

**Blatt 12 zur Vorlesung Numerische Mathematik
Sommersemester 2020**

Abgabe bis 10. Juli, 23:59

Das CG-Verfahren Wir haben in der letzten Woche das Gradientenverfahren zur Lösung von LGS kennengelernt. Dieses Verfahren ist ein recht einfaches Iterationsverfahren und beruht auf der Minimierung des Funktionals

$$Q(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle.$$

Allerdings ist die Konvergenz des Verfahrens nicht überzeugend und kann bei dünn besetzten Matrizen mit einer Bandstruktur mit Bandbreite $m = \sqrt{n}$ nicht einmal die direkte LR-Zerlegung schlagen. Der Gesamtaufwand zum Lösen ist $O(n^2)$.

In dieser Woche wird mit dem CG-Verfahren ein wirklich leistungsfähiges Verfahren entwickelt. Wir erreichen den Aufwand $O(n^{\frac{3}{2}})$. Dies klingt nicht nach einem großen Fortschritt, aber für $n = 1\,000\,000$ ist der Aufwand um den Faktor 1000 geringer!

Zur Erinnerung an die Grundbegriffe überfliege man bei Bedarf die ersten Abschnitte von Kapitel 7 *Numerische Iterationsverfahren für lineare Gleichungssysteme* bis einschließlich Abschnitt 7.2 *Konvergenzkriterium für Jacobi- und Gauß-Seidel-Iteration*.

Vom Gradienten- zum CG-Verfahren Abschließend haben wir in Satz 7.23 hergeleitet, dass je zwei Abstiegsrichtungen im Gradientenverfahren orthogonal zueinander sind. Die übernächste Richtung ist hingegen wieder fast parallel, siehe Abbildung 7.2. Angenommen nun, alle Richtungen d_1, \dots, d_k seien paarweise orthogonal. Dann würden d_1, \dots, d_n den ganzen Raum \mathbb{R}^n aufspannen (eine Orthogonalbasis) und es wäre also möglich, jede denkbare Lösung als Linearkombinationen dieser Schritte darzustellen. Dies ist die Idee des CG-Verfahrens (*Conjugate Gradients*): Alle Abstiegsrichtungen sind orthogonal aufeinander und in jede Richtung wählen wir exakt die richtige Schrittweite, so dass der verbleibende Fehler orthogonal auf der bisherigen Richtung steht.

Um diese Idee zu verwirklichen sind zunächst noch einige technische Hilfsmittel notwendig:

- Wir müssen uns festlegen, in welchem Sinne wir "Orthogonalität" einfordern. Es wird sich zeigen, dass es günstiger ist, das A -Skalarprodukt

$$\langle x, y \rangle_A = \langle Ax, y \rangle_2,$$

als das Euklidische Skalarprodukt zu wählen.

- Wie orthogonalisieren wir? Prinzipiell mit dem Gram-Schmidt-Verfahren. Dieses ist jedoch aufwändig ($O(n^2)$ für n Vektoren, so könnten wir nie ein Verfahren mit $O(n^{\frac{3}{2}})$ Gesamtaufwand erreichen) und nicht fehleranfällig. Wir werden den Begriff des *Krylow-Raums* einführen und sehen, dass wir bei günstiger Wahl der Basisvektoren, mit denen wir die Orthogonalisierung durchführen, den Aufwand erheblich reduzieren können.

Man lese Abschnitt 7.8 *Das CG-Verfahren* bis einschließlich Satz 7.33 *CG als direkte Methode* und gebe kurze Antworten

1. Warum ist $\langle Ax, y \rangle$ in unserem Zusammenhang ein Skalarprodukt?
2. Im k -ten Schritt des Gradientenverfahrens wurde zur Suchrichtung d^k das Minimierungsproblem

$$Q(x^{k-1} + \omega d^k) = \min_{s \in \mathbb{R}} Q(x^{k-1} + s d^k)$$

betrachtet. Wie sieht das entsprechende Minimierungsproblem beim CG-Verfahren aus?

3. Wir betrachten $Ax = b$. Was ist der Krylow-Raum zum Startvektor $x^0 = 0$?
4. Beim CG-Verfahren werden die Suchrichtungen basierend auf der Sequenz

$$d, Ad, A^2d, A^3d, \dots$$

gebildet, wobei $d = b - Ax^0$ das erste Residuum ist. Diese Sequenz spannt den gesamten Suchraum auf. Es kann ja sein, dass die Sequenz schnell abbricht, dass also $\dim\{d, Ad, A^2d, \dots\} \ll n$ sehr klein ist. Im Extremfall, $A = I$ gilt $\dim\{d, Id, I^2d, \dots\} = \dim\{d\} = 1$. Wie kann es sein, dass wir mit diesem Ansatz dennoch alle möglichen Lösungen darstellen können?

5. Was ist der Aufwand zum Erstellen einer A -orthogonalen Basis der Sequenz

$$d, Ad, A^2d, \dots, A^{m-1}d?$$

Wie groß wäre der Aufwand mit dem klassischen Gram-Schmidt Verfahren?

6. Wieso könnte man das CG-Verfahren auch als direkte Methode bezeichnen?

Analyse des CG-Verfahrens Prinzipiell wird nach n Schritten des CG-Verfahrens die Lösung gefunden. Ist die Matrix A dünn besetzt mit $O(1)$ Einträgen pro Zeile, so benötigt jeder Schritt $O(n)$ Operationen, d.h. der Aufwand des CG-Verfahrens ist maximal $O(n^2)$. Im Allgemeinen wollen wir jedoch mit weitaus weniger Schritten auskommen. Man lese weiter nach Satz 7.33 bis vor *Beispiel 7.36 LGS mit der Modellmatrix* und gebe kurze Antworten (Der Beweis zu Hilfsatz 7.34 kann übersprungen werden)

1. Welche Gründe gibt es, das CG-Verfahren nicht als direkte Methode einzusetzen?

2. Wieso kann die k -te Iteration des CG-Verfahrens als $x^k = x^0 + p_{k-1}(A)d^0$ geschrieben werden mit einem Polynom $p \in P_{k-1}$?

3. Wieso gilt

$$\|b - Ax^k\|_{A^{-1}} = \|x - x^k\|_A,$$

wobei x die exakte Lösung zu $Ax = b$ ist?

4. Die Formel vor (7.19)

$$\|x - x^k\|_A = \min_{q \in P_{k-1}} \|[I - q(A)A](x - x^0)\|_A$$

ist die für das CG-Verfahren wesentliche Charakterisierung der Lösung als Minimierung über alle Polynome des P_{k-1} . Hier wird ein Polynom aus dem P_{k-1} gesucht. Warum wird in der folgenden Gleichung (7.20) ein Polynom aus dem P_k gesucht und warum muss $q(0) = 1$ gelten?

5. Eine Anwendung von Hilfsatz 7.34, der im Buch nicht korrekt formuliert ist. Es müsste heißen

Hilfsatz 7.34 Es sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit mit Eigenwerten $0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$, $p \in P_k$ ein Polynom mit $p(0) = 1$. Dann gilt

$$\|p(A)\|_A \leq M := \sup_{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_n]} |p(\lambda)|$$

Wir betrachten

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

sowie das Polynom $p(x) = 1 + x + x^2$. Man gebe eine Schranke für

$$\|p(A)\|_A$$

an.

6. Obwohl Satz 7.34 falsch formuliert war, ist der Beginn (und hoffentlich auch der Rest) des Beweises zu Satz 7.35 korrekt. Hier wird

$$M = \min_{q \in P_k, q(0)=1} \max_{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_n]} |q(\lambda)|$$

definiert. Warum ist hier das Minimum über alle Polynome korrekt?

7. Der folgende Teil des Beweises nutzt Details der Tschebyscheff-Approximation, insbesondere die Darstellung der Tschebyscheff-Polynome als $T_k = \cos(k \arccos(x))$ und in der Kürze der Zeit, die für die Tschebyscheff-Approximation zur Verfügung stand, sicher einfach zu durchdringen. Man versuche dennoch zu überlegen,

- a) was genau die Minimierungseigenschaft von T_k auf $[-1, 1]$ ist.
b) warum uns die Substitution

$$x \mapsto \frac{\lambda_n + \lambda_1 - 2t}{\lambda_n - \lambda_1}$$

weiter hilft.

8. In welcher Hinsicht ist die Konvergenzgeschwindigkeit

$$\rho = 1 - O(\sqrt{\kappa})$$

doppelt so schnell wie

$$\rho = 1 - O(\kappa)$$

Vergleich Man lese *Beispiel 7.36 LGS mit der Modellmatrix*.

Übungsaufgaben

Programmieraufgabe 12.1

Man implementiere das CG-Verfahren und wiederhole Aufgabe 11.2. Man vergleiche in Aufgabenteil c) den Aufwand und die Anzahl der Schritte von CG-Verfahren und Gradientenverfahren.