Kompaktkurs

Iterative Gleichungssystemlöser und parallele Algorithmen

Universität Hamburg,

19. - 23. Februar 2001

Andreas Meister

Fachbereich Mathematik

Schwerpunkt Differentialgleichungen und Dynamische Systeme

Universität Hamburg

- Splitting-Methoden
  - Jacobi- u. Gauss-Seidel-Verfahren
  - Relaxationsverfahren

- Verfahren für symmetrische, positiv definite Matritzen
  - Verfahren des steilsten Abstiegs
  - Verfahren der konjugierten Richtungen
  - CG-Verfahren

Grundlagen der linearen Algebra und klassischer Iterationsverf.

- Problemstellung

  Geg: $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ regulär, $b \in \mathbb{C}^n$
  Ges: $x \in \mathbb{C}^n$ mit $Ax = b$

- Grundidee der Splitting-Methoden

  - Ein triviales Verfahren

- Konsistenz, Konvergenz und Konvergenzrate

- Spezielle Splitting-Methoden

  - Jacobi-Verfahren

  - Gauss-Seidel-Verfahren

  - Relaxationsverfahren

    * SOR-Verfahren

Grundidee der Splitting-Verfahren

Iterationsverfahren:

Wähle $x_0 \in \mathbb{C}^n$ beliebig und ermittle sukzessive Näherungen $x_m \in \mathbb{C}^n$ an $x^\star = A^{-1}b$ mittels

$$x_{m+1} = \phi(x_m, b), \quad m = 0, 1, \ldots \,.$$

Das Verfahren heißt linear, falls Matrizen $M, N \in \mathbb{C}^n$ mit

$$\phi(x, b) = Mx + Nb$$

existieren.
M heißt Iterationsmatrix

Vorgehensweise:

Zerlege $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ durch $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ (regulär) gemäß:

$$A = B + (A - B)$$

Damit folgt:

$$\begin{array}{rrcl} & Ax & = & b \\ \Longleftrightarrow & Bx + (A-B)x & = & b \\ \Longleftrightarrow & Bx & = & (B-A)x + b \\ \Longleftrightarrow & x & = & B^{-1}(B-A)x + B^{-1}b \end{array}$$

Splitting-Methode

Wähle $x_0 \in \mathbb{C}^n$ beliebig und iteriere

$$x_{m+1} = B^{-1}(B - A)x_m + B^{-1}b, \quad m = 0, 1, \ldots .$$

Damit folgt:

$$x_{m+1} = \phi(x_m, b) = Mx_m + Nb$$

mit

$$\begin{aligned} M &:= B^{-1}(B - A) \\ N &:= B^{-1} \end{aligned}$$

Somit gilt:

Jede Splitting-Methode ist linear.

Gewünschte Eigenschaft von B:

- Gute Näherung an A (schnelle Konvergenz)
  - Beispiel: $B = A$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow x_1 &= B^{-1}(B - A)x_0 + B^{-1}b \\ &= B^{-1}b \\ &= A^{-1}b \end{aligned}$$

- Einfache Invertierung (Praktikabilität)
- Geringe Voraussetzung an A (Nutzbarkeit)

Ein triviales Verfahren

- Wähle $B = I$

$$\begin{array}{rcl} \Longrightarrow \quad M & = & I^{-1}(I-A) = I - A \\ N & = & I \\ \Longrightarrow \quad x_{m+1} & = & (I-A)x_m + b \end{array}$$

"+ "	:	Keine Voraussetzung an A
"+ "	:	Einfach invertierbar
"- "	:	schlechte Näherung an A

Modellbeispiel:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 0.7 & -0.4 \\ -0.2 & 0.5 \end{pmatrix}}_{A:=} \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}}_{x:=} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.3 \end{pmatrix}}_{b:=}$$

- A ist invertierbar (det$A = 0.27$)
- $x^\star = A^{-1}b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

Triviales Verfahren				
m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$\varepsilon_m := \|x_m - x^*\|_\infty$	$\varepsilon_m/\varepsilon_{m-1}$
0	2.100000e+01	-1.900000e+01	2.000000e+01	
1	-1.000000e+00	-5.000000e+00	6.000000e+00	3.000000e-01
2	-2.000000e+00	-2.400000e+00	3.400000e+00	5.666667e-01
3	-1.260000e+00	-1.300000e+00	2.300000e+00	6.764706e-01
4	-5.980000e-01	-6.020000e-01	1.602000e+00	6.965217e-01
5	-1.202000e-01	-1.206000e-01	1.120600e+00	6.995006e-01
6	2.157000e-01	2.156600e-01	7.843400e-01	6.999286e-01
7	4.509740e-01	4.509700e-01	5.490300e-01	6.999898e-01
8	6.156802e-01	6.156798e-01	3.843202e-01	6.999985e-01
9	7.309760e-01	7.309759e-01	2.690241e-01	6.999998e-01
10	8.116832e-01	8.116832e-01	1.883168e-01	7.000000e-01
11	8.681782e-01	8.681782e-01	1.318218e-01	7.000000e-01
12	9.077248e-01	9.077248e-01	9.227525e-02	7.000000e-01
13	9.354073e-01	9.354073e-01	6.459267e-02	7.000000e-01
14	9.547851e-01	9.547851e-01	4.521487e-02	7.000000e-01
15	9.683496e-01	9.683496e-01	3.165041e-02	7.000000e-01
20	9.946805e-01	9.946805e-01	5.319484e-03	7.000000e-01
25	9.991060e-01	9.991060e-01	8.940457e-04	7.000000e-01
30	9.998497e-01	9.998497e-01	1.502623e-04	7.000000e-01
40	9.999958e-01	9.999958e-01	4.244537e-06	7.000000e-01
55	1.000000e-00	1.000000e-00	2.015120e-08	7.000000e-01
70	1.000000e-00	1.000000e-00	9.566903e-11	7.000002e-01
85	1.000000e-00	1.000000e-00	4.540812e-13	6.998631e-01
96	1.000000e-00	1.000000e-00	8.881784e-15	6.956522e-01

Ein triviales Verfahren

- Wähle $B = I$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \quad M &= I^{-1}(I-A) = I - A \\ N &= I \\ \Longrightarrow \quad x_{m+1} &= (I-A)x_m + b \end{aligned}$$

"+"	:	Keine Voraussetzung an A
"+"	:	Einfach invertierbar
"-"	:	schlechte Näherung an A

Modellbeispiel:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 0.7 & -0.4 \\ -0.2 & 0.5 \end{pmatrix}}_{A:=} \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}}_{x:=} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.3 \end{pmatrix}}_{b:=}$$

- A ist invertierbar $\qquad (\det A = 0.27)$
- $x^\star = A^{-1}b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
- Spektralradius der Iterationsmatrix:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\rho(M)}} &= \rho(I-A) \\ &= \rho\begin{pmatrix} 0.3 & 0.4 \\ 0.2 & 0.5 \end{pmatrix} = \underline{\underline{0.7}} \end{aligned}$$

Konsistenz, Konvergenz und Konvergenzrate

Ziel: Beantwortung der Fragen

1. Wann konvergiert eine Splitting-Methode?

2. Wovon hängt die Konvergenzgeschw. ab?

Konsistenz:

Ein Iterationsverfahren $x_{m+1} = \phi(x_m, b)$ heißt konsistent zum Gleichungssystem $Ax = b$, wenn für alle $b \in \mathbb{C}^n$ die Lösung $x^\star = A^{-1}b$ einen Fixpunkt von ϕ darstellen, d.h.

$$x^\star = \phi(x^\star, b)$$

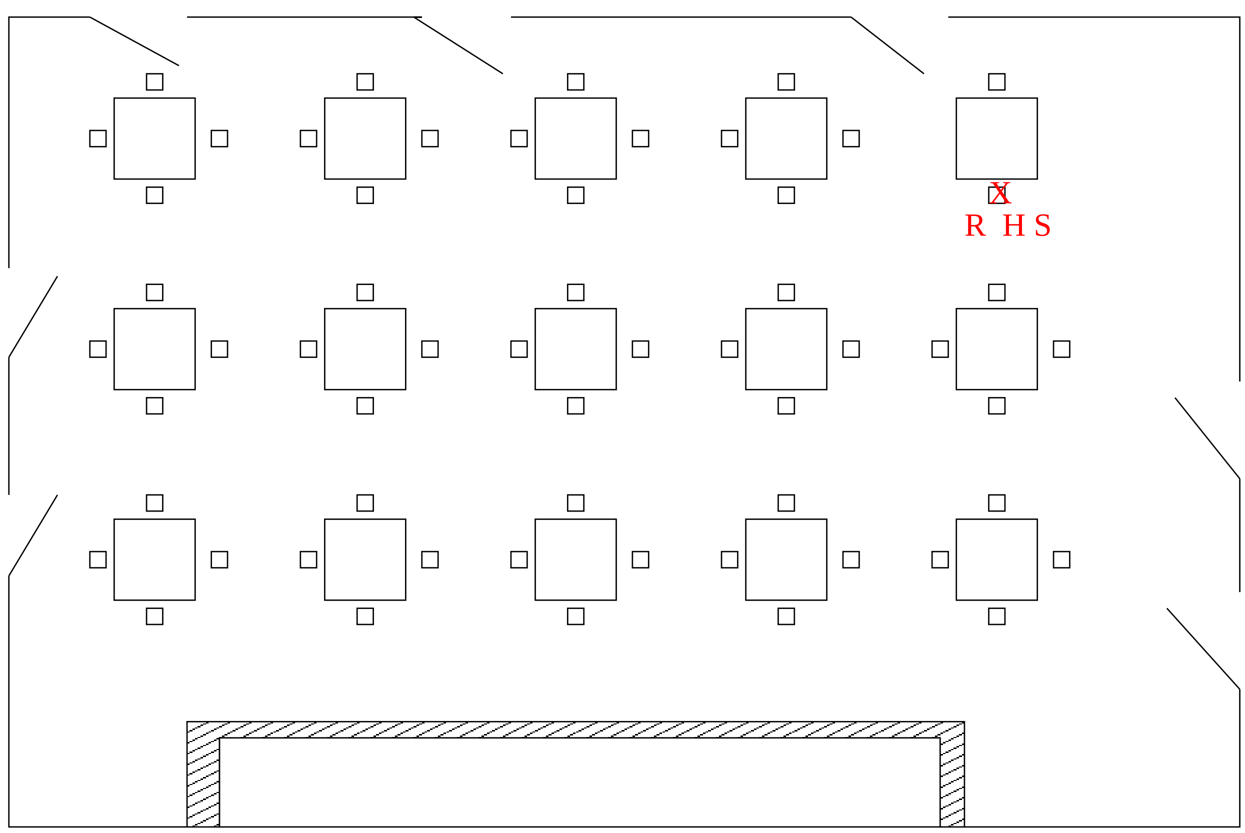
gilt.

Konsistenz besagt

Liefert das Iterationsverf. $x_m = A^{-1}b$,
dann gilt $x_k = A^{-1}b$ für alle $k \geq m$.

Das wahre Leben und die Mathematik

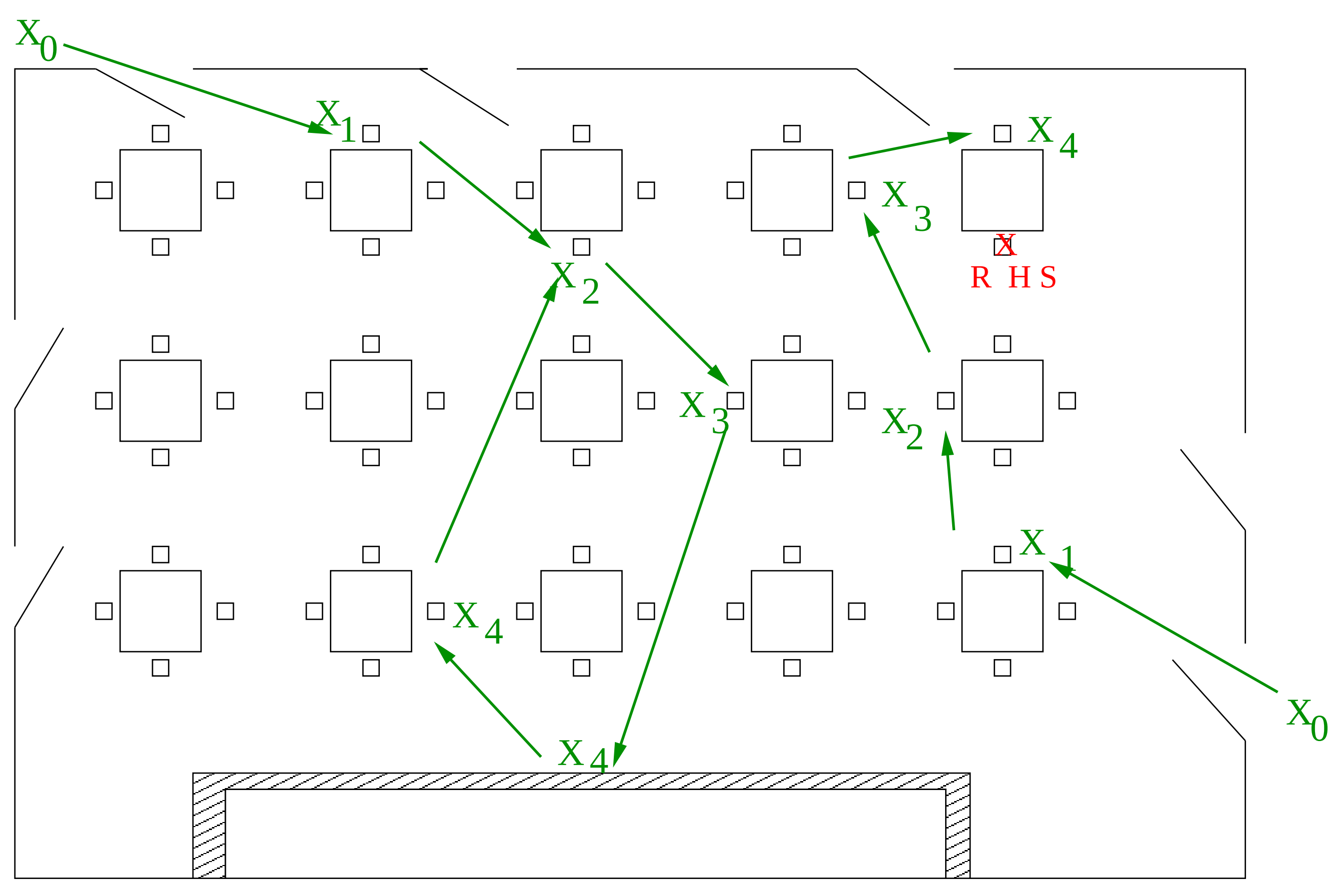
Teil I: Die Cafeteria



Das wahre Leben und die Mathematik

Teil I: Die Cafeteria

Konsistenz:



Konvergenz:

Ein Iterationsverfahren $x_{m+1} = \phi(x_m, b)$ heißt konvergent, wenn für alle $b \in \mathbb{C}^n$ und alle Startwerte $x_0 \in \mathbb{C}^n$ ein vom Startwert unabhängiger Grenzwert

$$x = \lim_{m\to\infty} x_m = \lim_{m\to\infty} \phi(x_m, b)$$

existiert.

$\boxed{\text{Konvergenz besagt: Das Verfahren hat ein eindeutiges Ziel.}}$

Wir erhalten:

Für ein konsistentes und konvergentes Iterationsverfahren $x_{m+1} = \phi(x_m, b)$ gilt

$$x^\star = A^{-1}b = \lim_{m\to\infty} \phi(x_m, b)$$

für alle $x_0 \in \mathbb{C}^n$.

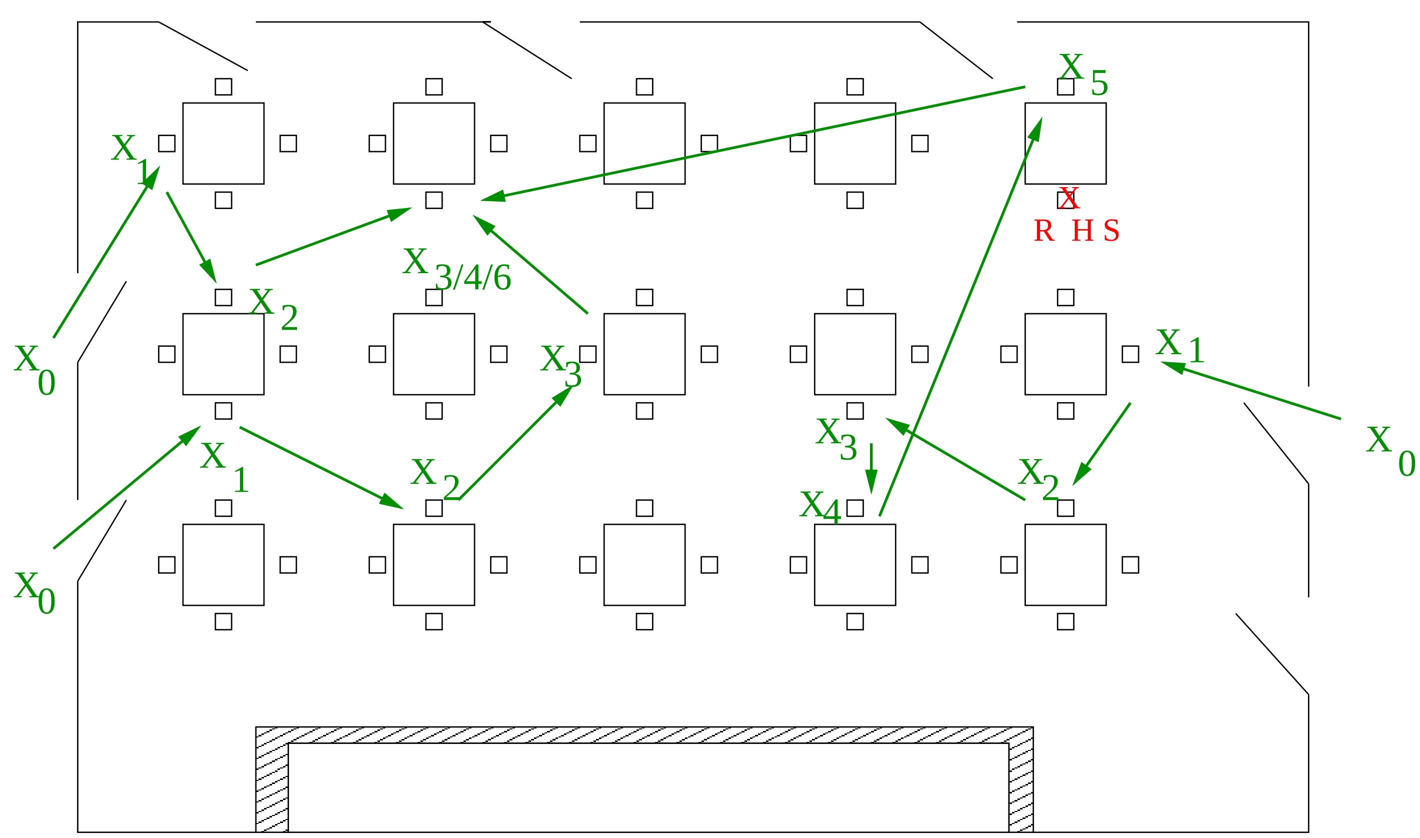
Begründung:

- Konvergenz
  - $x = \lim_{m\to\infty} x_m$ ist ein Fixpunkt.
  - Es gibt genau einen Fixpunkt.
- Konsistenz
  - $x^\star = A^{-1}b$ ist ein Fixpunkt.

Das wahre Leben und die Mathematik

Teil I: Die Cafeteria

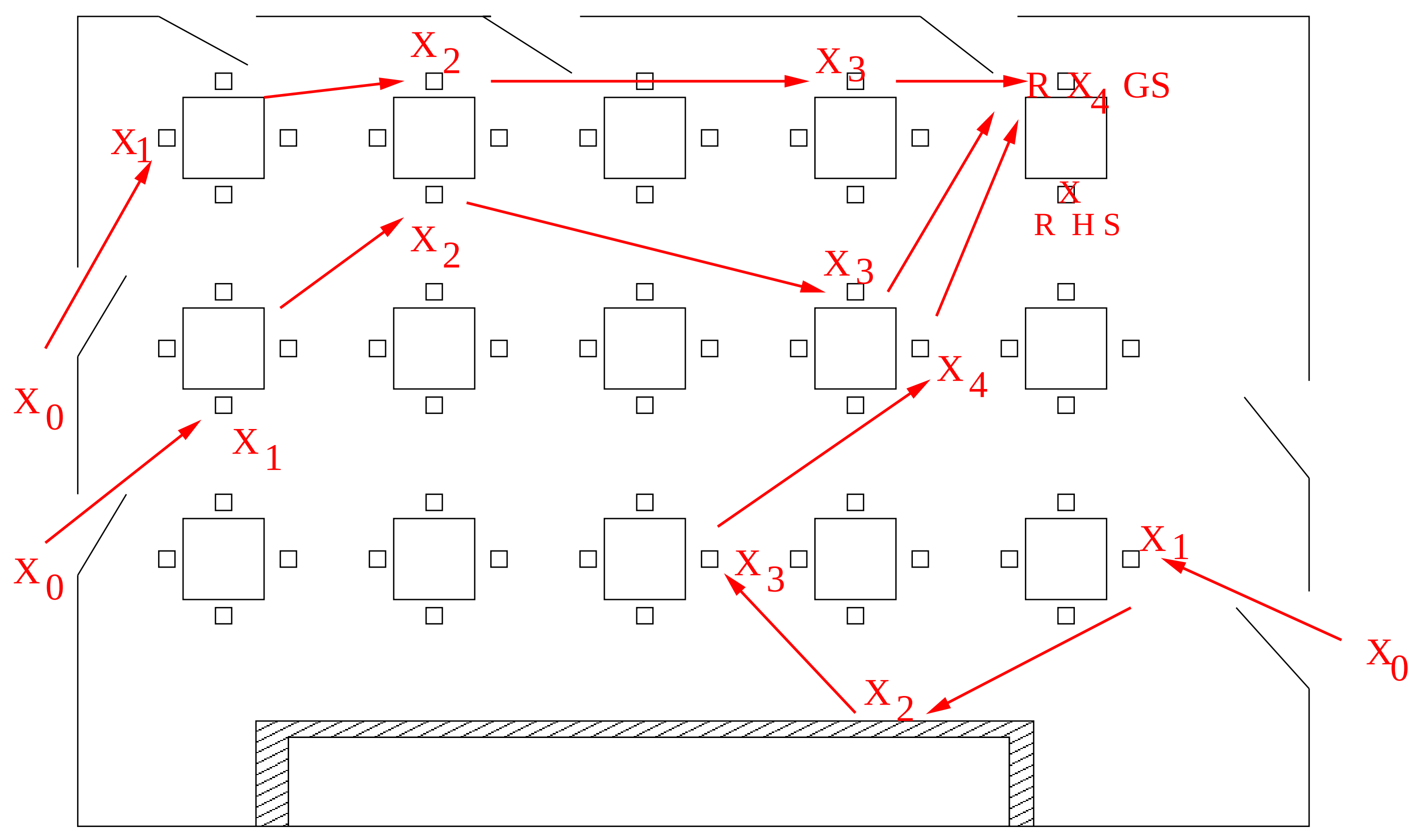
Konvergenz:



Das wahre Leben und die Mathematik

Teil I: Die Cafeteria

Konsistenz und Konvergenz:



Wann ist ein lineares Verfahren konsistent?

Ein lineares Iterationsverfahren ist genau dann konsistent, wenn

$$M = I - NA$$

gilt.

Begründung:

$x^\star = A^{-1}b$

$"\Longleftarrow"$ Gelte $M = I - NA$, dann folgt

$$\begin{aligned} x^\star &= Mx^\star + N\underbrace{Ax^\star}_{=b} = Mx^\star + Nb \\ &= \phi(x^\star, b). \end{aligned}$$

$"\Longrightarrow"$ ϕ sei konsistent, dann folgt

$$\begin{aligned} x^\star &= \phi(x^\star, b) = Mx^\star + Nb \\ \overset{b=Ax^\star}{\Longrightarrow} &= M = I - NA. \end{aligned}$$

Splitting-Methoden liefern:

$$M = B^{-1}(B - A) = I - B^{-1}A = I - NA$$

Somit gilt:

Jede Splitting-Methode ist linear und konsistent.

Wann konvergiert eine Splitting-Methode ?

Der Banachsche Fixpunktsatz:

Sei D eine vollständige Teilmenge eines normierten Raumes X und $f : D \longrightarrow D$ eine kontrahierender Operator, dann konvergiert die durch

$$x_{m+1} = f(x_m) \quad , m = 0, 1, \ldots$$

gegebene Folge für jeden Startwert $x_0 \in D$ gegen den eindeutig bestimten Fixpunkt $x = f(x) \in D$ von f. Es gelten die Fehlerabschätzungen

a priori: $\|x_m - x\| \leq \frac{q^m}{1-q} \|x_1 - x_0\|$

a posteriori: $\|x_m - x\| \leq \frac{q}{1-q} \|x_m - x_{m-1}\|$

wobei $q < 1$ die Kontraktionszahl des Operators darstellt.

Kontrahierend bedeutet:

Für alle x, y gilt

$$\|f(x) - f(y)\| \leq q\|x - y\| \qquad \text{mit} \quad 0 < q < 1.$$

Beispiel:

Gesucht: $x \in D = [0,1]$ mit $x = \cos x$.

$\Longrightarrow$ Wir suchen einen Fixpunkt von

$$f(x) = \cos x \quad \text{in} \quad [0,1]$$

Eigenschaften:

1. $f : [0,1] \longrightarrow [0,1]$
2. $[0,1]$ vollständig in $\mathbb{R}$ bezgl. $|x|$.
3. $f'(x) = -\sin x$

   $\Longrightarrow q := \max_{x\in[0,1]} |f'(x)| < 1$

   $\Longrightarrow |f(x) - f(y)| \leq q \cdot |x - y| \quad \text{mit} \quad q < 1$

$\longrightarrow$ $x_{n+1} = f(x_n)$ konvergiert für alle $x_0 \in [0,1]$ gegen $x = f(x)$.

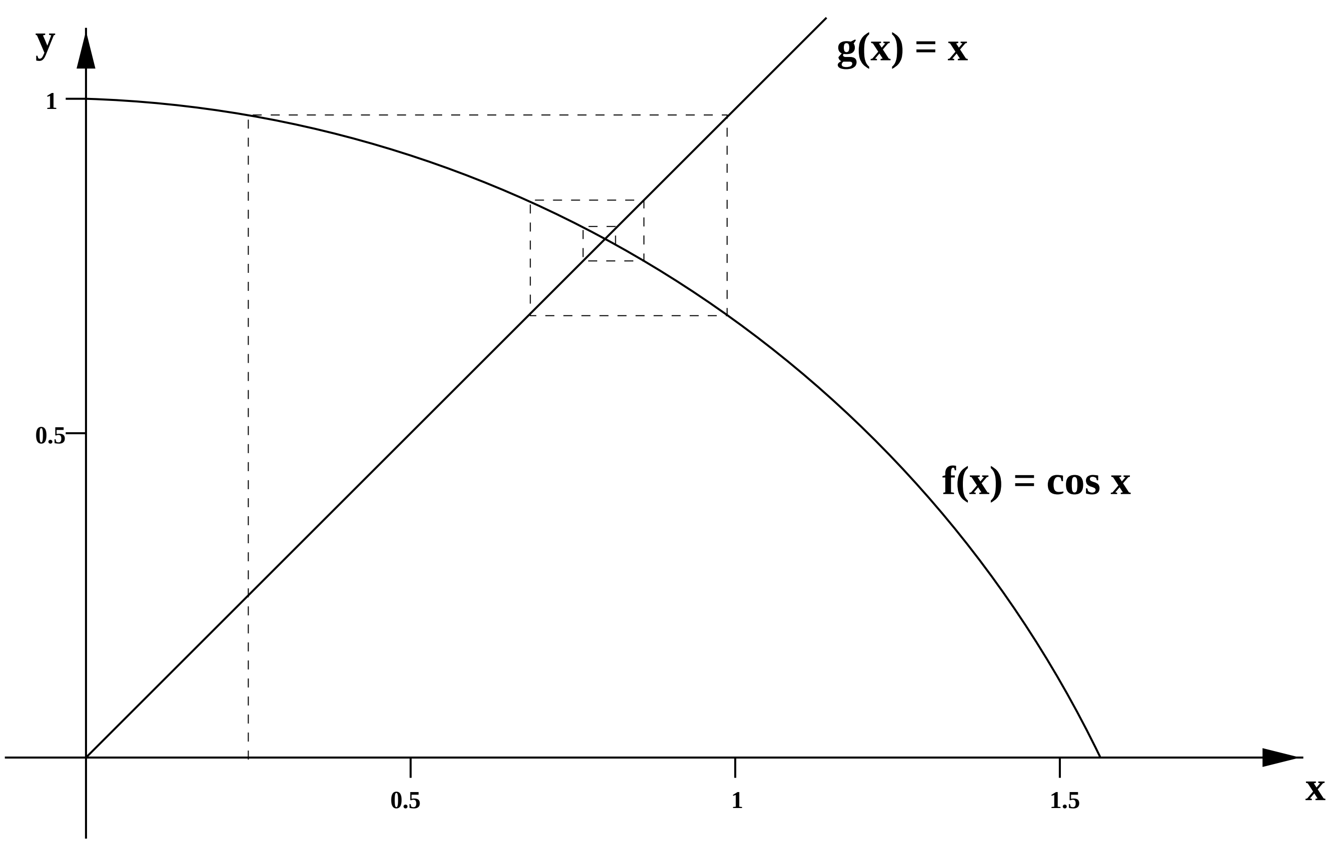


Abb.: Konvergenzverlauf für $x_0 = 0.25$

Für Splitting-Methoden gilt:

$$\begin{aligned}
&\|\phi(x,b) - \phi(y,b)\| \\
&\quad = \|Mx + Nb - (My + Nb)\| \\
&\qquad = \|M(x-y)\| \\
&\qquad \leq \|M\|\|x-y\|
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir unseren Fixpunktsatz:

Gilt $\|M\| < 1$, dann ist die Splitting-Methode

$$\phi(x,b) = Mx + Nb$$

konvergent.
A-priori-Fehlerabschätzung:

$$\|x_m - x^\star\| \leq \frac{\|M\|^m}{1 - \|M\|}\|x_1 - x_0\|$$

Spektralradius:

Eine Zahl $\lambda \in \mathbb{C}$ heißt Eigenwert von A, falls ein $x \neq 0$ mit $Ax = \lambda x$ existiert. Die Zahl

$$\rho(A) := \max\{|\lambda| : \lambda \text{ ist Eigenwert von } A\}$$

heißt Spektralradius von A.

Zusammenhang zwischen Norm und Spektralradius

Es gilt:

- $\rho(M) \leq \|M\|$ für jede Norm $\|\cdot\|$.
- Zu jedem $\epsilon > 0$ existiert eine Norm derart, daß für gegebene Matrix M
$$\|M\| \leq \rho(M) + \epsilon$$
gilt.

Daher folgt für gegebenes M:

- Gibt es eine Norm mit $\|M\| < 1$, dann gilt $\rho(M) < 1$.
- Gilt $\rho(M) < 1$, dann gibt es eine Norm mit $\|M\| < 1$.

Wir erhalten somit:

Eine Splitting-Methode $\phi(x, b) = Mx + Nb$ ist genau dann konvergent, wenn
$$\rho(M) < 1$$
gilt. $\rho(M)$ heißt Konvergenzrate.

Konsistenz, Konvergenz und Konvergenzrate

Ziel: Beantwortung der Fragen

1. Wann konvergiert eine Splitting-Methode?
   - Verfahren konvergiert $\Longleftrightarrow \rho(M) < 1$

2. Wovon hängt die Konvergenzgeschw. ab?
   - $\rho(M)$ bestimmt die Konvergenzgeschw.
     $\longrightarrow$ je kleiner je besser

Konsistenz:

Ein Iterationsverfahren $x_{m+1} = \phi(x_m, b)$ heißt konsistent zum Gleichungssystem $Ax = b$, wenn für alle $b \in \mathbb{C}^n$ die Lösung $x^\star = A^{-1}b$ einen Fixpunkt von ϕ darstellen, d.h.

$$x^\star = \phi(x^\star, b)$$

gilt.

Konsistenz besagt

Liefert das Iterationsverf. $x_m = A^{-1}b$,
dann gilt $x_k = A^{-1}b$ für alle $k \geq m$.

Zusammenfassung

- Splitting-Methoden sind stets linear.

- Splitting-Methoden sind stets konsistent.

- Splitting-Methoden konvergieren genau dann für beliebiges $x_0 \in \mathbb{C}^n$ gegen $x^\star = A^{-1}b$, wenn $\rho(M) < 1$ gilt.

- Splitting-Methoden konvergieren i.d.R. umso schneller je kleiner der Spektralradius $\rho(M)$ ist.

- Faustregel für konvergente Verfahren:

  Quadrieren des Spektralradius führt zur Halbierung der Iterationen.

Das Jacobi-Verfahren

Vorgehensweise:

- Schreibe $A = D + L + R$ mit
  - $D = diag\{a_{11}, \dots, a_{nn}\}$
  - $L = \begin{pmatrix} 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ a_{21} & \cdot & & \cdot \\ \vdots & \ddots & \cdot & \cdot \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}$
  - $R = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \cdot & \cdot & \ddots & \vdots \\ \cdot & & \cdot & a_{n-1,n} \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 \end{pmatrix}$

- Wähle $B_J = D$

$$\Longrightarrow \quad M_J = B_J^{-1}(B_J - A) = -D^{-1}(L + R)$$

$$N_J = B_J^{-1} = D^{-1}$$

$$\Longrightarrow \quad x_{m+1} = -D^{-1}(L + R)x_m + D^{-1}b$$

- Komponentenschreibweise

$$x_{m+1,i} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} x_{m,j})$$

Eigenschaften:

- Berechnung von $x_{m+1,i}$ mittels des Vektors

$$(x_{m,1}, \dots, x_{m,i-1}, 0, x_{m,i+1}, \dots, x_{m,n})^T$$

- Unabhängigkeit von der Nummerierung der Unbekannten

- Gesamtschrittverfahren

Bewertung:

"$\circ$"	:	Geringe Voraussetzungen an A
		($a_{ii} \neq 0$ für $i = 1, \dots, n$)
"$+$"	:	Einfache Invertierbarkeit von $B_J = D$
"$\circ$"	:	Mittelmäßige Näherung an A
		($B_J \longleftrightarrow A$)

Wann konvergiert das Jacobi-Verfahren?

Erste Idee:

Weise durch eine einfache Berechnung $\|M\| < 1$ nach und folgere

$$\rho(M) \leq \|M\| < 1.$$

Mit

$$M = -\begin{pmatrix} 0 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \frac{a_{n-1,n}}{a_{n-1,n-1}} \\ \frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \cdots & \frac{a_{n,n-1}}{a_{nn}} & 0 \end{pmatrix}$$

erhalten wir

Erfüllt A mit $a_{ii} \neq 0 \quad , i = 1, \ldots, n$

$$q_\infty := \max_{i=1,\ldots,n} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{n} \frac{|a_{ik}|}{|a_{ii}|} < 1$$

(starkes Zeilensummenkriterium)

oder

$$q_1 := \max_{k=1,\ldots,n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^{n} \frac{|a_{ik}|}{|a_{ii}|} < 1$$

(starkes Spaltensummenkriterium)

oder

$$q_2 := \sum_{\substack{i,k=1 \\ i \neq k}}^{n} \left(\frac{|a_{ik}|}{|a_{ii}|}\right)^2 < 1,$$

(Quadratsummenkriterium)

dann konvergiert das Jacobi-Verfahren bei beliebigen b, x_0 gegen $x^\star = A^{-1}b$.

Modellbeispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 0.7 & -0.4 \\ -0.2 & 0.5 \end{pmatrix} \quad , \quad b = \begin{pmatrix} 0.3 & 0.3 \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad M_J = -D^{-1}(L+R) = \begin{pmatrix} 0 & 4/7 \\ 2/5 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad q_\infty = \max\left\{\tfrac{4}{7}, \tfrac{2}{5}\right\} = \tfrac{4}{7} < 1$$

$\Longrightarrow$ Jacobi-Verfahren konvergiert

- Konvergenzrate

Eigenwerte der Iterationsmatrix M_J

$$0 = \det(M_J - \lambda I) = \lambda^2 - \frac{8}{35}$$

$$\Longrightarrow \qquad \lambda_{1,2} = \pm\sqrt{\tfrac{8}{35}}$$

$$\rho(M_J) = \sqrt{\frac{8}{35}} \approx 0.478 \approx 0.7^2$$

Erwartung

ca. doppelt so schnelle Konvergenz wie beim trivialen Verfahren

Jacobi Verfahren				
m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$\varepsilon_m := \|x_m - x^*\|_\infty$	$\varepsilon_m/\varepsilon_{m-1}$
0	2.100000e+01	-1.900000e+01	2.000000e+01	
1	-1.042857e+01	9.000000e+00	1.142857e+01	5.714286e-01
2	5.571429e+00	-3.571429e+00	4.571429e+00	4.000000e-01
3	-1.612245e+00	2.828571e+00	2.612245e+00	5.714286e-01
4	2.044898e+00	-4.489796e-02	1.044898e+00	4.000000e-01
5	4.029155e-01	1.417959e+00	5.970845e-01	5.714286e-01
6	1.238834e+00	7.611662e-01	2.388338e-01	4.000000e-01
7	8.635235e-01	1.095534e+00	1.364765e-01	5.714286e-01
8	1.054591e+00	9.454094e-01	5.459059e-02	4.000000e-01
9	9.688054e-01	1.021836e+00	3.119462e-02	5.714286e-01
10	1.012478e+00	9.875222e-01	1.247785e-02	4.000000e-01
11	9.928698e-01	1.004991e+00	7.130199e-03	5.714286e-01
12	1.002852e+00	9.971479e-01	2.852080e-03	4.000000e-01
13	9.983702e-01	1.001141e+00	1.629760e-03	5.714286e-01
14	1.000652e+00	9.993481e-01	6.519039e-04	4.000000e-01
15	9.996275e-01	1.000261e+00	3.725165e-04	5.714286e-01
20	1.000008e+00	9.999922e-01	7.784835e-06	4.000000e-01
25	9.999998e-01	1.000000e+00	2.324102e-07	5.714286e-01
30	1.000000e+00	1.000000e-00	4.856900e-09	4.000000e-01
35	1.000000e-00	1.000000e+00	1.449989e-10	5.714279e-01
40	1.000000e+00	1.000000e-00	3.030243e-12	4.000117e-01
45	1.000000e-00	1.000000e+00	9.037215e-14	5.700280e-01
48	1.000000e+00	1.000000e-00	8.437695e-15	4.086022e-01

Zweite Idee (Konvergenz):

- Zulassung der Eigenschaft $q_\infty = 1$ unter zusätzlichen Bedingungen.

  Sei A irreduzibel und gelte

  $$q_\infty \leq 1$$

  und existiert ein $k \in \{1, \dots, n\}$ mit

  $$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{n} \frac{|a_{kj}|}{|a_{kk}|} < 1,$$

  dann konvergiert das Jacobi-Verfahren bei beliebigen b, x_0 gegen $x^\star = A^{-1}b$.

Irreduzibilität:

Eine Matrix heißt reduzibel, falls eine Permutationsmatrix P mit

$$PAP^T = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} \\ 0 & \tilde{A}_{22} \end{pmatrix}$$

mit $\tilde{A}_{ii} \in \mathbb{C}^{n_i \times n_i}, \quad n_1 + n_2 = n$ existiert.
Andernfalls heißt A irreduzibel.

Irreduzibilität besagt:

Eine Matrix ist irreduzibel, wenn von jeder Zeile k in jede Zeile l eine Folge von Wegen

$$(k, k_1)(k_1, k_2) \dots (k_m, l)$$

existiert.
Dabei existiert ein Weg (i,j) genau dann, wenn $a_{ij} \neq 0$ gilt.

Beispiele:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{reduzibel}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{irreduzibel}$$

Wirkung der Irreduzibilität:

Fehlerdämpfung der k-ten Zeile wirkt sich im Laufe der Iteration als Fehlerdämpfung in allen Zeilen aus

$\Longrightarrow$ Konvergenz

Beispiel: 1-D Poisson-Gleichung

Ein zentrales Verfahren liefert das Gleichungssystem:

$$Ax = b$$

mit

$$A = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Für $n > 2$ folgt

- $\underline{q_\infty} = q_1 = \underline{1} \quad , \quad q_2 \geq 1.$

Zudem gilt

- A ist irreduzibel
- $\underline{\sum_{j=2}^{n} \frac{|a_{1j}|}{|a_{11}|}} = \frac{1}{2} \underline{< 1}$

$\Longrightarrow$ Jacobi-Verfahren konvergiert.

Das Gauss-Seidel-Verfahren

Vorgehensweise:

- Schreibe $A = D + L + R$
- Wähle $B_{GS} = D + L$

$\Rightarrow M_{GS} = (D+L)^{-1}(D+L-A) = -(D+L)^{-1}R$
$N_{GS} = (D+L)^{-1}$

- Problem :
  - Evtl. aufwendige Invertierung von $D + L$
  - Evtl. zusätzlich benötigter Speicherplatz (Schwachbesetzte Matrizen)

- Lösung
  - Komponentenweise Herleitung
- Herleitung

$$Ax = b$$
$$(D+L)x_{m+1} = -Rx_m + b$$

i-te Komponente:

$$\sum_{j=1}^{i} a_{ij}x_{m+1,j} = -\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_{m.j} + b_i$$

$$\Longrightarrow x_{m+1,i} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_{m+1,j} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_{m,j}\right)$$

Eigenschaften:

- Berechnung von $x_{m+1,i}$ mittels des Vektors $(x_{m+1,1}, \ldots, x_{m+1,i-1}, 0, x_{m,i+1}, \ldots, x_{m,n})^T$.

- Abhängigkeit von der Nummerierung der Unbekannten.

- Einzelschrittverfahren

Bewertung:

"$\circ$" : Geringe Voraussetzung an A
: $(a_{ii} \neq 0 \quad \text{für} \quad i = 1, \ldots, n)$

"$+$" : Einfache Invertierung von $B_{GS} = D + L$

"$+$" : Gute Näherung an A
$(B_{GS} \longleftrightarrow A)$

Wann konvergiert das Gauss-Seidel-Verf.?

Sei A mit $a_{ii} \neq 0$ gegeben. Erfüllen die durch

$$p_i = \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\|a_{ij}\|}{\|a_{ii}\|} p_j + \sum_{j=i+1}^{n} \frac{\|a_{ij}\|}{\|a_{ii}\|} \quad , i = 1, \dots, n$$

rekursiv definierten Zahlen $p_1, \dots, p_n$ die Bedingung

$$p = \max_{i=1,\dots,n} p_i < 1,$$

dann konvergiert das Gauss-Seidel-Verfahren bei beliebigen b, x_0 gegen $x^\star = A^{-1}b$.

Idee: Die Bedingung liefet $\|M_{GS}\|_\infty < 1$ und somit durch $\rho(M_{GS}) \leq \|M_{GS}\|_\infty$ die Konvergenz.

Beispiel:

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$p_1 = \tfrac{1}{2} < 1$$

$$P_i = \tfrac{1}{2} p_{i-1} + \tfrac{1}{2} < 1, \quad i = 2, \dots, n$$

$$p_n = \tfrac{1}{2} p_{n-1} < 1$$

$\Longrightarrow$ Gauss-Seidel-Verfahren konvergiert.

Modellbeispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 0.7 & -0.4 \\ -0.2 & 0.5 \end{pmatrix} \quad , \quad b = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.3 \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad p_1 = \tfrac{4}{7} \quad , \quad p_2 = \tfrac{2}{5} \cdot \tfrac{4}{7} = \tfrac{8}{35}$$

$$\Longrightarrow \quad p = \max\{p_1, p_2\} < 1$$

$\Longrightarrow$ Gauss-Seidel-Verfahren konvergiert.

- Konvergenzrate:

  Eigenwerte der Matrix

  $$M_{GS} = -(D+L)^{-1}R = \begin{pmatrix} 0 & 4/7 \\ 0 & 8/35 \end{pmatrix}$$

  lauten

  $$\lambda_1 = 0 \quad , \quad \lambda_2 = \frac{8}{35}$$

  $\rho(M_{GS}) = \frac{8}{35} = \rho(M_J)^2 \approx 0.22857$

- Erwartung:

  Etwa doppelt so schnelle Konvergenz wie beim Jacobi-Verfahren

Gauss-Seidel-Verfahren				
m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$\varepsilon_m := \|x_m - x^*\|_\infty$	$\varepsilon_m/\varepsilon_{m-1}$
0	2.100000e+01	-1.900000e+01	2.000000e+01	
1	-1.042857e+01	-3.571429e+00	1.142857e+01	5.714286e-01
2	-1.612245e+00	-4.489796e-02	2.612245e+00	2.285714e-01
3	4.029155e-01	7.611662e-01	5.970845e-01	2.285714e-01
4	8.635235e-01	9.454094e-01	1.364765e-01	2.285714e-01
5	9.688054e-01	9.875222e-01	3.119462e-02	2.285714e-01
6	9.928698e-01	9.971479e-01	7.130199e-03	2.285714e-01
7	9.983702e-01	9.993481e-01	1.629760e-03	2.285714e-01
8	9.996275e-01	9.998510e-01	3.725165e-04	2.285714e-01
9	9.999149e-01	9.999659e-01	8.514663e-05	2.285714e-01
10	9.999805e-01	9.999922e-01	1.946209e-05	2.285714e-01
11	9.999956e-01	9.999982e-01	4.448477e-06	2.285714e-01
12	9.999990e-01	9.999996e-01	1.016795e-06	2.285714e-01
13	9.999998e-01	9.999999e-01	2.324102e-07	2.285714e-01
14	9.999999e-01	1.000000e-00	5.312234e-08	2.285714e-01
15	1.000000e-00	1.000000e-00	1.214225e-08	2.285714e-01
16	1.000000e-00	1.000000e-00	2.775371e-09	2.285714e-01
17	1.000000e-00	1.000000e-00	6.343704e-10	2.285714e-01
18	1.000000e-00	1.000000e-00	1.449989e-10	2.285713e-01
19	1.000000e-00	1.000000e-00	3.314249e-11	2.285706e-01
20	1.000000e-00	1.000000e-00	7.575385e-12	2.285702e-01
21	1.000000e-00	1.000000e-00	1.731504e-12	2.285698e-01
22	1.000000e-00	1.000000e-00	3.956835e-13	2.285201e-01
23	1.000000e-00	1.000000e-00	9.037215e-14	2.283951e-01
24	1.000000e-00	1.000000e-00	2.065015e-14	2.285012e-01
25	1.000000e-00	1.000000e-00	4.551914e-15	2.204301e-01

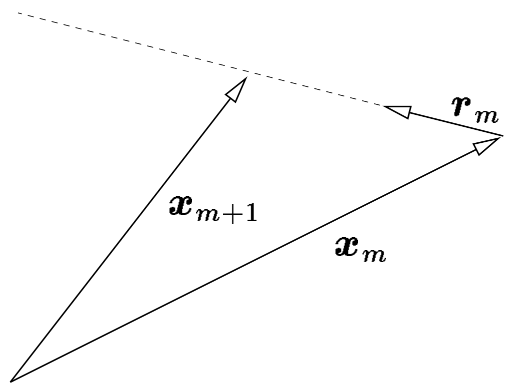
Relaxationsverfahren

Schreibe

$$
\begin{aligned}
x_{m+1} &= B^{-1}(B-A)x_m + B^{-1}b \\
&= x_m + \underbrace{B^{-1}(b - Ax_m)}_{=:r_m} \quad \text{(Korrekturvektor)}
\end{aligned}
$$

Ziel der Relaxation:

Verbesserung der Konvergenzrate durch Gewichtung des Korrekturvektors.



Mit $\omega \in \mathbb{R}^+$ (Relaxationsparameter) folgt

$$
\begin{aligned}
x_{m+1} &= x_m + \omega r_m \\
&= (I - \omega B^{-1}A)x_m + \underbrace{\omega B^{-1}}_{= N(\omega)} b
\end{aligned}
$$

Optimalität des Relaxationsparameters:

$$\omega_{opt} = \arg \min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} \rho\left(M(\alpha)\right)$$

Einzelschrittverfahren

Korrektur bei jeder Einzelkomponente

Das Jacobi-Relaxationsverfahren

Jacobi-Verfahren:

$$
\begin{aligned}
x_{m+1} &= D^{-1}(D-A)x_m + D^{-1}b \\
&= x_m + D^{-1}(b - Ax_m)
\end{aligned}
$$

Jacobi-Relaxationsverfahren:

$$
\begin{aligned}
x_{m+1} &= x_m + \omega D^{-1}(b - Ax_m) \\
&= (I - \omega D^{-1}A)x_m + \omega D^{-1}b
\end{aligned}
$$

Bestimmung des optimalen Relaxationsparameters:

Vorauss.:

1. $M_J = D^{-1}(D-A)$ hat nur reelle Eigenwerte
   $\lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_n$.

2. Eigenvektoren $u_1, \cdots, u_n$ sind linear unabh.

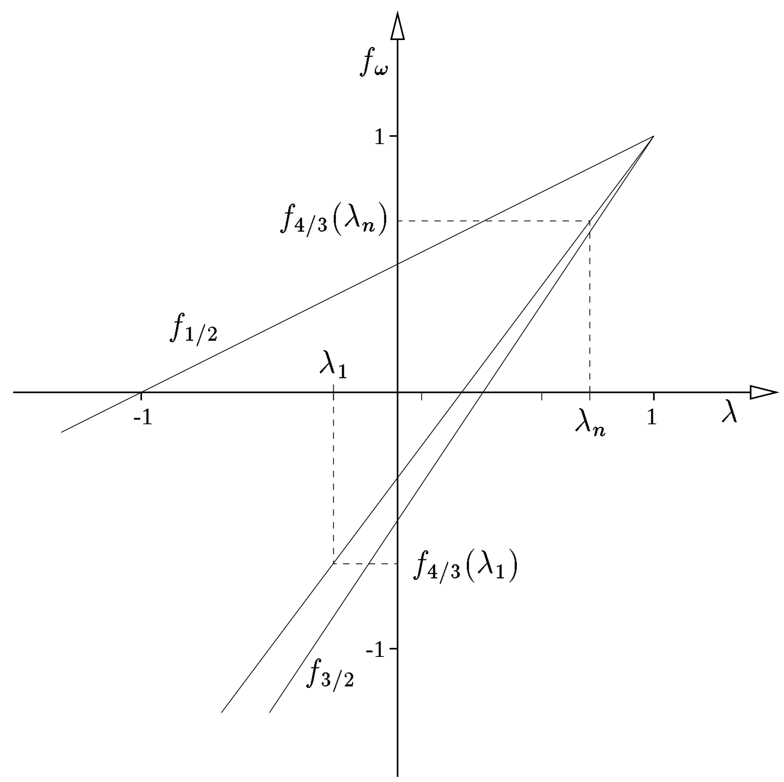
3. Es gilt $\rho(M_J) < 1$.

Dann gilt:

1. Eigenwerte des Jacobi-Rel.verf. lauten:
   $\mu_i = 1 - \omega + \omega\lambda_i$

2. Der optimale Relaxationsparameter lautet:
   $\omega_{opt} = \frac{2}{2-\lambda_1-\lambda_n} > 0$

Idee zur Wahl von ω_{opt}:



- Wähle ω derart, daß $\mu_1 = \mu_n$ gilt.
- Verbesserung nur bei $\lambda_1 \neq \lambda_n$ zu erwarten.

Modellbeispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 0.7 & -0.4 \\ -0.2 & 0.5 \end{pmatrix} \Longrightarrow M_J = \begin{pmatrix} 0 & 4/7 \\ 2/5 & 0 \end{pmatrix}$$

$\Longrightarrow$ $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{\frac{8}{35}}$

$\Longrightarrow$ keine Verbesserungmöglichkeit

Bewertung:

"$\circ$" : Geringe Voraussetung an A

"$+$" : Einfache Invertierbarkeit von $\omega^{-1}D$

"$\circ$" : Oftmals keine Verbesserung, MGV

Das SOR-Verfahren (successive overrelaxation)

Ausgangspunkt:

Komponentenschreibweise des Gauss-Seidel-Verf.

$$x_{m+1,i} = x_{m,i} - \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_{m+1,j} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_{m,j} \right)$$

Vorgehensweise:

Gewichtung des Korrekturvektors

$$x_{m+1,i} = (1-\omega) x_{m,i} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_{m+1,j} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_{m,j} \right)$$

Matrixschreibweise:

$$\underbrace{(I + \omega D^{-1} L)}_{=D^{-1}(D+\omega L)} x_{m+1} = \underbrace{\left((1-\omega) I - \omega D^{-1} R\right)}_{=D^{-1}((1-\omega)D-\omega R)} x_m + \omega D^{-1} b$$

$$\Rightarrow \quad (D + \omega L) x_{m+1} = ((1-\omega) D - \omega R)\, x_m + \omega b$$

$$\Rightarrow \quad x_{m+1} = \underbrace{(D + \omega L)^{-1} ((1-\omega) D - \omega R)}_{=M_{GS}(\omega)} x_m$$

$$+ \underbrace{\omega (D + \omega)^{-1}}_{N_{GS}(\omega)} b$$

Eigenschaften:

1. Das Verfahren konvergiert höchstens für $\omega \in (0, 2)$.

   Begründung:

$$\begin{aligned}\prod_{i=1}^{n} \lambda_i &= \det M_{GS}(\omega) \\ &= \det(D + \omega L)^{-1} \cdot \det((1-\omega)D - \omega R) \\ &= \det D^{-1} \cdot \det((1-\omega)D) \\ &= (1-\omega)^n\end{aligned}$$

$$\Longrightarrow \qquad \underbrace{\max_{i=1,\dots,n} |\lambda_i|}_{=\rho(M_{GS}(\omega))} \geq |1-\omega|$$

2. Vorauss.:

   (a) A ist konsistent geordnet.

   (b) Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ von M_J sind reell.

   (c) $\rho := \rho(M_J) < 1$

   Dann gilt:

   (a) Das Verf. konvergiert für alle $\omega \in (0, 2)$

   (b) $\omega_{opt} = \frac{2}{1+\sqrt{1-\rho^2}}$, $\rho(M_{GS}(\omega_{opt})) = \omega_{opt} - 1$

   (c) $\lambda_i = \frac{\mu_i + \omega - 1}{\omega \mu_i^{1/2}}$ mit μ_i Eigenwerte von $M_{GS}(\omega)$

Konsistent geordnet:

Die Matrix $A = D + L + R$ mit D regulär heißt konsistent geordnet, wenn die Eigenwerte von

$$C(\alpha) = -(\alpha D^{-1}L + \alpha D^{-1}R) \quad , \quad \alpha \in \mathbb{C}\backslash\{0\}$$

unabhängig von α sind.

Beispiele:

- Jede 2×2 Matrix ist konsistent geordnet.
- Jede Tridiagonalmatrix

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ c_2 & a_2 & b_2 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & b_{n-1} \\ & & & c_n & a_n \end{pmatrix}$$

  ist konsistent geordnet.
- Jede Matrix der Form

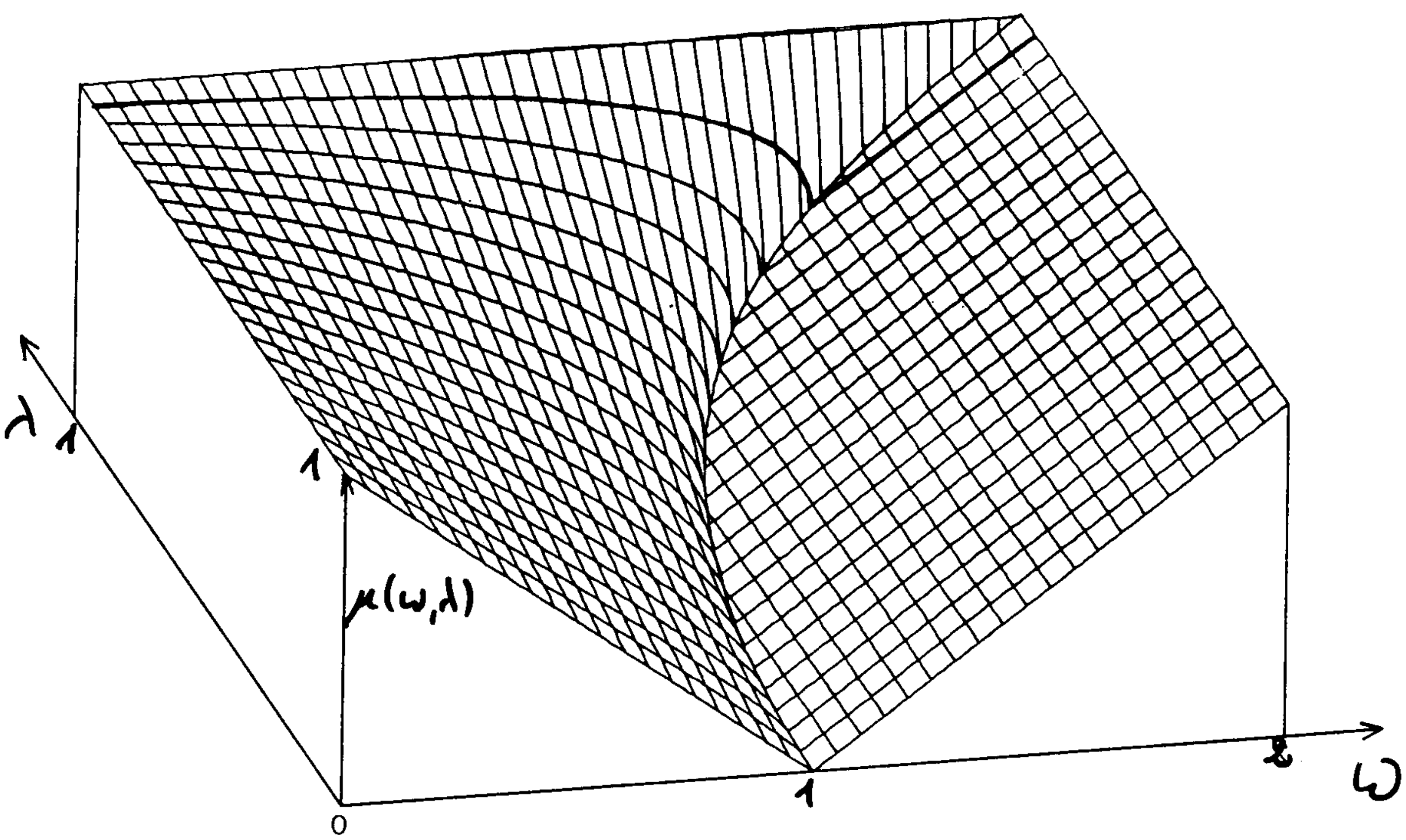
$$A = \begin{pmatrix} I & A_{12} \\ A_{21} & I \end{pmatrix}$$

  ist konsistent geordnet.

"Eigenverteilung"

"Gauß-Seidel-Relaxations-Verfahrens

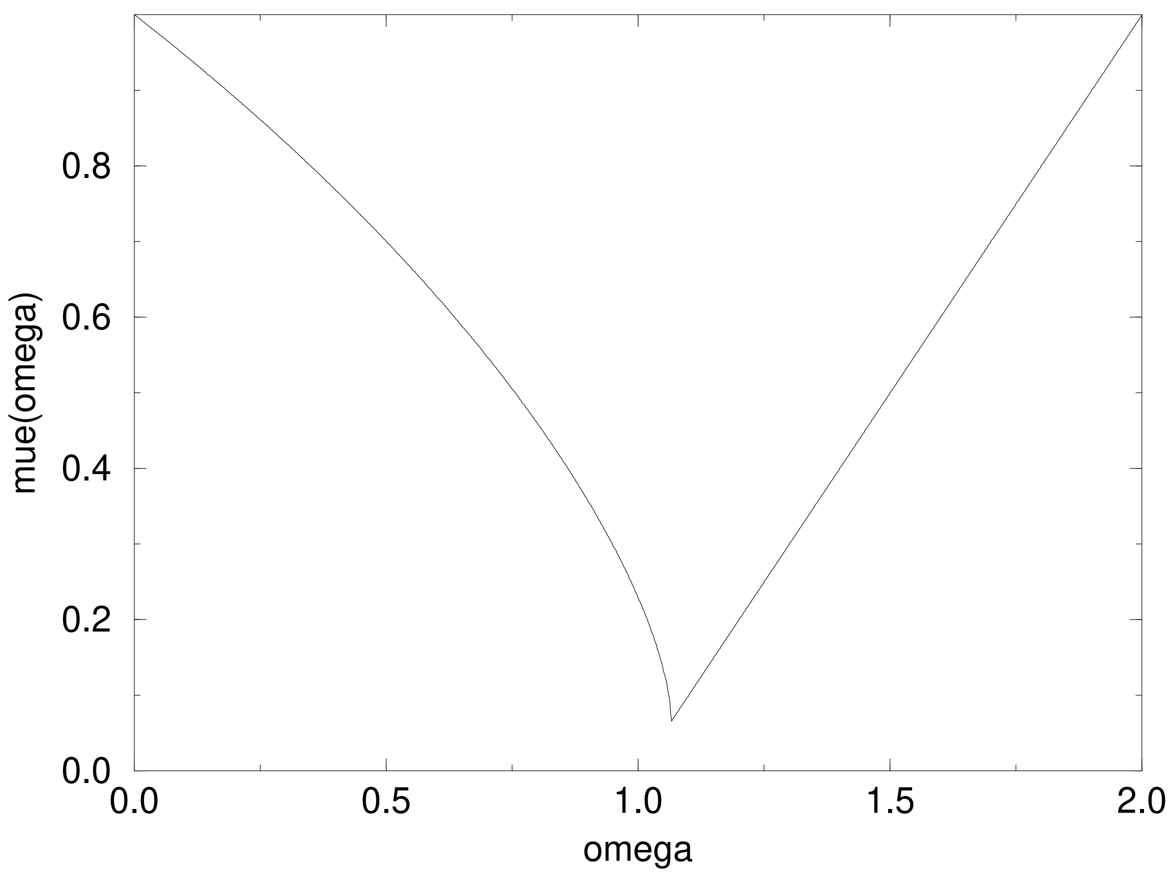
$$\mu(\omega,\lambda) = \begin{cases} \frac{1}{2}\lambda^2\omega^2 - (\omega-1) + \lambda\omega\sqrt{\frac{1}{4}\lambda^2\omega^2 - (\omega-1)} & , \quad 0 < \omega < \omega^\star(\lambda) \\ \omega - 1 & , \quad \omega^\star(\lambda) \le \omega < 2 \end{cases}$$



[Bunse, Bunse-Gerstner:
Numerische Lineare Algebra]

Gauss-Seidel-Relaxationsverfahren (SOR)

Spektralradius in Abhängigkeit vom Relaxationsparameter



<u>Faustregel:</u>

- Wähle ω lieber zu groß als zu klein.

Modellbeispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 0.7 & -0.4 \\ -0.2 & 0.5 \end{pmatrix} \quad , \quad b = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.3 \end{pmatrix}$$

1. A ist konsistent geordnet.
2. $M_J = -D^{-1}(L + R)$ hat die Eigenwerte $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{\frac{8}{35}} \quad \in \quad \mathbb{R}$
3. $\rho(M_J) < 1$

$$\Longrightarrow \qquad \omega_{opt} = \frac{2}{1+\sqrt{1-\frac{8}{35}}} \approx 1.06479$$

$$\rho(M_{GS}(\omega_{opt})) = \omega_{opt} - 1 \approx 0.06479$$

$$\approx 0.25^2 \approx \rho(M_{GS})^2$$

Bewertung:

"$\circ$"	:	Geringe Voraussetzungen an A ($a_{ii} \neq 0$ für $i = 1, \ldots, n$)
"$+$"	:	Einfache Invertierbarkeit durch Komponentenschreibweise
"$++$"	:	Schnelles Konvergenzverhalten

SOR-Gauß-Seidel-Verfahren				
m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$\varepsilon_m := \|x_m - x^*\|_\infty$	$\varepsilon_m/\varepsilon_{m-1}$
0	2.100000e+01	-1.900000e+01	2.000000e+01	
1	-1.246473e+01	-3.439090e+00	1.346473e+01	6.732366e-01
2	-8.286241e-01	5.087570e-01	1.828624e+00	1.358084e-01
3	8.195743e-01	9.549801e-01	1.804257e-01	9.866748e-02
4	9.842969e-01	9.962285e-01	1.570309e-02	8.703354e-02
5	9.987226e-01	9.997003e-01	1.277401e-03	8.134709e-02
6	9.999004e-01	9.999770e-01	9.960642e-05	7.797587e-02
7	9.999925e-01	9.999983e-01	7.544695e-06	7.574507e-02
8	9.999994e-01	9.999999e-01	5.595127e-07	7.415974e-02
9	1.000000e-00	1.000000e-00	4.083051e-08	7.297514e-02
10	1.000000e-00	1.000000e-00	2.942099e-09	7.205638e-02
11	1.000000e-00	1.000000e-00	2.098393e-10	7.132298e-02
12	1.000000e-00	1.000000e-00	1.484068e-11	7.072406e-02
13	1.000000e-00	1.000000e-00	1.042055e-12	7.021612e-02
14	1.000000e-00	1.000000e-00	7.260859e-14	6.967824e-02
15	1.000000e-00	1.000000e-00	4.884981e-15	6.727829e-02

Zusammenfassung

Splitting-Methoden:

- Leichte Herleitung
- Einfach programmierbar

Konvergenzgeschwindigkeit:

- Wird durch $\rho(M) = \rho(B^{-1}(B-A))$ bestimmt.
- Faustregel: Je besser B die Matrix A approx.,
  desto schnellere Konvergenz.

Typen von Splitting-Methoden:

- Triviales Verfahren : $B = I$
  (schlechte Konvergenz)
- Jacobi-Verf. : $B = D$ (Gesamtschrittverf.)
- Gauss-Seidel-Verfahren : $B = D + L$
  (Einschrittverfahren)
- Relaxationsverfahren
  - Gewichtung des Korrekturvektor
  - Optimierung von $\rho(M(\omega))$

Projektionsmethoden und Krylov-Unterraum-Methoden

Wir betrachten

$$Ax = b$$

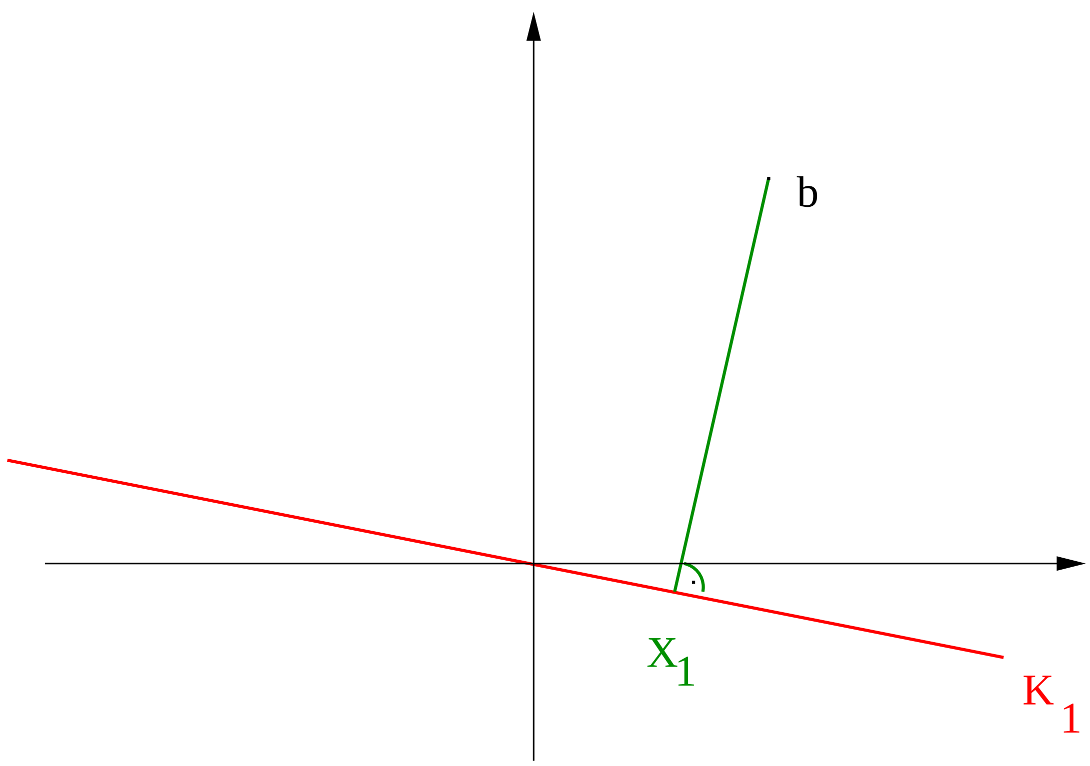
mit $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\quad b \in \mathbb{R}^n$ gegeben.

Splitting-Methoden	Projektionsmethoden
Berechnung von Näherungslösungen $x_m \in \mathbb{R}^n$	Berechnung von Näherungslösungen $x_m \in x_0 + K_m \subset \mathbb{R}^n$ $\mathrm{dim} K_m = m \leq n$
Berechnungsvorschrift $x_{m+1} = Mx_m + Nb$	Berechnungsvorschrift (Orthogonalitätsbed.) $b - Ax_m \perp L_m \subset \mathbb{R}^n$ $\mathrm{dim} L_m = m \leq n$

Beispiel:

$$A = I \in \mathbb{R}^{2\times 2} \quad , \quad x_0 = 0 \in \mathbb{R}^2$$

$\circ K_1 = L_1$ (Orthogonale Projektionsmethode)

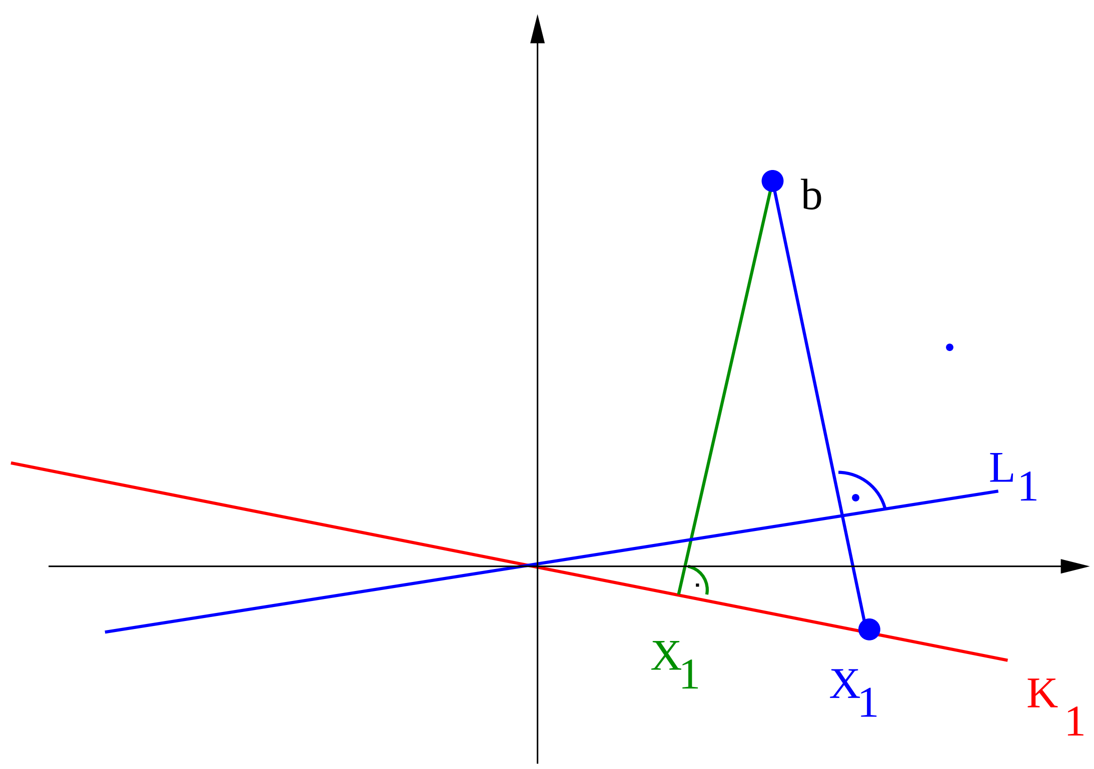


Beispiel:

$A = I \in \mathbb{R}^{2\times 2} \quad , \quad x_0 = 0 \in \mathbb{R}^2$

∘ $K_1 = L_1$ (Orthogonale Projektionsmethode)

∘ $K_1 \neq L_1$ (Schiefe Projektionsmethode)



Krylov-Unterraum-Methode:

Projektionsmethode mit

$K_m = K_m(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0; \dots, A^{m-1}r_0\}$,

wobei $r_0 = b - Ax_0$ gilt.

Verfahren für symmetrische,positiv definite Matrizen

Grundidee:

Minimiere die Funktion

$$F(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$$

entlang spezieller Suchrichtungen

$$p_0, p_1, \ldots \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}.$$

Vorgehensweise:

- Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$ und $p_0, p_1, \ldots \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$.
- Für $m = 0, 1, \ldots$ bestimme x_{m+1} derart, daß

$$F(x_{m+1}) \leq F(y) \quad \forall y \in x_m + \text{span}\{\rho_m\}$$

$$\Longrightarrow x_{m+1} = \arg\min_{\lambda \in \mathbb{R}} \underbrace{F(x_m + \lambda \rho_m)}_{= f_{x_m, \rho_m}(\lambda)}$$

Fragen:

1. Stellt $x^\star = A^{-1}b$ das einzige und globale Minimum dar?
2. Wie berechnet man $\lambda \in \mathbb{R}$?

Zu 1)

$$
\begin{aligned}
& & F(x) &= \tfrac{1}{2}(Ax,x) - (b,x) \\
&\Longrightarrow & \nabla F(x) &= \tfrac{1}{2}(A + A^T)x - b \\
& & &\overset{A \text{ symm.}}{=} \quad Ax - b
\end{aligned}
$$

$$
\Longrightarrow \quad \nabla^2 F(x) \; = A \overset{A \text{ pos.def.}}{\Longrightarrow} \text{ F ist konvex } \; (1)
$$

$$
\nabla F(x) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad x = A^{-1}b
$$

Zu 2)

$$
\begin{aligned}
f_{x,p}(\lambda) &= \frac{1}{2}(A(x+\lambda p), x+\lambda p) - (b, x+\lambda p) \\
&= F(x) + \lambda(Ax-b,p) + \frac{1}{2}\lambda^2(Ap,p)
\end{aligned}
$$

$$
f_{x,p}(\lambda) = (Ax-b,p) + \lambda(Ap,p)
$$

$$
f''_{x,p}(\lambda) = (Ap,p) > 0 \text{ für } p \neq 0
$$

- $f_{x,p}$ konvex
- Optimales λ:

$$
f'_{x,p}(\lambda) = 0 \Longleftrightarrow \lambda = \frac{(b-Ax,p)}{(Ap,p)}.
$$

Verfahren für symmetrische,positiv definite Matritzen

Grundidee:

Minimiere die Funktion

$$F(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$$

entlang spezieller Suchrichtungen

$$p_0, p_1, \ldots \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}.$$

Vorgehensweise:

- Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$ und $p_0, p_1, \ldots \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$.
- Für $m = 0, 1, \ldots$ bestimme x_{m+1} derart, daß

$$F(x_{m+1}) \leq F(y) \quad \forall y \in x_m + \text{span}\{\rho_m\}$$

$$\Longrightarrow x_{m+1} = \arg \min_{\lambda \in \mathbb{R}} \underbrace{F(x_m + \lambda \rho_m)}_{= f_{x_m, \rho_m}(\lambda)}$$

Fragen:

1. Stellt $x^\star = A^{-1}b$ das einzige und globale Minimum dar? Ja
2. Wie berechnet man $\lambda \in \mathbb{R}$?

$$\lambda = \frac{(b - Ax_m, p_m)}{(Ap_m, p_m)}$$

Residuenvektor:

Der Vektor $r = b - Ax$ wird als

Residuenvektor

bezeichnet.

Algorithmus:

- Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$ und $p_0, p_1, \ldots \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$
- Für $m = 0, 1, \ldots$

$$r_m = \quad b - Ax_m$$

$$\lambda_m = \frac{(r_m, p_m)}{(Ap_m, p_m)}$$

$$x_{m+1} = x_m + \lambda_m p_m$$

Problem:

Bestimmung der Suchrichtungen $p_0, p_1, \ldots$.

Verfahren des steilsten Abstiegs

Grundidee:

Wähle die lokal optimale Suchrichtung

$$\tilde{p}_m = -\nabla F(x_m) = -(Ax_m - b) = r_m$$

Normierung der Suchrichtung:

$$p_m = \frac{\tilde{p}_m}{\|\tilde{p}_m\|_2} = \frac{r_m}{\|r_m\|_2}$$

Abbruchkriterium : $\quad r_m = 0$

Algorithmus:

- Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$
- Für $m = 0, 1, \ldots$

$$r_m = b - Ax_m$$

Falls $r_m \neq 0$

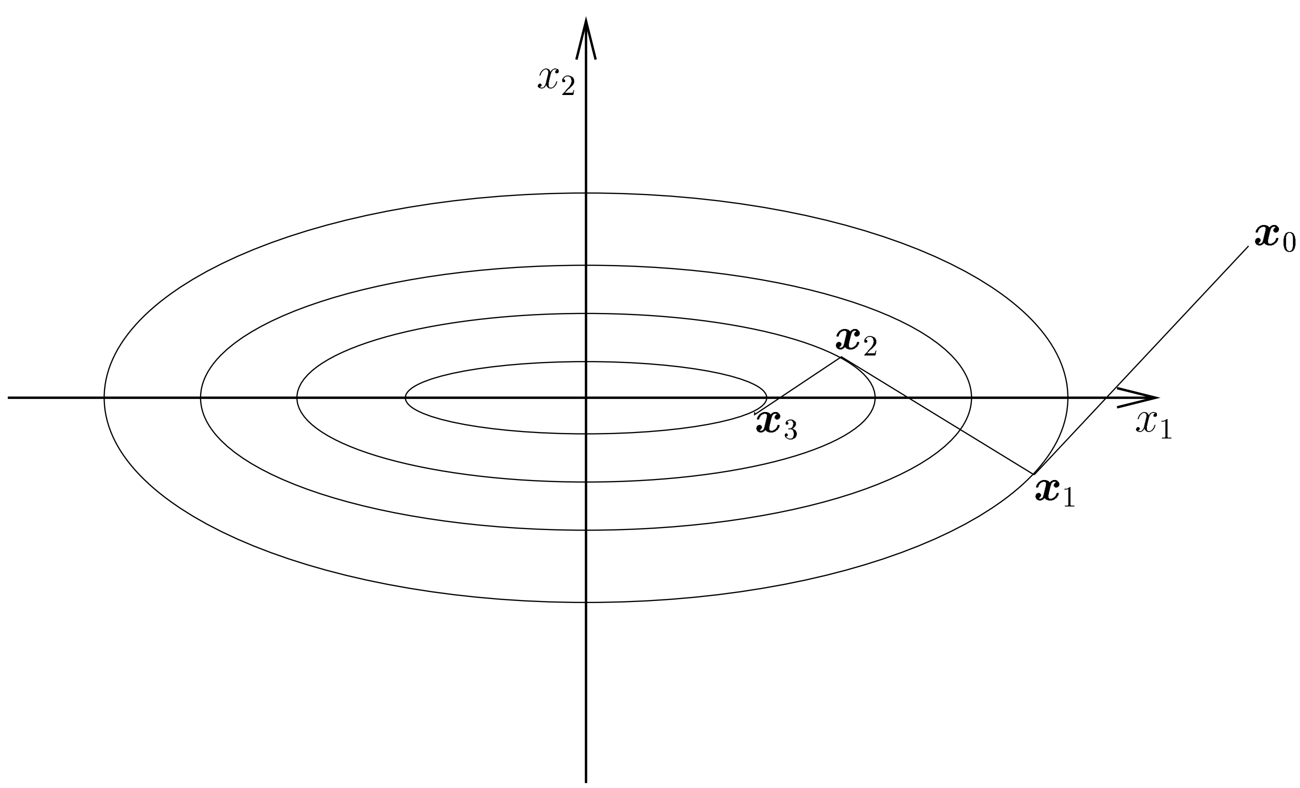
$$\lambda_m = \frac{\|r_m\|_2^2}{(Ar_m, r_m)}$$

$$x_{m+1} = x_m + \lambda_m r_m$$

Beispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix} \quad , \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad x_0 = \begin{pmatrix} 4 \\ \sqrt{1.8} \end{pmatrix}$$

Verfahren des steilsten Abstiegs (Gradientenverfahren)				
m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$\varepsilon_m := \|x_m - x^*\|_A$	$\varepsilon_m/\varepsilon_{m-1}$
0	4.000000e+00	1.341641e+00	7.071068e+00	
1	2.987552e+00	-3.562863e-01	4.372680e+00	6.183904e-01
2	1.529627e+00	5.130523e-01	2.704023e+00	6.183904e-01
3	1.142460e+00	-1.362463e-01	1.672142e+00	6.183904e-01
4	5.849394e-01	1.961946e-01	1.034036e+00	6.183904e-01
5	4.368842e-01	-5.210148e-02	6.394382e-01	6.183904e-01
6	2.236847e-01	7.502613e-02	3.954224e-01	6.183904e-01
7	1.670674e-01	-1.992395e-02	2.445254e-01	6.183904e-01
8	8.553851e-02	2.869049e-02	1.512122e-01	6.183904e-01
9	6.388768e-02	-7.619051e-03	9.350814e-02	6.183904e-01
10	3.271049e-02	1.097143e-02	5.782453e-02	6.183904e-01
20	2.674941e-04	8.972025e-05	4.728673e-04	6.183904e-01
30	2.187466e-06	7.336985e-07	3.866930e-06	6.183904e-01
40	1.788827e-08	5.999910e-09	3.162230e-08	6.183904e-01
50	1.462836e-10	4.906500e-11	2.585953e-10	6.183904e-01
60	1.196252e-12	4.012351e-13	2.114695e-12	6.183904e-01
70	9.782499e-15	3.281150e-15	1.729318e-14	6.183904e-01
71	7.306431e-15	-8.713427e-16	1.069393e-14	6.183904e-01
72	3.740893e-15	1.254734e-15	6.613026e-15	6.183904e-01



Probleme: Vergeßlichkeit

- Bei der Suche in Richtung p_m sind alle $p_0, \ldots, p_{m-1}$ vergessen.

Ziel:

- Wähle linear unabhängige $p_0, p_1, \ldots$

- Suche in Richtung p_m und finde die optimale Lösung aus $x_0+\text{span}\{p_0, \ldots, p_m\}$

Wirkung:

- spätestens für $m = n$ gilt $x_m = A^{-1}b$

Optimalität:

Sei $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ gegeben. Dann heißt $x \in \mathbb{R}^n$

1. optimale bzgl. $p \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$, falls
$$F(x) \leq F(x + \lambda p) \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}$$
gilt.

2. optimale bzgl. $U \subset \mathbb{R}^n$, falls
$$F(x) \leq F(x + \xi) \quad \forall \xi \in U$$
gilt.

Wann ist $x \in \mathbb{R}^n$ optimal bzgl. $U \subset \mathbb{R}^n$?

Betrachte

$$f_{x,\xi}(\lambda) = F(x + \lambda\xi)$$

$$f_{x,\xi}(\lambda) = (Ax - b, \xi) + \lambda(A\xi, \xi)$$

x ist optimal bzgl. $U \ni \xi \neq 0$

$$\iff \quad f_{x,\xi}(0) = 0$$

$$\iff \quad (Ax - b, \xi) = 0$$

$$\iff \quad \boxed{r \perp U}$$

Wann ist wird die Optimalität erhalten?

Sei $x_m \in x_0 + \underbrace{\text{span}\{p_0, \ldots, p_{m-1}\}}_{U_m :=}$.

Gilt x_m ist optimal bzgl. U_m und

$$x_{m+1} = x_m + \lambda_m p_m \quad , \quad \xi \in U_m$$

$$\Longrightarrow \quad (b - Ax_{m+1}, \xi) = \underbrace{(b - Ax_m, \xi)}_{=0} - \lambda_m (Ap_m, \xi)$$

Bedingung:

$$\boxed{(Ap_m, p_i) = 0 \quad \text{für } i = 0, \ldots, m-1}$$

Konjugiertheit:

Vektoren $p_0, \dots, p_m \in \mathbb{R}^n$ heißen
paarweise konjugiert oder A-orthogonal,
wenn

$$(Ap_j, p_i) = 0 \text{ für alle } i \neq j$$

gilt.

Wann erhalten wir Optimalität bzgl. U_{m+1}?

Optimalität bzgl. U_m:

$$(Ap_m, p_i) = 0 \quad , \quad i = 0, \dots, m-1$$

Optimalität bzgl. p_m: $\qquad (U_{m+1} = \{U_m, p_m\})$

$$0 = (b - Ax_{m+1}, p_m) = (b - Ax_m, p_m) - \lambda_m (Ap_m, p_m)$$

$$\Longrightarrow \qquad \lambda_m = \frac{(b - Ax_m, p_m)}{(Ap_m, p_m)}$$

Ostern und Weihnachten zusammen?

(liefert Konjugiertheit lineare Unabhängigkeit?)

Ann.: $p_0, \dots, p_m \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$ paarw.konj.,

$p_m \in \operatorname{span}\{p_0, \dots, p_{m-1}\}$

$$\Longrightarrow p_m = \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j p_j$$

$$\Longrightarrow 0 = (Ap_m, p_j) = \alpha_j \underbrace{(Ap_j, p_j)}_{\neq 0}, \; j = 0, \dots, m-1$$

$\Longrightarrow p_m = 0 \quad$ Widerspruch!!!

Antwort: Ja!

Zusammenfassung:

- Wähle paarweise konjugierte Suchrichtungen $p_0, \dots, p_{n-1}$
- Berechne

$$\lambda_m = \frac{(b - Ax_m, p_m)}{(Ap_m, p_m)} \quad , m = 0, \dots, n-1$$

$\Longrightarrow$ Dann gilt spätestens $x_n = A^{-1}b$.

Algorithmus: (Verf. der konj. Richtungen)

- Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$ und $p_0, \dots, p_{n-1}$ paarweise konjugiert
- $r_0 = b - Ax_0$
- Für $m = 0, \dots, n-1$

$$\begin{aligned} \lambda_m &= \frac{(b - Ax_m, p_m)}{(Ap_m, p_m)} \\ x_{m+1} &= x_m + \lambda_m p_m \\ r_{m+1} &= r_m - \lambda_m A p_m \end{aligned}$$

Probleme:

- Berechnung von $p_0, \dots, p_{n-1}$
- Fehlerreduktion

Das Vefahren der konj. Gradienten

Verf. d. steilsten Abstiegs

Gradienten als Suchrichtungen

\+ Problemangepaßt
– Konvergenzverhalten

Verf. d. konjug. Richtungen

Konjugiertheit der Suchrichtungen

\+ Optimalität
– Fehlerverlauf

Verf. d. konjug. Gradienten

Gradienten zur Berechnung konj. Suchrichtungen

\+ Problemangepaßt + Optimalität

Ansatz:

$$p_0 = r_0$$

$$p_m = r_m + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j p_j \quad , \quad m = 1, \ldots, n-1$$

- m Freiheitsgerade
- Berechnung von $\alpha_0, \ldots, \alpha_{m-1}$

$$0 = (Ap_m, p_i) = (Ar_m, p_i) + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j \underbrace{(Ap_j, p_i)}_{=0 \quad i \neq j}$$

$$\alpha_i = -\frac{(Ar_m, p_i)}{(Ap_i, p_i)} \quad , i = 0, \ldots, m-1$$

Eigenschaften und Folgerungen:

1. $U_m := \text{span}\{p_0, \dots p_{m-1}\}$
   $= \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{m-1}r_0\}$

   - $x_m = x_{m-1} + \lambda_{m-1}p_{m-1} = \dots$
     $= x_0 + \sum_{j=0}^{m-1} \lambda_j p_j$

   $\Longrightarrow \quad x_m \in x_0 + U_m \ = \ x_0 + K_m$

2. $r_m \perp U_m$

   - $r_m = b - Ax_m \perp U_m = K_m$

   $\Longrightarrow$ Orthogonale Krylov-Unterraum-Meth.

3. $x_m = A^{-1}b \Longleftrightarrow r_m = 0 \Longleftrightarrow p_m = 0$

   - $p_m = 0 \ \equiv$ Abbruchkriterium

4. $(Ar_m, p_j) = 0 \quad , j = 0, \dots, m-2$

   - $p_m = \quad r_m - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{(Ar_m, p_j)}{(Ap_j, p_j)} p_j$

     $p_m = \quad r_m - \frac{(Ar_m, p_{m-1})}{(Ap_{m-1}, p_{m-1})} p_{m-1}$

   - Anwendbar für große schwachbesetzte Matrizen

   - Geringer Rechenaufwand

Algorithmus:

- Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$
- $p_0 = r_0 = b - Ax_0$
- Für $m = 0, \dots, n-1$

$$\lambda_m = \frac{(r_m, p_m)}{(Ap_m, p_m)}$$

$$x_{m+1} = x_m + \lambda_m p_m$$

$$r_{m+1} = r_m - \lambda_m A p_m$$

$$p_{m+1} = r_{m+1} - \sum_{j=0}^{m} \frac{(Ar_{m+1}, p_j)}{(Ap_j, p_j)} p_j$$

Nachteile:

- Verfahrensabbruch bei $p_m = 0$
- Nicht anwendbar bei großen, schwachbesetzten Matrizen
- Sehr hoher Rechenaufwand

Algorithmus
- Verfahren der konjugierten Gradienten

—

Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$

$p_0 := r_0 := b - Ax_0$

Für $m = 0, \dots, n-1$

$p_m \neq 0$

Y

$$\lambda_m := \frac{(r_m, p_m)_2}{(Ap_m, p_m)_2}$$

$x_{m+1} := x_m + \lambda_m p_m$

$r_{m+1} := r_m - \lambda_m A p_m$

$$p_{m+1} := r_{m+1} - \frac{\left(Ar_{m+1}, p_m\right)_2}{(Ap_m, p_m)_2} p_m$$

N

STOP

Beispiel: 1-D Poisson-Gleichung

$$D = [0,1] \quad , \quad h = 1/8 \quad , \quad N = 7$$

$$\mathbb{R}^{7\times 7} \ni A = \text{tridiag}\,\{-64, 128, -64\}$$

$$\mathbb{R}^{7} \ni b = (128, -448, 704, -832, 512, 128, 320)^T$$

$$x_0 = 0$$

Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren)								
m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$x_{m,3}$	$x_{m,4}$	$x_{m,5}$	$x_{m,6}$	$x_{m,7}$	$\|r_m\|_2$
0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1336.36
1	0.58	-2.04	3.21	-3.79	2.33	0.58	1.46	363.57
2	-0.39	-1.72	2.81	-4.57	3.00	4.99	4.26	252.76
3	-0.01	-2.38	2.06	-3.53	4.87	6.07	6.25	153.30
4	-0.14	-2.88	2.57	-2.13	6.50	7.48	5.93	117.64
5	-0.70	-2.18	3.53	-1.12	7.65	7.81	6.27	103.52
6	0.13	-1.14	5.40	0.54	8.23	8.54	6.98	89.70
7	1.00	0.00	6.00	1.00	9.00	9.00	7.00	0.00