

Abbildung 5.5: (a) Konvergenz des Jacobi-, Gauß-Seidel- (GS) und des SOR-Verfahrens in Abhängigkeit vom Relaxationsfaktor ω (als Zahlen angegeben) für die Poisson-Gleichung $\nabla^2\phi = -1$, die auf $K_i \times K_j = 41 \times 41$ (inneren) Punkten mit zentralen finiten Differenzen auf einem Quadrat mittels finiter Differenzen nach (5.58) diskretisiert wurde. Die Anfangsbedingung und Randbedingungen sind $\phi(t = 0) \equiv 0$ und $\phi(\text{Rand}) = 0$. Für $\omega = 1.9$ ist man schon oberhalb des Optimums, da die Konvergenz nicht mehr monoton ist. Das (langsame) Gauß-Seidel-Verfahren (GS) entspricht $\omega = 1$. (b) Logarithmische Auftragung des mittleren RMS-Inkrementes $\Delta\phi_{\text{RMS}}^{(n)} := \sqrt{(K_i K_j)^{-1} \sum_{l=1}^{K_i K_j} (\phi_l^{(n+1)} - \phi_l^{(n)})^2}$.

der die Anzahl der Iterationen ja linear mit der Anzahl der Unbekannten ansteigt.

Das typische Konvergenzverhalten der drei elementaren Methoden ist in Abb. 5.5 für die Lösung von $\nabla^2\phi = -1$ auf dem Einheitsquadrat dargestellt. Abbildung 5.6 zeigt die Entwicklung der iterierten Lösung für das Gauß-Seidel-Verfahren. Insbesondere erkennt man, daß kurzweilige Schwankungen schnell gedämpft werden, was den Gauß-Seidel-Operator auch zu einem guten *Glättungsoperator* für Mehrgitterverfahren macht.

5.3 Minimierungsverfahren

Eine Klasse von iterativen Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme basiert auf Ideen zur Lösung nichtlinearer Probleme. Diese kann man entweder mit dem *Newton-Verfahren* (siehe Kap. 2.5.6) oder dessen Varianten lösen, oder mit einem *Abstiegsverfahren* (*descent method*). Verfahren nach dem Newton-Typ konvergieren sehr schnell, haben aber einen recht kleinen Konvergenzradius, d.h. man benötigt schon eine recht gute Anfangsschätzung, damit das Newton-Verfahren konvergiert. Abstiegsverfahren konvergieren dagegen langsam, dafür aber garantiert!

Um ein Abstiegsverfahren zur Lösung eines linearen Problems

$$A \cdot \vec{x} = \vec{b} \tag{5.65}$$

verwenden zu können, muß dieses zunächst in ein Minimierungsproblem überführt

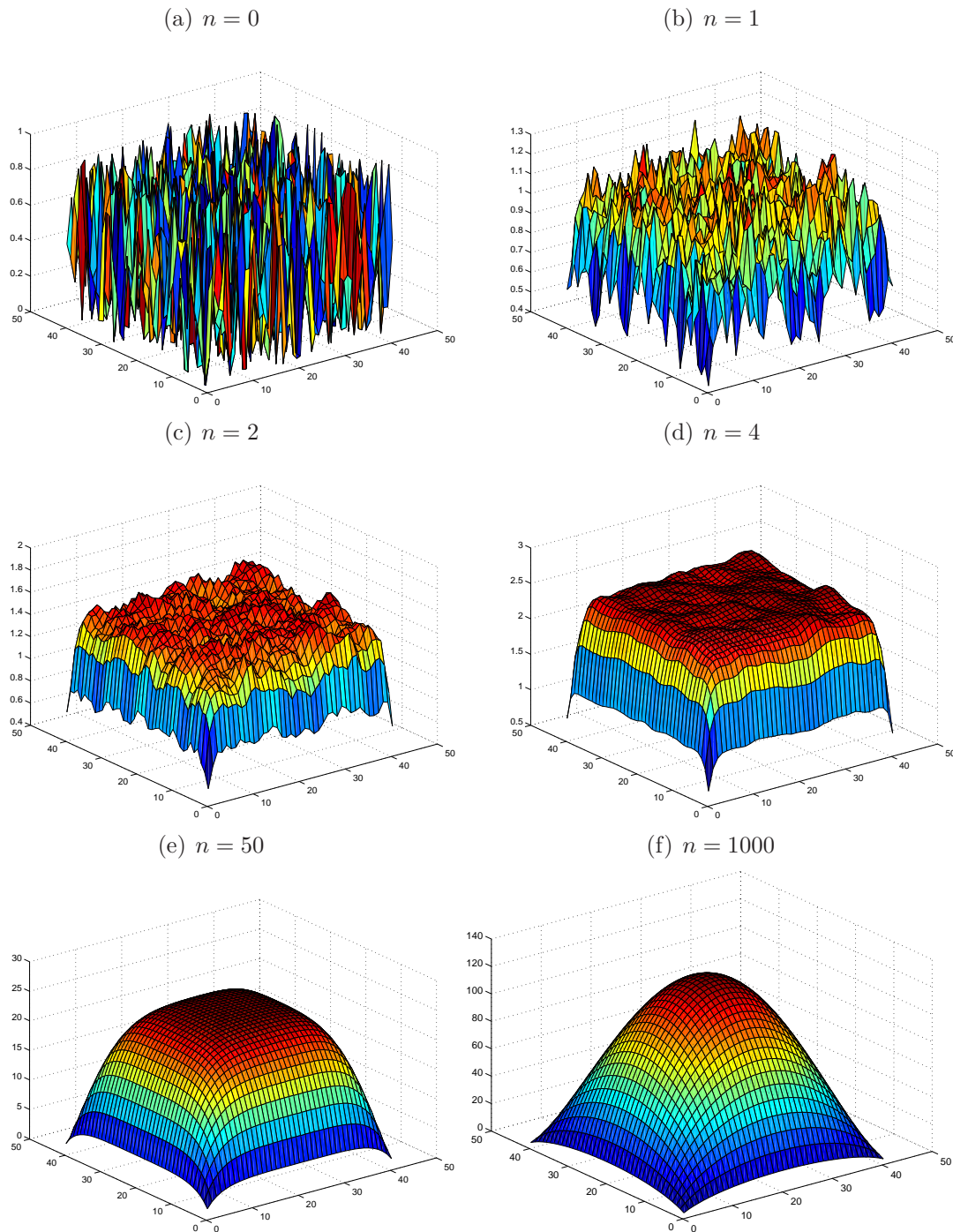


Abbildung 5.6: Gauß-Seidel-Iteration von $\nabla^2\phi = -1$ auf einem Quadrat mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen und einem Gitter von 41×41 internen Punkten. Gezeigt sind die zufälligen Anfangsbedingung ($n = 0$) auf dem Definitionsbereich $[0, 1] \times [0, 1]$ (a), sowie die Approximationen der Lösung ϕ nach $n = 1$ (b), $n = 2$ (c), $n = 4$ (d), $n = 50$ (e) und $n = 1000$ (f) Iterationen. Man erkennt die guten Glättungseigenschaften der Gauß-Seidel-Iteration nach nur wenigen Iterationsschritten. Beachte die unterschiedlichen Skalen.

werden. Falls \mathbf{A} *symmetrisch* und *positiv definit* ist,¹³ dann ist das Minimum der skalaren Funktion

$$F(\vec{x}) = \frac{1}{2} \vec{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x} - \vec{x} \cdot \vec{b} \quad (5.66)$$

identisch mit der Lösung des linearen Systems. Dies folgt aus der Bedingung, daß am Minimum von F alle partiellen Ableitungen nach den N Unbekannten verschwinden müssen. Diese Bedingung liefert¹⁴

$$0 \stackrel{!}{=} \nabla F(\vec{x}) = \nabla \left(\frac{1}{2} \vec{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x} - \vec{x} \cdot \vec{b} \right) = \frac{1}{2} (\vec{x} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \vec{x}) - \vec{b} \stackrel{\mathbf{A} \text{ symm.}}{=} \mathbf{A} \cdot \vec{x} - \vec{b}. \quad (5.67)$$

Angenommen, wir haben eine Approximation $\vec{x}^{(n)}$ der Lösung. Dann ist $\vec{\rho}^{(n)} = \vec{b} - \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n)}$ das zugehörige Residuum. Wir möchten nun die Approximation durch eine Korrektur verbessern, wobei wir ein Stück in eine Richtung gehen, die wir mit $\vec{p}^{(n)}$ bezeichnen. Deshalb setzen wir für die neue Lösung an

$$\vec{x}^{(n+1)} = \vec{x}^{(n)} + \alpha^{(n)} \vec{p}^{(n)}. \quad (5.68)$$

5.3.1 Bestimmung der Schrittweite

Offenbar ist es sinnvoll, die skalare Schrittweite $\alpha^{(n)}$ so zu wählen, daß F entlang der gewählten Richtung $\vec{p}^{(n)}$ minimal wird. Wir fordern also

$$F(\vec{x}^{(n)} + \alpha^{(n)} \vec{p}^{(n)}) = \min_{\alpha} [F(\vec{x}^{(n)} + \alpha \vec{p}^{(n)})]. \quad (5.69)$$

Die Minimierung können wir leicht durchführen. Zunächst einmal ist die zu minimierende Funktion (\mathbf{A} ist symmetrisch)

$$\begin{aligned} F(\vec{x}^{(n)} + \alpha \vec{p}^{(n)}) &= \frac{1}{2} \vec{x}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n)} + \alpha \vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n)} + \frac{\alpha^2}{2} \vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)} \\ &\quad - (\vec{x}^{(n)} + \alpha \vec{p}^{(n)}) \cdot \vec{b}. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Die Bedingung $\partial F / \partial \alpha|_{\alpha_{\min}} = 0$ liefert dann die lineare Gleichung in α

$$\left[-\vec{p}^{(n)} \cdot \vec{b} + \alpha \vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)} + \vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n)} \right]_{\alpha_{\min}} = 0. \quad (5.71)$$

Nach $\alpha^{(n)} = \alpha_{\min}$ aufgelöst ergibt sich

$$\alpha^{(n)} = \frac{\vec{p}^{(n)} \cdot \vec{b} - \vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}} = \frac{\vec{p}^{(n)} \cdot \vec{\rho}^{(n)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}}. \quad (5.72)$$

Damit erhalten wir die Iteration

$$\vec{x}^{(n+1)} = \vec{x}^{(n)} + \alpha^{(n)} \vec{p}^{(n)}, \quad (5.73)$$

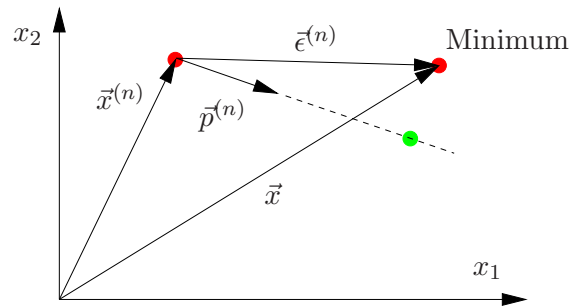


Abbildung 5.7: Beispiel für eine mögliche Orientierung der Richtung $\vec{p}^{(n)}$. Der grüne Punkt (\bullet) soll die Stelle andeuten, an der $F(\vec{x})$ entlang der Richtung $\vec{p}^{(n)}$ ein Minimum hat. $\vec{e}^{(n)} = \vec{x} - \vec{x}^{(n)}$ ist der Fehler.

mit $\alpha^{(n)}$ nach (5.72). Die Vektoren sind in in Abb. 5.7 illustriert. Die Richtung $\vec{p}^{(n)}$ haben wir bisher allerdings noch nicht festgelegt.

Da die Lösung des linearen Problems $\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ eindeutig ist, besitzt F auch nur ein Extremum. Dies ist klar, da F nur quadratisch von \vec{x} abhängt.¹⁵

5.3.2 Methode des steilsten Abstiegs

Die einfachste Wahl der Richtung besteht darin, $\vec{p}^{(n)} = \vec{\rho}^{(n)}$ zu setzen. Dann zeigt $\vec{p}^{(n)}$ in die Richtung des negativen Gradienten $-\nabla F(\vec{x}^{(n)})$ (vgl. (5.67) und (5.46)). Zusammen mit $\alpha^{(n)}$ nach (5.72) erhalten wir so das *steepest-descent*-Verfahren, was auch als *Richardson-Verfahren* bekannt ist.

Dieses Verfahren ist eng mit dem Jacobi-Verfahren verwandt und konvergiert ähnlich langsam. Insbesondere wenn die Gradienten in verschiedenen Richtungen eine sehr unterschiedliche Größenordnungen besitzen (in zwei Dimensionen 2D zum Beispiel ein sehr enges Tal), kann es sein, daß die Iteration immer in Richtung der stärksten Änderung hin und her pendelt und nicht hinreichend schnell in den anderen Richtungen voran kommt.

Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Richtungen \vec{p} periodisch alle N orthogonalen Richtungen \vec{e}_i durchlaufen zu lassen, die den Raum der Unbekannten aufspannen, wobei α nach (5.72) gewählt wird. Man kann zeigen, daß dann N Schritte äquivalent sind zu einem Gauß-Seidel-Iterationsschritt. Außerdem kann man $\alpha^{(n)}$ mit einem Relaxationsfaktor ω multiplizieren. Aufgrund der quadratischen Symmetrie des Minimums von F muß allerdings $0 < \omega < 2$ sein, damit sich F in dem Iterationsschritt auch verringert.

¹³Eine Matrix \mathbf{A} ist positiv definit, wenn für alle $\vec{x} \neq 0$ mit $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$ gilt $\vec{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x} > 0$. Reelle symmetrische Matrizen haben reelle Eigenwerte. Sie sind positiv definit, wenn all Eigenwerte positiv sind.

¹⁴ ∇ ist hier der N -dimensionale ∇ -Operator $(\partial_1, \partial_2, \dots, \partial_N)^T$. Beachte $\nabla \vec{x} = \mathbf{I} = \delta_{i,j}$.

¹⁵Bei der Minimierung anderer nichtlinearer Funktionen können natürlich mehrere Extrema existieren. Es hängt dann von den Anfangswerten ab, zu welchem Minimum die Iteration führt.

5.3.3 Konjugierte Gradienten

A-Orthogonalität

Eine wichtige Variante besteht darin, die N Richtungen $\vec{p}^{(n)}$ so zu wählen, daß für sie gilt

$$\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(m)} = 0, \quad \text{für } n \neq m. \quad (5.74)$$

Die N Vektoren $\vec{p}^{(n)}$ bezeichnet man dann als *A-orthogonal*. Man sagt auch: Die Richtungen $\vec{p}^{(n)}$ und $\vec{p}^{(m)}$, für welche (5.74) gilt, sind *konjugiert* zu einander.

Für die so definierten N konjugierten Richtungsvektoren $\vec{p}^{(n)}$ kann man den folgenden Satz beweisen:

Satz: Wenn \mathbf{A} symmetrisch und positiv definit ist und wenn $\vec{p}^{(n)} \neq 0$ für alle $n = 0, \dots, N - 1$ und wenn man die Schrittweiten nach (5.72) wählt, dann konvergiert die Iteration (5.73) für jeden Startvektor \vec{x}_0 in höchstens $N - 1$ Iterationen gegen die gesuchte Lösung des linearen Problems.

Man hat also nach spätestens $N - 1$ Iterationen die Lösung bis auf Rundungsfehler gefunden. Damit ist das Verfahren der konjugierten Richtungen also eher ein direktes Verfahren.

Diesen Satz kann man allein mit Hilfe von (5.72) und (5.73) beweisen. Dazu untersuchen wir zunächst, wie das Residuum im Schritt $n + 1$ von dem vorangegangenen Residuum im Schritt n abhängt:

$$\begin{aligned} \vec{\rho}^{(n+1)} \cdot \vec{p}^{(j)} &= (\vec{b} - \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n+1)}) \cdot \vec{p}^{(j)} = \left(\underbrace{\vec{b} - \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n)}}_{\vec{\rho}^{(n)}} - \alpha^{(n)} \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)} \right) \cdot \vec{p}^{(j)} \\ &\stackrel{(5.72)}{=} \vec{\rho}^{(n)} \cdot \vec{p}^{(j)} - \frac{\vec{p}^{(n)} \cdot \vec{\rho}^{(n)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}} \vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(j)} = \begin{cases} \vec{\rho}^{(n)} \cdot \vec{p}^{(j)}, & n \neq j, \\ 0, & n = j. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.75)$$

Dies bedeutet, daß sich die Komponente des Residuums in jede feste \mathbf{A} -konjugierte Richtung $\vec{p}^{(j)}$ i.a. nicht ändert ($n \neq j$). Sie ändert sich nur in einem Fall, nämlich wenn $n = j$ ist, und in diesem Fall wird die betreffende Komponente des Residuums zu Null. Damit gilt für alle $j = 0, \dots, N - 1$ konjugierten Richtungen

$$\vec{\rho}^{(N)} \cdot \vec{p}^{(j)} = \vec{\rho}^{(N-1)} \cdot \vec{p}^{(j)} = \dots = \vec{\rho}^{(j+1)} \cdot \vec{p}^{(j)} = 0, \quad (5.76a)$$

$$\vec{\rho}^{(j)} \cdot \vec{p}^{(j)} = \vec{\rho}^{(j-1)} \cdot \vec{p}^{(j)} = \dots = \vec{\rho}^{(0)} \cdot \vec{p}^{(j)} \stackrel{\text{i.a.}}{\neq} 0. \quad (5.76b)$$

Das heißt, daß sich die Komponente des Residuums $\vec{\rho}^{(n)}$ in Richtung $\vec{p}^{(j)}$ im Laufe der Iteration solange nicht ändert, bis $n = j$ ist. In diesem Schritt wird die Komponente des Residuums $\vec{\rho}^{(n)}$ in Richtung $\vec{p}^{(j)}$ zu Null gemacht. Danach bleibt diese Komponente Null. Da die Richtungen $\vec{p}^{(j)}$ linear unabhängig sind, kann man folgern, daß $\vec{\rho}^{(N)} = 0$ ist. Eventuell wird dies aber schon für ein $n < N$ erreicht.

Wenn man das Residuum $\vec{\rho}^{(n)} = \sum_{j=0}^{N-1} R_j \vec{p}^{(j)}$ durch die konjugierten Richtungen darstellt, ergibt sich für einen Iterationsschritt das folgende Bild für die Koeffizient R_j

$$(0, \dots, 0, R_j, R_{j+1}, \dots) \longrightarrow (0, \dots, 0, 0, R_{j+1}, \dots). \quad (5.77)$$

Hierbei bleiben alle Entwicklungskoeffizienten R_j bis auf einen ungeändert. Dies gilt natürlich nicht für die kartesischen Komponenten von $\vec{\rho}^{(n)}$.

Um die konjugierten Richtungsvektoren zu bestimmen, könnte man die N orthogonalen Eigenvektoren $\vec{\psi}^{(n)}$ von \mathbf{A} verwenden.¹⁶ Sie sind offenbar \mathbf{A} -orthogonal, denn es ist

$$\vec{\psi}^{(m)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{\psi}^{(n)} = \lambda_n \vec{\psi}^{(m)} \cdot \vec{\psi}^{(n)} = 0 \quad \text{für } n \neq m. \quad (5.78)$$

Die Bestimmung der Eigenvektoren oder die \mathbf{A} -Orthogonalisierung eines Satzes von linear unabhängigen Vektoren ist jedoch zu aufwendig.

Gram-Schmidt-Orthogonalisierung

Eine andere, effizientere Methode ist die *Gram-Schmidt-Orthogonalisierung*. Dabei nimmt man in jedem Schritt eine neue Raumrichtung hinzu, zieht aber davon alle vektoriellen Anteile ab, deren Richtungen schon von den vorherigen Vektoren abgedeckt werden. Es sei also eine Sequenz von linear unabhängigen Vektoren \vec{a}_i gegeben. Dann generiert man eine Sequenz von orthogonalen Richtungsvektoren \vec{p}_i (hier normieren wir sie) mittels der folgenden Gram-Schmidt-Orthogonalisierung

$$\begin{aligned} \vec{v}_0 &= \vec{a}_0 & \vec{p}_0 &= \vec{v}_0 / \|\vec{v}_0\|, \\ \vec{v}_1 &= \vec{a}_1 - (\vec{a}_1 \cdot \vec{p}_0) \cdot \vec{p}_0 & \vec{p}_1 &= \vec{v}_1 / \|\vec{v}_1\|, \\ \vec{v}_2 &= \vec{a}_2 - (\vec{a}_2 \cdot \vec{p}_0) \cdot \vec{p}_0 - (\vec{a}_2 \cdot \vec{p}_1) \cdot \vec{p}_1 & \vec{p}_2 &= \vec{v}_2 / \|\vec{v}_2\|, \\ \vec{v}_3 &= \dots \end{aligned} \quad (5.79)$$

Diese Strategie wollen wir jetzt verwenden, wobei wir aber nicht orthogonalisieren, sondern \mathbf{A} -orthogonalisieren. Damit ist es möglich, die konjugierten Richtungen, die man nicht *a priori* kennt, im Laufe der Iteration zu generieren.

Als anfängliche Richtung $\vec{p}^{(0)}$ wählt man das anfängliche Residuum: $\vec{p}^{(0)} = \vec{\rho}^{(0)}$. Dann berechnet man $\vec{x}^{(1)}$ gemäß (5.73) wie beim *steepest descent*. Um die neue Richtung $\vec{p}^{(1)}$ zu gewinnen, die \mathbf{A} -orthogonal ist zu $\vec{p}^{(0)}$, oder allgemeiner, die Richtung im Schritt $n + 1$, geht man vom Gradienten $-\nabla F(\vec{x}^{(n+1)}) = \vec{\rho}^{(n+1)}$ aus und

¹⁶Symmetrische positiv definite Matrizen haben orthogonale Eigenvektoren. — Nur wenn die Matrizen nicht *normal* sind, sind die linear unabhängigen Eigenvektoren nicht orthogonal. Wann ist nun ein Matrix \mathbf{A} normal? Eine Matrix ist genau dann normal, wenn sie mit der adjungierten Matrix \mathbf{A}^\dagger vertauscht. Mathematisch bedeutet das

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^\dagger \cdot \mathbf{A}.$$

Die adjungierte Matrix ist definiert als das Transponierte und Konjugiert-komplexe von \mathbf{A} . Offenbar sind symmetrische reelle Matrizen immer selbstadjungiert: $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$ und damit auch normal.

setzt an

$$\vec{p}^{(n+1)} = -\nabla F(\vec{x}^{(n+1)}) + \sum_{j=0}^n \beta_{n+1,j} \vec{p}^{(j)} = \vec{\rho}^{(n+1)} + \sum_{j=0}^n \beta_{n+1,j} \vec{p}^{(j)}. \quad (5.80)$$

Zur Bestimmung der Koeffizienten $\beta_{n+1,j}$ verwendet man nun die Forderung, daß die neue Richtung $\vec{p}^{(n+1)}$ bezüglich aller alten Richtungen $\vec{p}^{(l)}$, $l \leq n$, \mathbf{A} -orthogonal ist. Dazu wird (5.80) mit $\vec{p}^{(l)} \cdot \mathbf{A} \cdot$ von links multipliziert. Wir erhalten so

$$\begin{aligned} 0 \stackrel{l \leq n}{=} \vec{p}^{(l)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n+1)} &= \vec{p}^{(l)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(n+1)} + \sum_{j=0}^n \beta_{n+1,j} \underbrace{\vec{p}^{(l)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(j)}}_{\sim \delta_{l,j}} \\ &= \vec{p}^{(l)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(n+1)} + \beta_{n+1,l} \vec{p}^{(l)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(l)}. \end{aligned} \quad (5.81)$$

Die Summe reduziert sich hier auf nur einen Summanden, da wir im Sinne einer Induktion annehmen können, daß die $\vec{p}^{(j)}$ für $j = 0, \dots, n$ schon \mathbf{A} -orthogonal sind. Damit folgt

$$\beta_{n+1,l} = -\frac{\vec{p}^{(l)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(n+1)}}{\vec{p}^{(l)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(l)}}. \quad (5.82)$$

Unter Verwendung von (5.72) und (5.73) kann man nach einiger Rechnung zeigen, daß nur der Koeffizient $\beta_{n+1,n}$ in (5.80) eingeht, also nur der Summand mit $l = n$.¹⁷ Damit ist

$$\vec{p}^{(n+1)} = \vec{\rho}^{(n+1)} + \beta_{n+1,n} \vec{p}^{(n)} = \vec{\rho}^{(n+1)} - \frac{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(n+1)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}} \vec{p}^{(n)}. \quad (5.83)$$

Damit kann man die \mathbf{A} -orthogonalen Richtungen durch die einfache Rekursion erhalten

$$\vec{p}^{(0)} = -\nabla F(\vec{x}^{(0)}) = \vec{\rho}^{(0)}, \quad (5.84a)$$

$$\vec{p}^{(n+1)} = \vec{\rho}^{(n+1)} - \frac{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(n+1)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}} \vec{p}^{(n)}. \quad (5.84b)$$

Diese Richtungen werden im Laufe der Iteration (5.73) erzeugt. Wenn man schon alle Richtungen bis $\vec{p}^{(n)}$ iteriert hat, geht in die Berechnung der Suchrichtung $\vec{p}^{(n+1)}$ nur die jeweils letzte Suchrichtung $\vec{p}^{(n)}$ ein, sowie das aktuelle und das letzte Residuum. Dies wirkt sich natürlich günstig auf die Rechenzeit aus. Wenn $-\nabla F(\vec{x}^{(n+1)}) = \vec{\rho}^{(n+1)} = 0$ ist, bricht die Iteration ab und man ist am Extremum von F bzw. an der Lösung $\vec{x} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \vec{b}$ angelangt.

Krylov-Räume

Die Menge der Suchrichtungen $\{\vec{p}^{(j)}\}$, $j = 0, \dots, n-1 \leq N-1$, spannen einen n -dimensionalen Unterraum \mathcal{V}_n des gesamten Lösungsraumes auf. Bei jedem Iterationsschritt wird eine neue Dimension eröffnet. Dies liegt, wie bei der Gram-Schmidt-Orthogonalisierung (5.79), an dem ersten Summanden $\vec{\rho}^{(n+1)}$ in (5.84b). Denn der

¹⁷Siehe Anhang C.

zweite Summand zeigt ja nur in die alte Richtung $\vec{p}^{(n)}$. Der erste Summand lautet

$$\begin{aligned} \vec{\rho}^{(n+1)} &= \vec{b} - \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n+1)} = \vec{b} - \mathbf{A} \cdot (\vec{x}^{(n)} + \alpha^{(n)} \vec{p}^{(n)}) = \underbrace{\vec{b} - \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(n)}}_{\vec{\rho}^{(n)}} - \alpha^{(n)} \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)} \\ &= \vec{\rho}^{(n)} - \alpha^{(n)} \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}. \end{aligned} \tag{5.85}$$

Hieran sieht man, daß das Residuum $\vec{\rho}^{(n+1)}$ im Laufe der Iteration bei jedem Schritt $n \rightarrow n + 1$ in einem größeren Unterraum des \mathbb{R}^N betrachtet wird. Die jeweils neu hinzugekommene Richtung ist durch $\mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}$ gegeben. Dasselbe gilt wegen (5.84b) für $\vec{p}^{(n+1)}$. Der erste Summand $\vec{\rho}^{(n)}$ in (5.85) stellt keine neue Richtung dar, denn $\vec{\rho}^{(n)}$ wird durch dieselbe Gleichung (5.85) beschrieben, nur mit einem um 1 reduzierten Index, und es gilt $\vec{p}^{(0)} = \vec{\rho}^{(0)}$. Daher sind $\vec{\rho}^{(n)}$ und $\vec{p}^{(n)}$ in demselben Unterraum des \mathbb{R}^N enthalten. In Tabelle 5.1 sind die Abhängigkeiten skizziert.

Man schreibt nun den n -ten Unterraum \mathcal{V}_n in der folgenden Form auf

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_n &= \text{span} \{ \vec{\rho}^{(0)}, \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(0)}, \mathbf{A}^2 \cdot \vec{\rho}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{(n-1)} \cdot \vec{\rho}^{(0)} \} \\ &= \text{span} \{ \mathbf{A}^j \vec{\rho}^{(0)} \mid 0 \leq j \leq n - 1 \}. \end{aligned} \tag{5.86}$$

Diese Unterräume sukzessive höherer Dimension nennt man nach dem russischen Schiffsbauingenieur Krylov *Krylov-Unterräume*. Die Vektoren $\mathbf{A}^j \vec{\rho}^{(0)}$ mit $j \leq n$ sind nicht \mathbf{A} -orthogonal. Sie spannen aber denselben Unterraum auf, wie die \mathbf{A} -orthogonalen Suchrichtungen $\vec{p}^{(j)}$ mit $j \leq n$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_n &= \text{span} \{ \vec{\rho}^{(0)}, \vec{\rho}^{(1)}, \dots, \vec{\rho}^{(n)} \} \\ &= \text{span} \{ \vec{\rho}^{(0)}, \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{(n-1)} \cdot \vec{\rho}^{(0)} \} \\ &= \text{span} \{ \vec{p}^{(0)}, \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{(n-1)} \cdot \vec{p}^{(0)} \} \end{aligned} \tag{5.87}$$

Dies kann man mittels Induktion und (5.85) zeigen: Angenommen es gilt

$$\vec{\rho}^{(n)}, \vec{p}^{(n)} \in \text{span} \{ \vec{\rho}^{(0)}, \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{(n-1)} \cdot \vec{\rho}^{(0)} \}, \tag{5.88}$$

dann folgt nach (5.85)

$$\vec{\rho}^{(n+1)} \in \text{span} \{ \vec{\rho}^{(0)}, \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{(n)} \cdot \vec{\rho}^{(0)} \}, \tag{5.89}$$

Tabelle 5.1: Skizze der entscheidenden Abhängigkeiten von $\vec{p}^{(n+1)}$.

n	$\vec{p}^{(n)}$	neue Richtung in $\vec{p}^{(n+1)}$
0	$\vec{\rho}^{(0)}$	$\vec{p}^{(1)} = \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(0)} = \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(0)}$
1	$\vec{\rho}^{(1)} + (\sim \vec{p}^{(0)})$	$\vec{p}^{(2)} = \dots \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(1)} \dots = \dots \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(1)} \dots$
\vdots		
n	$\vec{\rho}^{(n-1)} + \dots$	$\vec{p}^{(n+1)} = \dots \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)} \dots = \dots \mathbf{A} \cdot \vec{\rho}^{(n)} \dots$

und dann ist auch $\vec{p}^{(n+1)}$ aus diesem Unterraum.

Im Laufe der Iteration wird das Residuum in der Krylov-Unterräumen mit wachsender Dimension $\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2, \dots, \mathcal{V}_N$ zum Verschwinden gebracht. Wegen (5.76) bleiben diejenigen Komponenten des Residuums, die in einem Schritt eliminiert wurden, auch weiterhin Null, wenn man weiteriteriert und zum nächsthöheren Krylov-Unterraum übergeht. Die Iteration bricht damit nach höchstens N Schritten ab. Dann ist $\vec{r}^{(n)} = 0$.

CG-Algorithmus und Abwandlungen

Damit stellt sich der Algorithmus folgendermaßen dar:¹⁸¹⁹

CG-Algorithmus:

SELECT $\vec{x}^{(0)}$ (Startwert)

SET $\vec{p}^{(0)} = \vec{r}^{(0)} = \vec{b} - \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(0)}$ (1. Suchrichtung)

LOOP: $n = 0, 1, \dots$

$$\alpha^{(n)} = \frac{\vec{p}^{(n)} \cdot \vec{r}^{(n)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}} = \frac{\vec{r}^{(n)} \cdot \vec{r}^{(n)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}} \quad \text{(Schrittweite) (5.72)}$$

$$\vec{x}^{(n+1)} = \vec{x}^{(n)} + \alpha^{(n)} \vec{p}^{(n)} \quad \text{(Iteration) (5.73)}$$

$$\vec{r}^{(n+1)} = \vec{r}^{(n)} - \alpha^{(n)} \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)} \quad \text{(Residuum)}$$

IF $|\vec{r}^{(n+1)}|^2 < \epsilon$ STOP

$$\beta^{(n)} = -\frac{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{r}^{(n+1)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}} = -\frac{\vec{r}^{(n+1)} \cdot \vec{r}^{(n+1)}}{\vec{r}^{(n)} \cdot \vec{r}^{(n)}} \quad \text{(Koeffizient) (5.82)}$$

$$\vec{p}^{(n+1)} = \vec{r}^{(n+1)} + \beta^{(n)} \vec{p}^{(n)} \quad \text{(neue Richtung) (5.84b)}$$

Es ist

$$\vec{p}^{(n)} \cdot \vec{r}^{(n)} = (\vec{r}^{(n)} - \beta^{(n-1)} \vec{p}^{(n-1)}) \cdot \vec{r}^{(n)} = \vec{r}^{(n)} \cdot \vec{r}^{(n)} - \beta^{(n-1)} \underbrace{\vec{p}^{(n-1)} \cdot \vec{r}^{(n)}}_{=0}. \quad (5.90)$$

Da das n -te Residuum $\vec{r}^{(n)}$ keine Komponente mehr in Richtung der früheren Suchrichtungen (insbesondere $\vec{p}^{(n-1)}$) besitzt (vgl. 5.75), verschwindet das zweite Skalarprodukt. Damit gilt das blaue Gleichheitszeichen (=) in dem obigen Algorithmus.

¹⁸Das CG-Verfahren geht zurück auf ?. Es ist einer der wichtigsten Algorithmen der numerischen linearen Algebra.

¹⁹Man kann zeigen

$$\frac{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{r}^{(n+1)}}{\vec{p}^{(n)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(n)}} = -\frac{\vec{r}^{(n+1)} \cdot \vec{r}^{(n+1)}}{\vec{r}^{(n)} \cdot \vec{r}^{(n)}}.$$

Da die Gleichungen in der Strömungsmechanik im allgemeinen nicht symmetrisch sind (bis auf die Poisson-Gleichung für den Druck oder im Limes der reinen Wärmeleitung), müssen die Gleichungen symmetrisiert werden. Das kann man erreichen, indem man das doppelt so große System betrachtet

$$\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{y} \\ \vec{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{b} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.91)$$

dessen Matrix *per constructionem* symmetrisch ist. Die Lösung \vec{y} ist dabei irrelevant. Wenn man dieses System analog zum CG-Verfahren behandelt, erhält man das sogenannte *Bi-konjugierte-Gradienten-Verfahren* (Bi-CG).

Es gibt einen ganzen Zoo verschiedener Varianten des CG-Verfahrens, die alle zu den *Krylov-Unterraum-Verfahren* zählen. Als Gleichungslöser erwähnenswert ist noch das *GMRES-Verfahren* (*generalized minimal residuum*), für welches die Matrix A nicht positive definit sein muß (Golub & van Loan 1989, Saad 2003).

Bei allen Krylov-Unterraum-Verfahren werden nur Matrix-Vektor-Multiplikationen und Skalarprodukte benötigt. Bei dünnbesetzten Matrizen kostet damit eine Matrix-Vektor-Multiplikation und auch ein Iterationsschritt $O(N)$ Operationen. Wenn man nur sehr wenige Iterationen benötigt, ist das Verfahren immer noch $O(N)$, jedoch mit einem großen Vorfaktor (Anzahl der Iterationen). Daher eignen sich diese Verfahren nur für große dünnbesetzte Matrizen (ab ca. 10^4 Unbekannten).



Alexei Nikolajewitsch Krylow
1863–1945

Damit man schon mit wenigen Iterationen eine gute Näherung erhält, ist es von wesentlicher Bedeutung, das Problem in eine geeignete Form zu transformieren. Dies ist die Aufgabe der *Vorkonditionierung*. Bei einer guten Vorkonditionierung wird das Residuum zuerst bezüglich derjenigen Richtungen minimiert (d.h. eliminiert), die einen wesentlichen Beitrag zum Residuum liefern. Bei einer linearen Vorkonditionierung wird das Gleichungssystem von links mit einer Matrix multipliziert, die A^{-1} möglichst gut approximieren sollte. Im Prinzip kann das von jedem iterativen Verfahren wie dem Jacobi- oder dem GS-Verfahren geleistet werden. Beim Krylov-Unterraum-Verfahren (CG-Verfahren) ist es günstig, wenn die Matrix A eine kleine Konditionszahl besitzt (siehe Kap. 5.1.4), bzw. eine gute Verteilung der Eigenwerte.