensichtlich ist die Reihenfolge, in welcher korrigiert wird, ein nicht zu vernachlässigendes Kriterium:*

- *Folgt auf ein niederfrequentes ein hochfrequentes Updating, so lautet die Matrix*

$$\begin{pmatrix} u^h \\ U^1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} I - \Theta_h L + \Theta_h \Theta_l (I - \mathcal{I}\mathcal{C})hh^* & -\Theta_h(I - \mathcal{I}\mathcal{C})h[I - \Theta_l \hat{L}^1] \\ -\Theta_l h^* & I - \Theta_l \hat{L}^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^h \\ U^1 \end{pmatrix}. \tag{65}$$

- *Wird andersherum zuerst hochfrequent korrigiert, so folgt*

$$\begin{pmatrix} u^h \\ U^1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} I - \Theta_h L & -\Theta_h(I - \mathcal{I}\mathcal{C})h \\ -\Theta_l h^* + \Theta_l \Theta_h h^* L & \Theta_l \Theta_h h^*(I - \mathcal{I}\mathcal{C})h + (I - \Theta_l \hat{L}^1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^h \\ U^1 \end{pmatrix}. \tag{66}$$

Im Vergleich hierzu lautet die reine Diagonalform des Updatings bezüglich exakter Interpolationskerne

$$\begin{pmatrix} \tilde{u}^h \\ U^1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} I - \tilde{\Theta}_h(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}^*)L & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^h \\ U^1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{u}^h \\ U^1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I - \tilde{\Theta}_l \tilde{L}^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^h \\ U^1 \end{pmatrix}.$$

Satz 9.6 *Das Kostenfunktional wird bei der Verwendung des hochfrequenten Updatings für*

$$\Theta_h = \frac{\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L[Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1]\rangle}{\langle Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1, L[Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1]\rangle} \tag{67}$$

minimiert.

Beweis:

$E(u^h + \mathcal{I}U^1) \rightarrow$

$\frac{1}{2}\langle (I - \Theta_h L)u^h - \Theta_h(I - \mathcal{IC})hU^1 + \mathcal{I}U^1, L[(I - \Theta_h L)u^h - \Theta_h(I - \mathcal{IC})hU^1 + \mathcal{I}U^1]\rangle$

Man differenziert nach Θ_h und löst danach auf. □

Satz 9.7 *Das Kostenfunktional wird bei der Verwendung des niederfrequenten Updatings für*

$$\Theta_l = \frac{\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(\mathcal{I}h^* u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1 U^1)\rangle}{\langle \mathcal{I}h^* u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1 U^1, L(\mathcal{I}h^* u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1 U^1)\rangle} \tag{68}$$

minimiert.

Beweis:

$E(u^h + \mathcal{I}U^1) \rightarrow \frac{1}{2}\langle u^h - \Theta_l \mathcal{I}h^* u^h + \mathcal{I}(I - \Theta_l \hat{L}^1)U^1, Lu^h - \Theta_l \mathcal{I}h^* u^h + \mathcal{I}(I - \Theta_l \hat{L}^1)U^1\rangle$

Differenzieren und Auflösen nach Θ_l führt zu dem Ergebnis. □

Satz 9.8 *Es sei $L \leq \Lambda_L$ und $\sigma \leq L + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C}$. Das Kostenfunktional wird unter dem hochfrequenten Updating bei optimalgewähltem Θ_h und unter Annahme, dass $\mathcal{C}^*\mathcal{I}^* = \mathcal{IC}$ (Galerkin-Wahl) mindestens um den Faktor $\frac{\sigma}{\Lambda_L}$ erniedrigt.*

Beweis:

$$\begin{aligned}
&E(u^h + \mathcal{I}U^1) \overset{\text{hochfrequent}}{\rightarrow} \\
&\frac{1}{2}\langle u^h + \mathcal{I}U^1 - \Theta_h[Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1], L(u^h + \mathcal{I}U^1 - \Theta_h[Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1])\rangle \\
&\overset{(67)}{=}\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{|\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L[Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1]\rangle|^2}{\langle [Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1], L[Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1]\rangle}\big] \\
&\overset{(*)}{=}\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{|\langle [Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1], [Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1]\rangle|^2}{\langle [Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1], L[Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1]\rangle}\big] \\
&\leq\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{1}{\Lambda_L}\langle [Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1], [Lu^h + (I - \mathcal{IC})hU^1]\rangle\big] \\
&\overset{(*)}{=}\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{1}{\Lambda_L}\langle [L(u^h + \mathcal{I}U^1)], [L(u^h + \mathcal{I}U^1)]\rangle\big] \\
&=(1 - \frac{\sigma}{\Lambda_L})E(u)
\end{aligned}$$

$$(*):\quad L\mathcal{I} \overset{(34)}{=} L\mathcal{A} + L\Gamma h \overset{(32)}{=} L\mathcal{A} + (I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}^*)h$$
$$\overset{(40)}{=} \mathcal{C}^*(\tilde{L}^1 + h^*\Gamma h) + (I - \mathcal{C}^*\mathcal{I}^*)h \overset{Galerkin}{=} \mathcal{C}^*(\tilde{L}^1 + h^*\Gamma h) + (I - \mathcal{I}\mathcal{C})h \quad \square$$

Satz 9.9 *Das Kostenfunktional wird unter dem niederfrequenten Updating bei optimal gewähltem* Θ_l *um den Faktor* $\frac{\lambda_L \ \|\mathcal{I}\|^2}{\hat{\Lambda}_L}$ *erniedrigt, wobei* $\lambda_L \leq L$ *und* $\hat{L}^1 = \mathcal{I}^* L \mathcal{I} \leq \hat{\Lambda}_L$.

Beweis:

$$\begin{aligned}
&E(u^h + \mathcal{I}U^1) \overset{\text{niederfrequent}}{\rightarrow} \\
=&\frac{1}{2}\langle u^h + \mathcal{I}U^1 - \Theta_l(\mathcal{I}h^*u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1U^1), L[u^h + \mathcal{I}U^1 - \Theta_l(\mathcal{I}h^*u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1U^1)]\rangle \\
\overset{(68)}{=}&\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{|\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(\mathcal{I}h^*u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1U^1)\rangle|^2}{\langle(\mathcal{I}h^*u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1U^1), L(\mathcal{I}h^*u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1U^1)\rangle}\big] \\
=&\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{|\langle \mathcal{I}^*Lu^h + \mathcal{I}^*L\mathcal{I}U^1, (h^*u^h + \hat{L}^1U^1)\rangle|^2}{\langle(\mathcal{I}h^*u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1U^1), L(\mathcal{I}h^*u^h + \mathcal{I}\hat{L}^1U^1)\rangle}\big] \\
\overset{(*)}{=}&\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{|\langle h^*u^h + \hat{L}^1U^1, h^*u^h + \hat{L}^1U^1)\rangle|^2}{\langle(h^*u^h + \hat{L}^1U^1), \hat{L}^1(h^*u^h + \hat{L}^1U^1)\rangle}\big] \\
\leq&\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{1}{\hat{\Lambda}_L}\langle h^*u^h + \hat{L}^1U^1, h^*u^h + \hat{L}^1U^1\rangle\big] \\
\overset{(*)}{=}&\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{1}{\hat{\Lambda}_L}\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L\mathcal{I}\mathcal{I}^*L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle\big] \\
\leq&\frac{1}{2}\big[\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle - \frac{\lambda_L \ \|\mathcal{I}\|^2}{\hat{\Lambda}_L}\langle u^h + \mathcal{I}U^1, L(u^h + \mathcal{I}U^1)\rangle\big]
\end{aligned}$$

$$(*):\quad \mathcal{I}^*Lu^h \overset{(34)}{=} \mathcal{A}^*L + h^*\Gamma L \overset{(40),(32)}{=} \tilde{L}^1\mathcal{C}u^h + h^*(I - \mathcal{A}\mathcal{C})(I - \mathcal{I}\mathcal{C})u$$
$$= h^*(I - \mathcal{I}\mathcal{C})u = h^*u^h \quad \square$$

10 Formulierung der Mehrgitterschritte

Die Ergebnisse der Zweigitterbetrachtung sind nun in geeigneter Weise zu einem Mehrgitterschritt zu formieren. Nicht nur in physikalischen Wissenschaften geht man von verschiedenen Betrachtungsebenen (Skalen) aus: Elementarteilchen formen Atome und Moleküle, diese wiederum beispielsweise Zellen, die Bestandteile von Organen und diese von Organismen sind. Irgendwo in dieser Kette taucht der Mensch auf, der sich mit anderen zu Interessengruppen zusammenschließt, die sozialpsychologisch untersucht werden. In der Regel werden Phänomene solcher gröberen Skalen nicht direkt aus im Vergleich dazu sehr feinen Skalen abgeleitet. Das wäre ungefähr so, als würde man politische Ereignisse mithilfe menschlicher Zellbestandteile erklären. Man bewegt sich also besser von einer Skala auf die nächste. Im Zuge dessen sollen also im Folgenden die Interpolations- und Mittelungsoperatoren jeweils zwischen zwei unmittelbar aufeinanderfolgenden Gitterschichten operieren, was einer Formulierung als **echtes Mehrgitter** entspricht. Ein weiterer Vorteil dessen ist die Möglichkeit einer universelleren Formulierung, da sich ein echtes Mehrgitter als Unigrid-Verfahren implementieren lässt. Da man hierbei jeweils nur zwei Gitterschichten betrachtet, finden die Ergebnisse aus Kapitel 8 und 9 ihre unmittelbare Anwendung.
Der Einfachheit halber sei nun $\kappa \to \infty$. Wir betrachten wie in Kapitel 2.3 die Sequenz der Gitter $\Lambda = \Lambda^J, \ldots, \Lambda^2, \Lambda^1$ mit den zugehörigen Hilberträumen $\mathcal{V} = \mathcal{V}^J, \ldots \mathcal{V}^2, \mathcal{V}^1$. Die Problemoperatoren auf den gröberen Skalen seien in analoger Weise durchnummeriert. Das fundamentale Gitter bekommt also den höchsten Index. Die Teilräume, die mithilfe der exakten Interpolationskernen konstruiert sind, sollen mit $\tilde{\mathcal{V}}_J, \tilde{\mathcal{V}}_{J-1}, \ldots, \tilde{\mathcal{V}}_2, \tilde{\mathcal{V}}_1$ identifiziert werden, sowie mit $\mathcal{V}_J, \mathcal{V}_{J-1}, \ldots, \mathcal{V}_2, \mathcal{V}_1$ für die Konstruktion mit praktischen Kernen. Dies sind Teilräume des Funktionenraumes $\mathcal{V}$ über dem fundamentalen Gitter. Auf ihre Konstruktion wird am Ende dieses Kapitels noch eingegangen. Man mittele und interpoliere zwischen dem fundamentalen Gitter und dem ersten Blockgitter Λ^{J-1} mit dem Funktionenraum $\mathcal{V}^{J-1}$ nach:

$$\mathcal{C}^{J-1,J} : \mathcal{V} \to \mathcal{V}^{J-1} \qquad \begin{aligned} \mathcal{A}^{J,J-1} &: \mathcal{V}^{J-1} \to \tilde{\mathcal{V}}_{J-1} \subset \mathcal{V} \\ \mathcal{I}^{J,J-1} &: \mathcal{V}^{J-1} \to \mathcal{V}_{J-1} \subset \mathcal{V} \end{aligned}$$

Den gesamten Raum $\mathcal{V}$ kann man gemäß $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{\mathcal{C}^{J-1,J}} \oplus \mathcal{I}^{J,J-1}\mathcal{V}^{J-1}$ darstellen. Andererseits ist auch die Zerlegung $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{\mathcal{C}^{J-1,J}} \oplus \mathcal{A}^{J,J-1}\mathcal{V}^{J-1}$ möglich, deren Teilräume im Gegensatz zur Zerlegung mit praktischen $\mathcal{I}$-Kernen orthogonal zueinander sind. Fluktuationspropagator und Randterme operieren folgendermaßen:

$$\Gamma^J : \mathcal{V} \to \mathcal{V} \qquad h^{J,J-1} : \mathcal{V}^{J-1} \to \mathcal{V}$$

Dementsprechend lauten die Problemoperatoren auf der „ersten Blockebene“:

$$\tilde{L}^{J-1} = \mathcal{A}^{J-1,J*} L \mathcal{A}^{J,J-1} : \mathcal{V}^{J-1} \to \mathcal{V}^{J-1}$$
$$\hat{L}^{J-1} = \mathcal{I}^{J-1,J*} L \mathcal{I}^{J,J-1} : \mathcal{V}^{J-1} \to \mathcal{V}^{J-1}$$

Gleichung (43) ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} L^{j-1}_{exakt} &= \tilde{L}^{J-1} = \mathcal{A}^{J-1,J*} L \mathcal{A}^{J,J-1} \qquad : \mathcal{V}^{J-1} \to \mathcal{V}^{J-1} \\ &= \mathcal{I}^{J-1,J*} L \mathcal{I}^{J,J-1} - h^{J-1,J*} \Gamma^J h^{J,J-1} \\ &= \hat{L}^{J-1} - h^{J-1,J*} \Gamma^J h^{J,J-1} \end{aligned}$$

Der mithilfe der exakten Interpolationskerne gebildete Blockproblemoperator wurde schon zuvor als (vgl. Lemma 2) „exakter Blockproblemoperator“ bezeichnet. Wir schreiben dementsprechend:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}^{J-2,J-1} &: \mathcal{V}^{J-1} \to \mathcal{V}^{J-2} & \mathcal{A}^{J-1,J-2} &: \mathcal{V}^{J-2} \to \tilde{\mathcal{V}}^{J-1}_{J-2} \subset \mathcal{V}^{J-1} \\ & & \mathcal{I}^{J-1,J-2} &: \mathcal{V}^{J-2} \to \mathcal{V}^{J-1}_{J-2} \subset \mathcal{V}^{J-1} \\ \Gamma^{J-1} &: \mathcal{V}^{J-1} \to \mathcal{V}^{J-1} & h^{J-1,J-2} &: \mathcal{V}^{J-2} \to \mathcal{V}^{J-1} \end{aligned}$$

Die Räume $\tilde{\mathcal{V}}^{J-1}_{J-2}$ und $\mathcal{V}^{J-1}_{J-2}$ sind die niederfrequenten Teilräume des Funktionenraumes über dem ersten Blockgitter $\mathcal{V}^{J-1}$.

$$\begin{aligned} L^{J-2}_{exakt} &= \tilde{L}^{J-2} = \mathcal{A}^{J-2,J-1*} \tilde{L}^{J-1} \mathcal{A}^{J-1,J-2} \qquad : \mathcal{V}^{J-2} \to \mathcal{V}^{J-2} \\ &= \mathcal{A}^{J-2,J-1*} \mathcal{A}^{J-1,J*} L \mathcal{A}^{J,J-1} \mathcal{A}^{J-1,J-2} \\ &= \mathcal{A}^{J-2,J-1*} \tilde{L}^{J-1} \mathcal{A}^{J-1,J-2} - \mathcal{A}^{J-2,J-1*} h^{J-1,J*} \Gamma^J h^{J,J-1} \mathcal{A}^{J-1,J-2} \\ &= \mathcal{A}^{J-2,J-1*} \mathcal{I}^{J-1,J*} L \mathcal{I}^{J,J-1} \mathcal{A}^{J-1,J-2} - \mathcal{A}^{J-2,J-1*} h^{J-1,J*} \Gamma^J h^{J,J-1} \mathcal{A}^{J-1,J-2} \end{aligned} \tag{69}$$

Außerdem kann man mithilfe von

$$\begin{aligned} \hat{L}^{J-2} &= \mathcal{I}^{J-2,J-1*} \tilde{L}^{J-1} \mathcal{I}^{J-1,J-2} \\ &= \mathcal{I}^{J-2,J-1*} \mathcal{A}^{J-1,J*} L \mathcal{A}^{J,J-1} \mathcal{I}^{J-1,J-2} \\ &= \mathcal{I}^{J-2,J-1*} \mathcal{I}^{J-1,J*} L \mathcal{I}^{J,J-1} \mathcal{I}^{J-1,J-2} + \mathcal{I}^{J-2,J-1} h^{J-1,J*} \Gamma^J h^{J,J-1} \mathcal{I}^{J-1,J-2} \end{aligned}$$

den Problemoperator auch folgendermaßen formulieren:

$$\tilde{L}^{J-2} = \hat{L}^{J-2} - h^{J-2,J-1*} \Gamma^{J-1} h^{J-1,J-2}$$

Es wird also jedes Blockgitter lediglich wiederum in einen hoch- und einen niederfrequenten Raum zerlegt. Wie gehabt kann dies mittels der Projektoren

$$\begin{aligned} I - \mathcal{I}^{j,j-1} \mathcal{C}^{j-1,j} &: \mathcal{V}^j \to [\mathcal{V}^j]^h & \mathcal{I}^{j,j-1} \mathcal{C}^{j-1,j} &: \mathcal{V}^j \to [\mathcal{V}^j]^l \\ I - \mathcal{A}^{j,j-1} \mathcal{C}^{j-1,j} &: \mathcal{V}^j \to [\tilde{\mathcal{V}}^j]^h & \mathcal{A}^{j,j-1} \mathcal{C}^{j-1,j} &: \mathcal{V}^j \to [\tilde{\mathcal{V}}^j]^l \end{aligned}$$

geschehen. Jeder Raum $\mathcal{V}^j$ kann also nach $\mathcal{V}^j = \mathcal{V}^j_{\mathcal{C}^{j-1,j}} \oplus \mathcal{I}^{j,j-1} \mathcal{V}^{j-1}$ dargestellt werden, mit $v \in \mathcal{V}^j_{\mathcal{C}^{j-1,j}}$ wenn $\mathcal{C}^{j-1,j} v = 0$ für $v \in \mathcal{V}^j$. Dementsprechend lautet die Zerlegung des gesamten Vektorraumes

$$\begin{aligned} \mathcal{V} = \mathcal{V}^J &= \mathcal{V}_{\mathcal{C}^{J-1,J}} \oplus \mathcal{I}^{J,J-1} \mathcal{V}^{J-1} = \mathcal{V}_{\mathcal{C}^{J-1,J}} \oplus \mathcal{I}^{J,J-1} (\mathcal{V}^{J-1}_{\mathcal{C}^{J-2,J-1}} \oplus \mathcal{I}^{J-1,J-2} \mathcal{V}^{J-2}) \\ &= \ldots = \mathcal{V}_{\mathcal{C}^{J-1,J}} \oplus \mathcal{I}^{J,J-1} (\mathcal{V}^{J-1}_{\mathcal{C}^{J-2,J-1}} \oplus \mathcal{I}^{J-1,J-2} (\ldots \mathcal{I}^{3,2} (\mathcal{V}^2_{\mathcal{C}^{1,2}} \oplus \mathcal{I}^{2,1} \mathcal{V}^1))). \end{aligned}$$

Dies funktioniert in ähnlicher Weise für die exakten $\mathcal{A}$-Kerne.

$$\begin{aligned}\mathcal{V} = \mathcal{V}^J &= \mathcal{V}_{\mathcal{C}^{J-1,J}} \oplus \mathcal{A}^{J,J-1}\mathcal{V}^{J-1} = \mathcal{V}_{\mathcal{C}^{J-1,J}} \oplus \mathcal{A}^{J,J-1}(\mathcal{V}^{J-1}_{\mathcal{C}^{J-2,J-1}} \oplus \mathcal{A}^{J-1,J-2}\mathcal{V}^{J-2}) \\ &= \ldots = \mathcal{V}_{\mathcal{C}^{J-1,J}} \oplus \mathcal{A}^{J,J-1}(\mathcal{V}^{J-1}_{\mathcal{C}^{J-2,J-1}} \oplus \mathcal{A}^{J-1,J-2}(\ldots \mathcal{A}^{3,2}(\mathcal{V}^2_{\mathcal{C}^{1,2}} \oplus \mathcal{A}^{2,1}\mathcal{V}^1))),\end{aligned}$$

mit $\mathcal{V}^j_{\mathcal{C}^{j-1,j}} \perp \mathcal{A}^{j,j-1}\mathcal{V}^{j-1}$. Möchte man andererseits einen direkten Projektor auf den j-ten Unterraum $\mathcal{V}_j$ von $\mathcal{V}$ angeben, so sind aus Mittelungs- und Interpolationsoperatoren Unigrid-Operatoren zu konstruieren. Man kann schreiben:

$$\begin{aligned}\mathcal{I}^{J,J-1} \ldots \mathcal{I}^{j+1,j}\mathcal{C}^{j,j+1} \ldots \mathcal{C}^{J-1,J} &: \mathcal{V} \to \mathcal{V}_j, \quad \text{bzw.} \\ \mathcal{A}^{J,J-1} \ldots \mathcal{A}^{j+1,j}\mathcal{C}^{j,j+1} \ldots \mathcal{C}^{J-1,J} &: \mathcal{V} \to \tilde{\mathcal{V}}_j.\end{aligned}$$

Die sich ergebende Sequenz der Unterräume lautet $\mathcal{M}_1 \subset \mathcal{M}_2 \subset \ldots \mathcal{M}_{J-1} \subset \mathcal{M}_J = \mathcal{V}$, mit

$$\begin{aligned}\mathcal{V}_{J-1} &= \mathcal{I}^{J,J-1}\mathcal{V}^{J-1} & \tilde{\mathcal{V}}_{J-1} &= \mathcal{A}^{J,J-1}\mathcal{V}^{J-1} \\ \mathcal{V}_{J-2} &= \mathcal{I}^{J,J-1}\mathcal{I}^{J-1,J-2}\mathcal{V}^{J-2} & \tilde{\mathcal{V}}_{J-2} &= \mathcal{A}^{J,J-1}\mathcal{A}^{J-1,J-2}\mathcal{V}^{J-2} \\ \mathcal{V}_2 &= \mathcal{I}^{J,J-1} \ldots \mathcal{I}^{3,2}\mathcal{V}^2 & \tilde{\mathcal{V}}_2 &= \mathcal{A}^{J,J-1} \ldots \mathcal{A}^{3,2}\mathcal{V}^2 \\ \mathcal{V}_1 &= \mathcal{I}^{J,J-1} \ldots \mathcal{I}^{2,1}\mathcal{V}^1 & \tilde{\mathcal{V}}_1 &= \mathcal{A}^{J,J-1} \ldots \mathcal{A}^{2,1}\mathcal{V}^1.\end{aligned}$$

Bemerkung: Wegen $\mathcal{V}_{j-1} \subset \mathcal{V}_j$ ist auch $\mathcal{M}_j = \mathcal{V}_j$ für $j \neq J$ und $\mathcal{V} = \mathcal{M}_J = \mathcal{V}_J \cup \mathcal{V}_{J-1} = \mathcal{V}^h \cup \mathcal{V}^l$. Dies gilt ebenso für die mittels exakter Kerne konstruierten Unterräume.

Soll ein mittels praktischer Kerne konstruierter Unterraum von $\mathcal{V}$ durch die exakten Kerne dargestellt werden, so gehen die Randbeiträge $h^{j,j-1}$ folgendermaßen ein:

$$\begin{aligned}\mathcal{V}_j &= (\mathcal{A}^{J,J-1} + \Gamma^J h^{J,J-1}) \ldots (\mathcal{A}^{j+1,j} + \Gamma^{j+1} h^{j+1,j})\mathcal{V}^j \\ &= \tilde{\mathcal{V}}_j \\ &+ \Gamma^J h^{J,J-1}\mathcal{A}^{J-1,J-2} \cdots \mathcal{A}^{j+1,j}\mathcal{V}^j \\ &+ \mathcal{A}^{J,J-1}\Gamma^{J-1}h^{J-1,J-2}\mathcal{A}^{J-2,J-3} \cdots \mathcal{A}^{j+1,j}\mathcal{V}^j \\ &+ \cdots \\ &+ \Gamma^J h^{J,J-1}\Gamma^{J-1}h^{J-1,J-2}\mathcal{A}^{J-2,J-3} \cdots \mathcal{A}^{j+1,j}\mathcal{V}^j \\ &+ \cdots \pm \Gamma^J h^{J,J-1}\Gamma^{J-1}h^{J-1,J-2} \cdots \Gamma^{j+1}h^{j-1,j}\mathcal{V}^j\end{aligned}$$

In Abschnitt 11.5 werden die exakten Blockoperatoren in einer weiteren Form gezeigt. Dort wird der Propagator $\hat{\Gamma}$ vorgestellt, der aus der Verwendung der praktischen Blockoperatoren hervorgeht.

11 Interpretation des Korrekturterms

Wir betrachten die Gleichung (43) aus Lemma 2 zwischen dem fundamentalen Gitter Λ und dem darüberliegenden Blockgitter Λ^1. Mit $\hat{L}^1 = \mathcal{I}^* L \mathcal{I}$ und $\tilde{L}^1 = \mathcal{A}^* L \mathcal{A}$, wobei $\mathcal{I} : \mathcal{M}^1 \to \mathcal{V}$ und $\mathcal{A} : \mathcal{V}^1 \to \mathcal{V}$ schreiben wir nochmal:

$$\begin{aligned} \tilde{L}^1 &= \hat{L}^1 - h^* \Gamma h \\ \tilde{L}^1_{xx'} &= \hat{L}^1_{x,x'} - \sum_{z,z'} h^*(x,z)\Gamma(z,z')h(z',x') \end{aligned} \tag{70}$$

Der Korrekturterm soll nun eine Interpretation in Analogie zu der **Massen- und Wellenfunktionsrenormierung** in der Quantenfeldtheorie erhalten.

11.1 Prinzipien der Renormierung

Ursprünglich wurde Renormierung in der Quantenfeldtheorie eingeführt, um Unendlichkeiten zu isolieren und sie von den physikalisch messbaren Größen zu trennen. Die Massenrenormierung lautet:

$$m^2 = m_0^2 + \delta m^2$$

wobei die m^2 die physikalische und m_0^2 die nackte Masse repräsentiert. Diese Gleichung erinnert an Gleichung (70), wenn wir den Korrekturterm mit dem Massenshift identifizieren wollen: In bosonischen Theorien gilt normalerweise $\delta m^2 < 0$. In der ϕ^4-Theorie gilt: $\delta m^2 = \Sigma(m^2)$. $\Sigma(m^2)$ entsteht aus der Entwicklung der Selbstenergie. Solange δm^2 divergent ist, muss die nackte Masse ebenfalls divergent sein, so dass sich eine endliche physikalische Masse ergibt. Im Allgemeinen ist die physikalische Masse als Pol des Propagators definiert, während die nackte Masse ein Parameter in der Lagrangefunktion ist. In einem Renormierungsgruppenzugang kann man jedoch m^2 auch als Koeffizient eines Massenterms $m^2\phi^2$ in der effektiven Wirkung interpretieren Das renormierte Feld ist definiert durch

$$\phi = Z_\phi^{-\frac{1}{2}} \phi_0,$$

ϕ_0 ist das Feld in der Lagrangefunktion. Z_ϕ wird i. d. R. als Wellenfunktionsrenormierungskonstante bezeichnet [15]. Gängige Renormierungsverfahren finden im Impulsraum statt. Wir betrachten also zunächst die Darstellung der Fouriertransformation.

Wir gehen zurück zum einfachen Zweigitterbeispiel und nehmen zunächst Translationsinvarianz an. Der eigentlich interessante ungeordnete Fall wird später behandelt. Der masselose Propagator für das Laplaceproblem auf dem d-dimensionalen feinen Gitter lautet:

$$v(z-z') = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{k \in \Lambda^*} \tilde{v}(k) e^{-ik(z'-z)} = -\Delta^{-1}(z-z')$$

mit der Fouriertransformierten

$$\tilde{v}(k) = \frac{1}{\sum_\mu \frac{2}{a^2}[1 - \cos k_\mu a]}.$$

Λ^* wird als Dualraum des Gitters Λ bezeichnet, mit $-\frac{\pi}{a} < k_\mu < \frac{\pi}{a}$. Für das Blockgitter Λ^{1*} der Gitterkonstanten a_1 gilt entsprechend $-\frac{\pi}{a_1} < p_\mu < \frac{\pi}{a_1}$ für $p \in \Lambda^{1*}$. Ein unendlich ausgedehntes Gitter besitzt einen kontinuierlichen Dualraum, ein Gitter der Ausdehnung $Na(= N^1 a_1)$ einen diskreten Dualraum. Hier ist $p_\mu, k_\mu \in \frac{2\pi}{Na}\mathbb{Z}$. Überdies betrachten wir in gleicher Weise den Hochfrequenzpropagator $\Gamma(z, z')$ und den Blockpropagator $u(x - x')$:

$$\begin{aligned}
u(x - x') &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{p \in \Lambda^{1*}} \tilde{u}(p) e^{-ip(x'-x)} \overset{(39)}{=} (-\mathcal{K}\mathcal{A}^*\Delta\mathcal{A})^{-1}(x - x') \\
&\overset{\kappa\to\infty}{=} (-\mathcal{A}^*\Delta\mathcal{A})^{-1}(x - x') = (-\mathcal{I}^*\Delta\mathcal{I} - h^*\Gamma h)^{-1}(x - x') \\
\Gamma(z, z') &= \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{l,l' \in D} \int_{p \in \Lambda^{1*}} \tilde{\Gamma}_{l,l'}(p) e^{-i(lz'-l'z)} e^{-ip(z'-z)} = (-\Delta + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C})^{-1}(z, z')
\end{aligned}$$

Anmerkung: Γ ist nur unter der Translation um ein Vielfaches der Blockgitterkonstante invariant. Die Translationsinvarianz kann bei ungeordneten Problemen nicht angenommen werden.

Hierbei ist $D = \left\{ l | l_\mu \in \frac{2\pi}{a'}\mathbb{Z}, -\frac{\pi}{a} < l_\mu \le \frac{\pi}{a} \right\}$. Die Fouriertransformierten lauten [22]:

$$\begin{aligned}
\tilde{u}(p) &= \frac{1}{\kappa} + \sum_{l \in D} \tilde{v}(p + l) | \prod_\mu \left(\frac{2}{a'(p_\mu + l_\mu)} \sin\left(\frac{(p_\mu + l_\mu)a}{2}\right)\right)|^2 \\
\tilde{\Gamma}_{ll'}(p) &= \delta_{ll'}\tilde{v}(p + l) - \tilde{\mathcal{A}}(p + l')\tilde{\mathcal{C}}(p + l)\tilde{v}(p + l) \\
\tilde{\mathcal{A}}(k) &= \tilde{v}(k) \prod_\mu \left(\frac{2}{a'(-k_\mu)} \sin\left(\frac{(-k_\mu)a}{2}\right)\right) \tilde{u}(p)^{-1}
\end{aligned}$$

11.2 Hochfrequente Propagatoren

Analog zu dem Verfahren der Renormierungsgruppentheorie spaltet man ein Element des Hilbertraumes auf in einen hochfrequenten Anteil $\tilde{v}^h$ und einen niederfrequenten $\tilde{v}^l$, dessen Blockmittel verschwindet. Wir gehen von den mithilfe exakter Interpolationskerne $\mathcal{A}$ konstruierten Projektionsoperatoren aus. $V^1 = \mathcal{C}v$ wird dort Blockspin genannt. Man schreibt:

$$v(z) = \tilde{v}^l(z) + \tilde{v}^h(z) \qquad \mathcal{C}\tilde{v}^h(z) = 0 \qquad \tilde{v}^l = \int_{x \in \Lambda^1} \mathcal{A}(z, x) V^1(x)$$

Wir erinnern uns an Abschnitt 2.5: Aus der Zustandssumme erhält man eine Definition der effektiven Wirkung [3] auf der nächsten Gitterebene, demzufolge

[3] Die Wirkung $S(\phi)$ ergibt sich aus der Lagrangefunktion $\mathcal{L}(\phi)$ nach: $S(\phi) = \int d^d z \mathcal{L}(\phi)$.

kann die effektive Wirkung $S^1(V^1)$ durch

$$\begin{aligned} e^{-S^1(V^1)} &= \int \mathcal{D}\tilde{v}^l e^{-S(v)} \prod_{x\in\Lambda^1} \delta(\mathcal{C}\tilde{v}^l(x) - V^1(x)) \\ &= \int \mathcal{D}\tilde{v}^h e^{-S(\mathcal{A}V^1+\tilde{v}^h)} \prod_{x\in\Lambda^1} \delta(\mathcal{C}\tilde{v}^h(x)) \end{aligned}$$

definiert werden, mit $\mathcal{D}v := \prod_{z\in\Lambda} dv(z)$ und dem Blockspin V^1. Es werden also die hochfrequenten Anteile ausintegriert. Die Deltafunktion sei proportional zum Limes einer Gaußkurve: $\delta(\mathcal{C}\tilde{v}^h) \propto lim_{\kappa\to\infty} e^{-\frac{1}{2}\langle\tilde{v}^h,\mathcal{C}^*\mathcal{C}\tilde{v}^h\rangle}$. Unter Betrachtung der Wirkung

$$\begin{aligned} S(v) &= S_{frei}(v) + \lambda V(v) \\ &= \frac{1}{2}\langle v, Lv\rangle + \lambda V(v) \end{aligned} \tag{71}$$

und der Formulierung des Gaußschen Maßes
$d\mu_\Gamma(\tilde{v}^h) \propto lim_{\kappa\to\infty} D\tilde{v}^h e^{-\frac{1}{2}\langle\tilde{v}^h,(L+\kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C})\tilde{v}^h\rangle}$, kann man auch schreiben:

$$\begin{aligned} e^{-S^1(V^1)} &= e^{\frac{1}{2}\langle\tilde{v}^l,L\tilde{v}^l\rangle} \int d\mu_\Gamma(\tilde{v}^h) e^{-\lambda V(v)} \\ &= e^{\frac{1}{2}\langle V^1,\tilde{L}^1V^1\rangle} \int d\mu_\Gamma(\tilde{v}^h) e^{-\lambda V(v)} \end{aligned} \tag{72}$$

Bemerkung: Die Wirkung (71) erinnert an die Definition des Kostenfunktionals (62) aus Abschnitt 9.1, $E(v) = \frac{1}{2}\langle v, Lv\rangle - \langle v, f\rangle$. Für $f = 0$ entspricht es der freien Wirkung. Das Kostenfunktional könnte bei einer passenden Wahl des Faktors λ aus dem Wechselwirkungsterm als Wirkung interpretiert werden. Man könnte auch die effektive Wirkung mit einem Faktor β versehen, βS. Betrachtet man anschließend den Limes $\beta \to \infty$, so erhält man einen Term, der auf dem Minimum des Kostenfunktionals konzentriert ist. Das Analogon zur effektiven Wirkung ist $\frac{1}{2}\langle V^1, \tilde{L}^1V^1\rangle$ für $f = 0$.

Da man in Gleichung (72) von exakten Interpolationskernen $\mathcal{A}$ ausging, ist auch die Orthogonalität des hoch- und niederfrequenten Raumes gewährleistet. Da als praktische Größe nun aber der Operator $\hat{L}^1 = \mathcal{I}^*L\mathcal{I}$ fungieren soll, formulieren wir Gleichung (72) zunächst gemäß:

$$\begin{aligned} e^{-S^1(V^1)} &= e^{\frac{1}{2}\langle V^1,\hat{L}^1-h^*\Gamma hV^1\rangle} \int d\mu_\Gamma(\tilde{v}^h) e^{-\lambda V(v)} \\ &= e^{\frac{1}{2}\langle V^1,\hat{L}^1V^1\rangle} e^{-\frac{1}{2}\langle V^1,h^*\Gamma hV^1\rangle} \int d\mu_\Gamma(v^h + \Gamma hV^1) e^{-\lambda V(v)}, \end{aligned}$$

mit $v = \tilde{v}^h + \mathcal{A}V^1 = v^h + \mathcal{I}V^1$. Die Ausintegration der hohen Frequenzen sorgt für das Auftreten von Graphen, wie sie beispielsweise in Abbildung 6 zu sehen

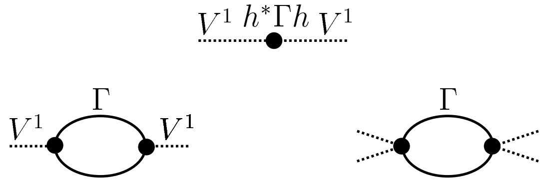


Abbildung 6: Beispiele von Graphen für ϕ^3 (rechts), bzw. ϕ^4 (links). V^1 seien die Blockspins.

sind.
Betrachtet man beispielsweise den hochfrequenten Propagator des Laplaceproblems $\Gamma = (-\Delta + \kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C})^{-1}$, so hat der Term $\kappa\mathcal{C}^*\mathcal{C}$ die Wirkung eines Massenterms, sodass der Hochfrequenzpropagator $\Gamma(z, z')$ exponentiellen Abfall mit dem Abstand $|z - z'|$ aufweist [17, 18]. Der Hochfrequenzpropagator operiert natürlich auf dem hochfrequenten Teilaum $\mathcal{V}_2$. Der in Abschnitt 7.2 konstruierte Mittelungsoperator wurde gerade so konstruiert, dass dies auch für den ungeordneten Fall gewährleistet ist. Desweiteren kann man o.B.d.A. annehmen, dass der Randbeitrag $h(z, x)$ unter der hochfrequenten Projektion $(I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}^*)$ erhalten bleibt: $h = (I - \mathcal{C}^*\mathcal{A}^*)h$. Wir betrachten nun wiederum die Gleichung des Korrekturterms

$$\tilde{L}^1_{xx'} = \hat{L}^1_{xx'} - \sum_{z,z'} h^*(x, z)\Gamma(z, z')h(z', x').$$

Der zweite Term $h^*\Gamma h$ stellt sich nun ebenfalls als Massenterm [4] dar, sofern man den Problemoperator auf der ersten Blockgitterebene mit $\hat{L}^1 = \mathcal{I}^*L\mathcal{I}$ identifiziert. Wie bereits erwähnt wollen wir die Wirkung mit mit einem Kostenfunktional identifizieren. In Analogie zur Quantenfeldtheorie sollte nun dieser Massenterm (im Ortsraum) durch einen zu $\delta_{xx'}$ proportionalen Term ersetzt werden, denn eine Konstante (δm^2) im Impulsraum transformiert sich im Ortsraum zu einem zu $\delta_{xx'}$ proportionalen Term. Wir betrachten Graphen zwischen x und x' und identifizieren diese als Selbstenergie $\Sigma_{xx'}$. Nun wollen wir diese durch eine lokale Selbstenergie $\Sigma_{lok}(x, x')$ approximieren:

$$\Sigma(x, x') \approx \delta m^2(x)\delta(x - x') = \Sigma_{lok}(x, x') \tag{73}$$

Diese Näherung werde nach der Taylorreihenentwicklung der Selbstenergie angenommen:

$$\Sigma(p^2) = \Sigma(m^2) + (p^2 - m^2)\Sigma''(m^2) + \Sigma'(p^2), \tag{74}$$

mit $\Sigma(m^2) = \delta m^2$. Es sei darauf hingewiesen, dass die Selbstenergie $\Sigma(x, x')$ aufgrund des exponentiellen Abfalls von Γ einen Abfall über dem Abstand $|x - x'|$

[4] Falls der Problemoperator L schon einen Massenterm enthält, handelt es sich um einen „zusätzlichen“ Massenterm.

aufweist. Aufgrund dessen kann man für über dieser Distanz praktisch konstante Funktionen f folgende Approximation annehmen:

$$\int_{x'} \Sigma(x,x')f(x') \approx \int_{x'} \Sigma(x,x')f(x) = f(x)\int_{x'} \Sigma(x,x')U(x',y) \tag{75}$$

Um die Eichinvarianz zu gewährleisten, muss ein Paralleltransporter $U(x',y)$ eingefügt werden, mit $U(x',y) \equiv 1$. Im ungeordneten Fall kann dies jedoch nicht einfach angenommen werden. Betrachtet man die den Gitterpunkten x und x' zugeordneten Vektorräume $\mathbb{V}_x$ und $\mathbb{V}_{x'}$, so ist die Selbstenergie natürlich eine Abbildung zwischen diesen: $\Sigma(x,x') : \mathbb{V}_{x'} \to \mathbb{V}_x$. Die Idee wäre es nun einen exakten Interpolationskern als Paralleltransporter zu benutzen. Ob dies eine gute Möglichkeit darstellt, bleibt allerdings zu verifizieren.

11.3 Anmerkung zur Wellenfunktionsrenormierung

Im Allgemeinen führt eine Taylorentwicklung entsprechend Gleichung (74) der Selbstenergie in Abhängigkeit des Impulses p zu einem quadratisch und einem logarithmisch divergenten Term $\Sigma''(m^2) \approx \frac{\partial^2}{\partial p^2}\Sigma(p^2)|_{p^2=m^2}$. (Die „lineare Divergenz" verschwindet aufgrund der Verletzung der Lorenzinvarianz.) Ansatzpunkt der Wellenfunktionsrenormierung ist die logarithmische Divergenz, die bei einigen Mehrgitterschritten allerdings vernachlässigt werden soll.

11.4 Konsequenzen der Massenrenormierung

Dennoch sei im Folgenden das Augenmerk auf die quadratische Divergenz gerichtet. Es wird erläutert, wie die Beiträge der Korrekturterme der einzelnen Schichten einen nicht zu vernachlässigenden Beitrag liefern.

11.4.1 Geordnete Systeme

Wir gehen von der Mehrgitterformulierung des Kapitels 10 aus, d.h. insbesondere von Gleichung (69).

$$L^{J-2}_{exakt} = \mathcal{A}^{J-2,J-1*}\mathcal{I}^{J-1,J*}L\mathcal{I}^{J,J-1}\mathcal{A}^{J-1,J-2} - \mathcal{A}^{J-2,J-1*}\underbrace{h^{J-1,J*}\Gamma^J h^{J,J-1}}_{\text{Korrekturterm } \Sigma^1}\mathcal{A}^{J-1,J-2} \tag{76}$$

Der wichtigste Korrekturterm entsteht bereits beim Übergang vom feinen auf das erste Blockgitter. Desweiteren ist der zweite Term auszuschreiben als:

$$\begin{aligned}
&\Sigma^2(y,y') \\
&= \int_{x,x'} \int_{z,z'} \mathcal{A}^{J-2,J-1*}(y,x) h^{J-1,J*}(x,z) \Gamma^J(z,z') h^{J,J-1}(z',x') \mathcal{A}^{J-1,J-2}(x',y') \\
&= \int_{x,x'} \mathcal{A}^{J-2,J-1*}(y,x) \Sigma^1(x,x') \mathcal{A}^{J-1,J-2}(x',y'),
\end{aligned} \tag{77}$$

mit $y, y' \in \Lambda^{J-2}$. Wir betrachten vorerst Systeme, die keine Unordnung aufweisen. Dort ist die Translationsinvarianz gewährleistet und wir können in die Fourierdarstellung übergehen. Dann kann der Interpolationskern $\mathcal{A}^{J-1,J-2}$ als praktisch konstant über dem Abstand $|x - x'|$ angenommen werden. Wir approximieren dementsprechend

$$h^{J-1,J*}(x,z)\Gamma^J(z,z')h^{J,J-1}(z',x') \approx [h^{J-1,J*}\Gamma^j h^{J,J-1}]_{lok}(x,x') \propto \delta(x-x').$$

Der Interpolationskern von der darauffolgenden Gitterschicht kann hier schon als Paralleltransporter verwendet werden. Es folgt daher im Falle der Betrachtung von Systemen ohne Unordnung:

$$(75) \equiv f(x) \int_{x'} \Sigma(x,x') \mathcal{A}^{J-1,J-2}(x',y)$$

Wir können den Term (77) dann auch folgendermaßen approximieren:

$$\begin{aligned}
(77) \quad &\approx \quad \int_{x,x'} \mathcal{A}^{J-2,J-1*}(y,x)[h^{J-1,J*}\Gamma^J h^{J,J-1}]_{lok}(x,x') \mathcal{A}^{J-1,J-2}(x',y') \\
&= \quad \int_x \mathcal{A}^{J-2,J-1*}(y,x) \delta m^2(x) \mathcal{A}^{J-1,J-2}(x,y'),
\end{aligned}$$

mit $\delta m^2(x) = \int_{x'} [h^*\Gamma h]_{lok}(x,x')$. Die Integration über x' stellt das Problem im ungeordneten Fall. Hier wird ein Paralleltransporter benötigt.

11.4.2 Ungeordnete Systeme

Wir betrachten nun also solche Fälle, in welchen die Translationsinvarianz nicht gewährleistet ist. Auch im ungeordneten Fall möchte man $\delta m^2(x)$ so bestimmen, dass man zumindest nach einer Faltung mit $\mathcal{A}^{J-2,J-1*}$ folgende Näherung annehmen kann

$$\int_{x'} \Sigma(x,x') \mathcal{A}^{J-1,J-2}(x',y) \approx \delta m^2(x) \mathcal{A}^{J-1,J-2}(x,y)$$

für $x \in [y]$ oder in der Nähe des Blocks $[y]$. Hier kann aber nicht jeder beliebige Interpolationskern, insbesondere nicht sofort derjenige zur nachfolgenden Gitterschicht, als Paralleltransporter fungieren. Zunächst geht man von einer Sequenz von Gittern $\Lambda^J, \ldots, \Lambda^1$, wobei Λ^1 die letzte Schicht ist. Im Idealfall besteht diese letzte Blockgitterschicht aus einem Punkt $y \in \Lambda^1$. Der exakte Interpolationskern $\mathcal{A}^{2,1}(x,y)$, $x \in \Lambda^2$, interpoliert von diesem einen Punkt y im Falle des echten Mehrgitters auf die darunterliegende Schicht, im Falle das Unigrid-Verfahrens auf das fundamentale Gitter ($\mathcal{A}^{J,1}(x,y)$, $x \in \Lambda^J$). In beiden Fällen, oder auch in solchen, in welchen von dem Einpunktgitter auf irgendeine beliebige Schicht interpoliert wird, kann man den exakten $\mathcal{A}$-Kern als Konstante auffassen. In diesem Fall ist natürlich die Lokalität gewährleistet. Wir können also diesen Interpolationskern als Paralleltransporter in das Integral über die Selbstenergie einfügen.

$$(75) \equiv f(x) \int_{x'} \Sigma(x,x')\mathcal{A}^{j,1}(x',y)$$

Zur Veranschaulichung nehme man drei Gitterschichten an. Gleichung (69) wird damit zu:

$$L^1_{exakt} = \mathcal{A}^{1,2*}\mathcal{I}^{2,3*}L\mathcal{I}^{3,2}\mathcal{A}^{2,1} - \mathcal{A}^{1,2*}h^{2,3*}\Gamma^3 h^{3,2}\mathcal{A}^{2,1}$$

Wir erachten den Interpolationskern $\mathcal{A}^{2,1}$ als praktisch konstant über dem Abstand $|x-x'|$ und können gemäß Approximation (75) folgende Näherung annehmen

$$\begin{aligned}
& \int_{x,x'} \mathcal{A}^{1,2*}(y,x)h^{2,3*}\Gamma^3 h^{3,2}(x,x')\mathcal{A}^{2,1}(x',y') \\
\approx & \int_{x,x'} \mathcal{A}^{1,2*}(y,x)(h^{2,3*}\Gamma^3 h^{3,2})_{lok}(x,x')\mathcal{A}^{2,1}(x',y') \\
= & \int_{x,x'} \mathcal{A}^{1,2*}(y,x)\delta m^2(x)\delta(x-x')\mathcal{A}^{2,1}(x',y') \\
= & \int_{x} \mathcal{A}^{1,2*}(y,x)\delta m^2(x)\mathcal{A}^{2,1}(x,y').
\end{aligned}$$

Wie wir noch sehen werden ist der Korrekturterm auf der ersten Blockgitterschicht der relevanteste und in der Regel ist die zweite Blockgitterschicht Λ^{J-2} auch nicht die letzte. In solchen Fällen ist die Frage nach der praktischen Bestimmung von δm^2 momentan noch nicht befriedigend zu beantworten.

11.5 Relevanz des Korrekturterms

In Kapitel 8.3 wurde der Korrekturterm $h^*\Gamma h$ bereits abgeschätzt:

$$\begin{aligned}
\int_{z,z'} h^{J-1,J*}(x,z)\Gamma^J(z,z')h^{J,J-1}(z',x') &\leq \tilde{k_1} L^{J-1}_{exakt}(x,x') \\
&\leq (1-\delta)\hat{L}^{J-1}(x,x')
\end{aligned}$$

Der Hochfrequenzpropagator der ersten Blockgitterschicht Λ^{J-1} lautet:

$$\Gamma^{J-1} = (L^{J-1}_{exakt} + \kappa \mathcal{C}^{J-1,J-2*}\mathcal{C}^{J-2,J-1})^{-1}$$

Für die Eigenmoden $\varphi^{J-1}_\alpha \in \mathcal{V}^{J-1}$, deren Blockmittel bei dem Übergang auf das Blockgitter Λ^{J-2} verschwindet, also $\varphi^{J-1}_\alpha \in \mathcal{V}^{J-1}_{\mathcal{C}^{J-2,J-1}}$, gilt

$$L^{J-1}_{exakt}\varphi^{J-1}_\alpha = (L^{J-1}_{exakt} + \kappa \mathcal{C}^{J-1,J-2*}\mathcal{C}^{J-2,J-1})\varphi^{J-1}_\alpha = \epsilon^{J-1}_\alpha \varphi^{J-1}_\alpha.$$

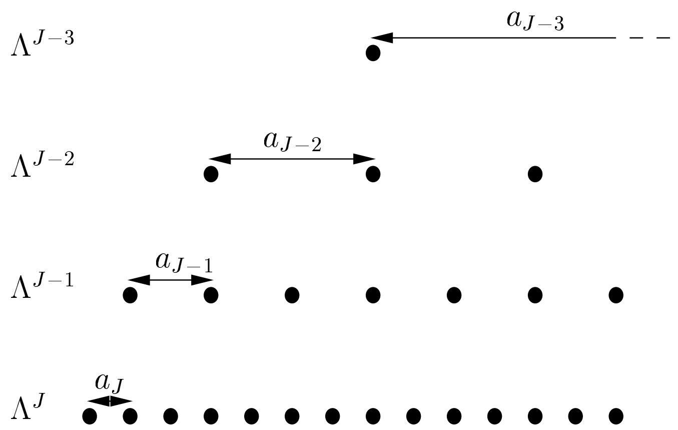
(Wir gehen von den Eigenmoden des Problemoperators, nicht von den verallgemeinerten der Iterationsmatrix aus.) Derjenige Eigenwert $\epsilon^{J-1}_{\alpha_{krit}} =: \varepsilon_{J-1}$, dessen zugehörige Eigenmode von $\mathcal{C}^{J-2,J-1}$ gerade nicht mehr auf das darauffolgende Blockgitter mitgenommen wird, kann als Energie-Cutoff der ersten Blockgitterschicht Λ^{J-1} interpretiert werden. Da durch die Mittelung nur langwellige Moden auf die nächste Schicht gelangen, bezeichnen wir diesen Energie-Cutoff als **Infrarot-Cutoff** ε_{J-1} des Gitters Λ^{J-1}.
Insbesondere ist der Infrarot-Cutoff ε_j einer Schicht Λ^j auf diese Weise gegeben, sofern eine Mittelung auf eine gröbere Schicht folgt. Findet keine weitere Mittelung auf einem Gitter Λ^1 statt, so ist der Infrarot-Cutoff dort durch den zur langwelligsten Mode des Problems auf diesem Gitter gehörigen Eigenwert ϵ^1_{min} gegeben.

Andererseits ist über die Größe der Gitterkonstanten schon ein **Ultraviolett-Cutoff** gegeben, ein natürlicher Energie-Cutoff, der höhere Frequenzen nicht berücksichtigt. Es sei der maximale Eigenwert des Problemoperators einer Schicht. Verwendet man zur Transformation auf eine gröbere Gitterschicht glatte Interpolationskerne, so entspricht der Infrarot-Cutoff einer Schicht Λ^j in etwa dem Ultraviolett-Cutoff des darüberliegenden Gitters Λ^{j-1}, wie es Abbildung 7 veranschaulicht. (Der hochfrequente Anteil zu dem Gitter Λ^j, der sich von dem niederfrequenten gerade bei ε_j „trennt", ist für das folgende Gitter Λ^{j-1} nicht zugänglich.)

Man betrachtet nun beispielsweise das Laplaceproblem $-\Delta u = f$ auf dem fundamentalen Gitter Λ^J der Gitterkonstanten a_J bestehend aus N Gitterpunkten. Dann lauten die Eigenwerte (für periodische Dirichlet-Randbedingungen) $\epsilon_\alpha = \frac{4}{(a_J)^2} sin^2 \frac{\alpha\pi a_J}{2N}$ und die zugehörigen Eigenmoden $\varphi_\alpha(z) = sin\frac{\alpha z \pi}{N}$. Im Zuge dessen nähert man nun den maximalen Eigenwert auf einem Gitter Λ^j mit dem Inversen der zugehörigen Blockgitterkonstante zum Quadrat.

Wir untersuchen in diesem Zusammenhang, wie sich der Korrekturterm der feineren Skalen auf die Problemoperatoren der gröberen auswirkt: Gleichung (76) kann noch weiter umgeformt werden. Man erhält schließlich

$$\begin{aligned} L^{J-2}_{exakt} &= \mathcal{I}^{J-2,J-1*}\mathcal{I}^{J-1,J*}L\mathcal{I}^{J,J-1}\mathcal{I}^{J-1,J-2} - h^{J-2,J-1*}\hat{\Gamma}^{J-1}h^{J-1,J-2} \\ &\quad -\mathcal{A}^{J-2,J-1*}h^{J-1,J*}\Gamma^J h^{J,J-1}\mathcal{A}^{J-1,J-2} \end{aligned}$$



IR: $= \varepsilon_{J-3} \approx a_{J-4}^{-2}$	UV: $\approx a_{J-3}^{-2}$
IR: $= \varepsilon_{J-2} \approx a_{J-3}^{-2}$	UV: $\approx a_{J-2}^{-2}$
IR: $= \varepsilon_{J-1} \approx a_{J-2}^{-2}$	UV: $\approx a_{J-1}^{-2}$
IR: $= \varepsilon_{J} \approx a_{J-1}^{-2}$	UV: $\approx a_{J}^{-2}$

Abbildung 7: Ultraviolett- und Infrarot-Cutoff. Der maximale Eigenwert der Problemgleichung auf dem Gitter Λ^j der Gitterkonstanten a_j entspricht ungefähr dem Inversen von a_j^2.

mit $\hat{\Gamma}^{J-1} = (\hat{L}^{J-1} + \kappa \mathcal{C}^{J-1,J-2*}\mathcal{C}^{J-2,J-1})^{-1}$. Ein weiterer Übergang auf die folgende Gitterschicht führt zu

$$\begin{aligned} L^{J-3}_{exakt} &= \mathcal{I}^{J-3,J-2*}\mathcal{I}^{J-2,J-1*}\mathcal{I}^{J-1,J*}L\mathcal{I}^{J,J-1}\mathcal{I}^{J-1,J-2}\mathcal{I}^{J-2,J-3} \\ &\quad -h^{J-3,J-2*}\hat{\Gamma}^{J-2}h^{J-2,J-3} \\ &\quad -\mathcal{A}^{J-3,J-2*}h^{J-2,J-1*}\hat{\Gamma}^{J-1}h^{J-1,J-2}\mathcal{A}^{J-2,J-3} \\ &\quad -\mathcal{A}^{J-3,J-2*}\mathcal{A}^{J-2,J-1*}h^{J-1,J*}\Gamma^J h^{J,J-1}\mathcal{A}^{J-1,J-2}\mathcal{A}^{J-2,J-3}, \end{aligned} \tag{78}$$

mit $\hat{\Gamma}^{J-2} = (\mathcal{I}^{J-2,J-1*}\hat{L}^{J-1}\mathcal{I}^{J-1,J-2} + \kappa \mathcal{C}^{J-2,J-3*}\mathcal{C}^{J-3,J-2})^{-1}$. Die Korrekturterme der feineren Gitterschicht müssen stets auf die gröberen Schichten mitgenommen werden. Der Korrekturterm der feinsten Schichten ist also insbesondere auf jeder gröberen Schicht vertreten. Auf der j-ten Blockgitterschicht bleibt ein Beitrag von der feinsten gemäß

$$\mathcal{A}^{J-j,J-j+1*}\cdots\mathcal{A}^{J-3,J-2*}\mathcal{A}^{J-2,J-1*}h^{J-1,J*}\Gamma^J h^{J,J-1}\mathcal{A}^{J-1,J-2}\mathcal{A}^{J-2,J-3}\cdots\mathcal{A}^{J-j+1,J-j}$$

Für Eigenwerte ϵ^J_α, die größer sind als der Infrarot-Cutoff des fundamentalen Gitters ε_J gilt

$$\epsilon^J_\alpha \varphi_\alpha \geq \varepsilon_J \varphi_\alpha = L\varphi_\alpha = (L + \kappa \mathcal{C}^*\mathcal{C})\varphi_\alpha.$$

Insbesondere gilt dies für den Ultraviolett-Cutoff. Für Eigenwerte deren zugehörige Eigenmode nicht im Kern des Mittelungsoperators $\mathcal{V}_\mathcal{C}$ liegen gilt

$$\varepsilon_J \varphi_\alpha < \epsilon^J_\alpha \varphi_\alpha = L\varphi_\alpha \leq (L + \kappa \mathcal{C}^*\mathcal{C})\varphi_\alpha.$$

Nähert man nun die Cutoffs, wie bereits erwähnt, durch die Inversen der zugehörigen Blockgitterkonstanten zum Quadrat, so ergibt sich qualitativ folgende Abschätzung des Fluktuationspropagators

$$\begin{aligned} & a_J^2 \le \Gamma^J \le a_{J-1}^2 \\ \text{oder} \quad & a_J^2 h^{J-1,J*} h^{J,J-1} \le h^{J-1,J*} \Gamma^J h^{J,J-1} \le a_{J-1}^2 h^{J-1,J*} h^{J,J-1}. \end{aligned} \tag{79}$$

Desweiteren hat $h^{J,J-1}$ die Dimension einer quadratischen Masse und ist damit proportional zu $\frac{1}{a_J^2}$. Üblicherweise sind die Gitter so konstruiert, dass die Gitterkonstanten (ganzzahlige) Vielfache der des fundamentalen Gitters sind: $a_j = s^{J-j} a_J$. Ein Fluktuationspropagator einer gröberen Gitterschicht bewegt sich ebenso innerhalb der zugehörigen Cutoffs. Wir schreiben

$$\begin{aligned} & a_j^2 \le \Gamma^j \le a_{j-1}^2 \\ \text{oder} \quad & a_j^2 h^{j-1,j*} h^{j,j-1} \le h^{j-1,j*} \Gamma^j h^{j,j-1} \le a_{j-1}^2 h^{j-1,j*} h^{j,j-1}, \end{aligned} \tag{80}$$

mit $h^{j,j-1} \propto \frac{1}{a_j^2}$. In Gleichung (78) wurde, abgesehen von dem Fluktuationspropagator des fundamentalen Gitters, schon derjenige, der sich mithilfe des trunkierten Blockoperators $\hat{L}^J$ ergibt, in den Korrekturtermen verwendet,

$$\hat{\Gamma}^j = (\mathcal{I}^{j,j+1*} \cdots \mathcal{I}^{J-2,J-1*} \mathcal{I}^{J-1,J*} L \mathcal{I}^{J,J-1} \mathcal{I}^{J-1,J-2} \cdots \mathcal{I}^{j+1,j} + \kappa \mathcal{C}^{j+1,j*} \mathcal{C}^{j,j+1})^{-1}.$$

Per Induktion kann man zeigen, dass

$$\hat{\Gamma}^j \le \Gamma^j = (L^j_{exakt} + \kappa \mathcal{C}^{j,j-1*} \mathcal{C}^{j-1,j})^{-1}.$$

Auf den gröberen Gitterschichten geht der Fehler, der durch die Verwendung des trunkierten Blockoperators zur Bestimmung des Fluktuationpropagators $\hat{\Gamma}^j$ schon nicht mehr ein. Trotzallem sei dieser Propagator nach Abschätzung (80) ein Operator der Größenordnung $\mathcal{O}(a_j^2) = \mathcal{O}((s^{J-j})^2 a_J^2)$.
Für den effektiven Problemoperator L^{J-j} der j-ten Blockgitterschicht Λ^{J-j} ist die zugehörige Gitterkonstante a_{J-j} die natürliche Längenskala. Wir vergleichen nun den Korrekturterm des fundamentalen Gitters mit dem eines gröberen Blockgitters Λ^{J-i} in dieser Längeneinheit. Es ist

$$h^{J-1,J*} \Gamma^J h^{J,J-1} \propto \frac{1}{a_{J-j}^2} (s^j)^2 a_J^2 \frac{1}{a_{J-j}^2} (s^j)^2 = \frac{1}{a_{J-j}^2} (s^j)^2,$$

mit $a_{J-i} = s^i a_j$. Im Gegensatz hierzu ist der Korrekturterm des i-ten Gitters der Größenordnung

$$h^{J-i-1,J-i*} \Gamma^{J-i} h^{J-i,J-i-1} \propto \frac{1}{a_{J-i}^2} a_{J-i}^2 \frac{1}{a_{J-i}^2} = \frac{1}{a_{J-j}^2} \frac{(s^j)^2}{(s^i)^2}.$$

Hieraus folgt für $1 \ll i < j$

$$h^{J-i-1,J-i*} \Gamma^{J-i} h^{J-i,J-i-1} \ll h^{J-1,J*} \Gamma^J h^{J,J-1}.$$

Der Korrekturterm der bei dem Übergang von dem fundamentalen Gitter auf das erste Blockgitter entsteht liefert also schon den größten Beitrag. Korrekturterme werden in Einheiten der Blockgitterkonstanten auf gröberen Gittern immer größer. Wir sprechen von einem **relevanten Operator**. Werden nun bei der Implementierung des Mehrgitteralgorithmus die praktischen Interpolationskerne verwendet und dementsprechend auch abgespeichert, so muss der Massenterm des Problemoperators in jedem Fall mithilfe des Korrekturterms renormiert werden.

12 Zusammenfassende Schlussbemerkung

In dieser Arbeit wurden Mehrgitterverfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme untersucht. Ähnlich werden sie zur Lösung diskretisierter elliptischer partieller Differenzialgleichungen angewendet. Ziel war es, ein Verfahren zu entwickeln, das keine Translationsinvarianz voraussetzt und daher auch im Ungeordneten Fall anzuwenden ist. In diesem Zusammenhang wurde bereits das algebraische Mehrgitter und das ISU-Verfahren (Iteravely Smoothing Unigrid) von M. Bäker [6] entwickelt. Das algebraische Mehrgitter ist allerdings nur auf skalare Gleichungen anzuwenden, überdies werden Forderungen an die Vorzeichen der Einträge (der Großteil dieser sollte ohnehin null sein) der positiv definiten Problemmatrix gestellt. Die Konvergenz des ISU-Verfahrens wurde für bestimmte Modelle nur numerisch untersucht.
Der Fall des Zweigitters wurde ausführlich untersucht. Das Hauptproblem konzentriert sich hierbei auf die Konstruktion geeigneter Restriktionsoperatoren $\mathcal{C}$, die den Übergang von einem feinen Gitter auf ein grobes vollziehen, und geeigneter Interpolationsoperatoren $\mathcal{I}$ für den Übergang zum feinen Gitter. Diese Operatoren können im translationsinvarianten Fall a priori angegeben werden. Für den ungeordneten Fall werden sie allerdings problemabhängig, insbesondere in Hinblick auf festkörperphysikalische Fälle der Unordnung. Erwähnt sei hierbei das Auftreten von Anderson-Lokalisation beispielsweise in amorphen Halbleitern (vgl. [6, 9]).
Ein kanonische Konstruktion des Mittelungsoperators $\mathcal{C}$ wurde in Kapitel 7 vorgestellt, welche die Forderung erfüllt, dass der Problemoperator L auf dem Unterraum $\mathcal{V}_\mathcal{C}$ verglichen mit dem ganzen Raum eine nicht zu kleine untere Schranke aufweist. Für gegebenes $\mathcal{C}$ lässt sich in kanonische Weise ein Interpolationsoperator $\mathcal{A}$ ermitteln. Er wurde in dieser Arbeit als exakter Interpolationsoperator bezeichnet und nach dem Formalismus von Gawedzki und Kupiainen [17] bestimmt. Die Kerne solcher exakten Operatoren haben allerdings keinen kompakten Träger und sind somit für praktische Anwendungen nicht brauchbar. Im Zuge dessen wurden praktische Interpolationsoperatoren auf kompaktem Träger betrachtet, die der gleichen Normierungsbedingung wie die exakten, $\mathcal{C}\mathcal{I} = \mathcal{C}\mathcal{A}$, gehorchen. Der Zusammenhang zwischen den exakten und praktischen Interpolationskernen kann über die Betrachtung der Randbedingungen hergeleitet werden: Man kann den praktischen Kern wie einen exakten für Problemoperatoren mit Dirichlet-Randbedingungen interpretieren. Exakte und praktische Kerne unterscheiden sich in der vorgestellten Formulierung gerade um das Produkt des Hochfrequenzpropagators Γ mit einem sogenannten Randterm h, den man unter bestimmten Voraussetzungen auch nach $L\mathcal{I} - L\mathcal{A}$ ansetzten kann. Eine weitere Möglichkeit ist eine Identifikation des Randterms mit der normalen Ableitung am Rand des praktischen Kerns: $h = \nabla^{\partial\Omega}\mathcal{I}$. Desweiteren wurde für praktische Kerne ein Maß δ für ihre Güte angegeben, vgl. Kap. 8.2.
Schließlich wurde die Konvergenz eines Iterationsverfahren, dass mittels dieser Restriktionsoperatoren und den praktischen, sowie den exakten Interpolations-

kernen konstruiert wurde, untersucht. Es handelte sich hierbei um ein Unterraumkorrekturverfahren nach der Methode von Xu [1]. Die Abschätzung für die Konvergenzrate bei einer Verwendung der praktischen Kerne ist abhängig von der Güte δ, der unteren Schranke des Problemoperators L auf $\mathcal{V}_{\mathcal{C}}$, sowie der oberen und unteren Schranke an den Problemoperator L. Hierbei kann man o.B.d.A. annehmen, dass der Diagonalteil D des Problemoperators L I ist, andernfalls ist L durch $D^{-1}L$ zu ersetzten. Die Berechnungen zur Minimierung des Kostenfunktionals aus Kapitel 9 könnten als „optimales“ approximatives Inverses in eine Konvergenzabschätzung einfließen.
Ein Zweigitterverfahren kann die Rechenzeit schon beachtlich verkürzen. Bei der Simulation von Gitterfeldtheorien mit dynamischen Fermionen könnte beispielsweise für die Lösung der Diracgleichung in äußeren Eichfeldern – bei geeigneter Wahl der Blockgitterkonstanten – eine kleinere Quarkmasse zugelassen werden. Ein Mehrgitterverfahren sollte die kritische Verlangsamung vollständig eliminieren. Allerdings treten in dem in dieser Arbeit vorgestellten Modell andere Probleme auf, die noch nicht ganz gelöst sind.
Die unterschiedliche Betrachtung der Kerne führte bezüglich der Problemoperatoren auf der Blockgitterebene zu einem Korrektur- oder Störterm, der mit sinkender Güte δ zunimmt. Es handelt sich hierbei um einen relevanten Operator. Er wird in natürlichen Einheiten der Längenskala der Blockgitter immer größer, wenn man mittels Blockspintransformation von einem feinen auf ein grobes Gitter iteriert. Es ist also offensichtlich notwendig diesen Störterm durch eine Massenrenormierung zumindest teilweise zu kompensieren. Strategien hierzu wurden diskutiert, Ein praktisches Verfahren ist allerdings bislang noch nicht gefunden.

Literatur

[1] J. Xu: Iterative Methods by Space Decomposition and Subspace Correction, SIAM Review Vol. 34, No 4, pp. 581-613, December 1992

[2] M. Griebel: Multilevelmethoden als Iterationsverfahren über Erzeugendensystemen, Teubner, Stuttgart 1994

[3] W. Hackbusch: Multigrid Methods and Applications, Springer Series in Computational Mathematics 4, 1985

[4] W. Hackbusch: Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme, Teubner, Stuttgart 1993

[5] A. Brandt, Dorit Ron: Recovery of Renormalized Hamiltonians and Coarse-to-Fine Monte-Carlo Acceleration, Gauss Center Report **WI/GC-11**, Juni 1999 (J. Stat. Phys., to appear)

[6] M. Bäker: Ein Mehrgitterverfahren für ungeordnete Systeme, Diplomarbeit, Hamburg 1993

[7] Thomas Kalkreuter: Multigrid Methods for Propagators in Lattice Gauge Theories, **hep-lat/9409008**, September 1994

[8] M. Bäker: Lokalisation in Lattice Gauge Theory and a New Multigrid Method, hep-lat/9405005, Hamburg 1994

[9] P. W. Anderson: Phys. Rev. 109, 1958

[10] M. Meier-Schellersheim: GRISU, ein adaptives Mehrgitterverfahren, Diplomarbeit, Hamburg 1996

[11] G.Mack: Pushing Einsteins principles to the extreme, in: G. 't Hooft et al, Quantum Fields and Quantum Space Time, Plenum Press, NATO-ASI series B: Physics vol. 364, New York 1997

[12] G. Mack: Universal Dynamics, a Unified Theory of Complex Systems. Emergence, Life and Death (dedicated to the memory of Harry Lehmann), Hamburg 2000 (to be published in Commun. Math. Phys.)

[13] G. Kneer, A. Nassehi: Niklas Lumanns Theorie sozialer Systeme, 3. Auflage, Wilhelm Fink Verlag, München 1997

[14] M. de Riese: Polar Decomposition in General Complex Systems and Distinction of Gauge, Higgs and Vierbein Fields, Diplomarbeit (in Vorbereitung), Hamburg 2000

[15] T.-P. Cheng, L.-F. Li: Gauge theory of elementary particle physics, Oxford University Press, New York 1984

[16] I. Montvay, G. Münster: Quantum fields in a lattice Cambridge, University Press, Cambridge 1994

[17] K. Gawedzki, A. Kupiainen: A Rigorous Block Spin Approach to Massless Lattice Theories, Common. Math. Phys. **77**, 31-64, 1980

[18] K. Gawedzki, A. Kupiainen: Massless Lattice ϕ_4^4 Theory: Rigorous Control of a Renormalizable Asymptotically Free Model, Common. Math. Phys. **99**, 197-252, 1985

[19] M. Grießl, G. Mack, Y. Xylander, G. Palma: Self-consistent calculation of real space renormaliation group flows and effective potentials, Nucl. Phys. **B477** , 878-924, 1996

[20] J. Würthner: Aspekte des Renormierungsgruppenflusses des Sine-Gordon Modells, Diplomarbeit, Hamburg 1997

[21] M. Grießl, J. Würthner: Softwarepackage for calculation of RG interpolation kernels and high frequency propagators, http://lienhard.desy.de/mackag/cs/RG_KGkernels

[22] M. Bartels, G. Mack, G. Palma: Analytic Calculation of the 1-loop effective action for the $\mathcal{O}(\mathcal{N}+1)$-symmetric 2-dimensional nonlinear σ-model, Hamburg 1999

[23] T. Prüstel: Effektive Feldtheorien in Reeller Zeit, Diplomarbeit, Hamburg 2000

[24] G. Mack: Vortrag im Rahmen des internen Arbeitsgruppentreffens vom 14. März 2000 (Ideen zur Blockspinkontruktion)

Danksagung

Mein größter Dank gilt Herrn Prof. Dr. Mack für die interssante Aufgabenstellung und die intensive, lehrreiche und überaus freundliche Betreuung dieser Arbeit und darüber hinaus. Die Zusammenarbeit mit ihm hat mir sehr viel Freude bereitet, ebenso wie die Tatsache, dass er sich für jegliche Fragen immer Zeit nahm.
Herrn Prof. Dr. Fredenhagen danke ich für die Erstellung des Zweitgutachtens.

Desweiteren möchte ich mich bei einigen Mitgliedern des II. Theoretischen Instituts, sowie des DESY, insbesondere natürlich bei meiner Arbeitsgruppe bedanken: Mathias de Riese, Jan Würthner, Martin Meier-Schellersheim, Michael Bartels, Dirk Rathje, Thorsten Kosler und Thorsten Prüstel unterstützten diese Arbeit nicht nur durch zahlreiche Diskussionen. (Mathias, Michael und Schelli ermutigten mich in vielen Phasen der Verzweifelung.) Michael Spira und Hinnerk Albert danke ich für die hilfreichen „Fragestunden“. Auch Kai-Peer Diener und Stefan Berge sorgten dafür, dass die Stunden am DESY nie langweilig wurden.

Dank möchte ich an dieser Stelle auch meinen Freunden bekunden, insbesondere Anamarija Ćurković für einige Ratschläge aus nichtphysikalischer Sichtweise, Tina Strauch danke ich dafür, dass sie jederzeit für mich da ist. Philipp Hochmair danke ich für das Verständnis, dass er mir entgegen gebracht hat und für vieles mehr.

Ich bedanke mich ganz besonders bei meiner Mutter Ursula Lehmann und meinem Vater Klaus Lehmann für die Unterstützung, die ich in jeder erdenklichen Hinsicht von ihnen erhalten habe und dafür, dass sie mir nicht nur Eltern sondern Freunde sind.