



Numerische Lineare Algebra Übung 11

Präsenzübung

Ü 32 Lösen Sie das Gleichungssystem $Ax = b$ mit:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & -1 \\ 1 & -1 & 5 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix}$$

mit dem cg-Verfahren von Hestenes und Stiefel und dem Startvektor $x_0 = 0$. Rechnen Sie exakt mit Brüchen.

Ü 33 Sei $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ symmetrisch und positiv definit mit $k < n$ verschiedenen (reellen) Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_k$. Man zeige, daß in diesem Fall das cg-Verfahren schon nach k Iterationen die Lösung von $Ax^* = b$ liefert, d.h. $x_k = x^*$.

Hinweis: Nach Satz 2.4.3 gilt mit

$$E(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T A(x - x^*) = f(x) + \frac{1}{2}(x^*)^T Ax^*$$

dass

$$E(x_k) \leq E(x_0) \min_{p_k} \max_i |p_k(\lambda_i)| \quad \text{wo } p_k \in \Pi_k : p_k(0) = 1.$$

Ü 34 Über das cg-Verfahren von Stiefel und Hestenes wurde in der Vorlesung Folgendes bewiesen: Es sei mit

$$r = Ax - b$$

$$\begin{aligned} p_0 &= r_0 \\ x_{i+1} &= x_i - \sigma_i p_i, \quad r_{i+1}^T p_i = 0 \text{ definiert } \sigma_i \\ r_{i+1} &= r_i - \sigma_i A p_i \\ p_{i+1} &= r_{i+1} + \frac{\|r_{i+1}\|^2}{\|r_i\|^2} p_i \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} p_i^T A p_j &= 0 \quad \text{für } i \neq j \\ r_k^T &\perp \text{span}(p_0, \dots, p_{k-1}) \end{aligned}$$

mit $i, j \leq N \leq n$.
 Zeigen Sie

$$r_j^T r_i = 0 \quad \text{für } i \neq j, \quad i, j \leq N.$$

Hausübung

H 32 Seien $a \gg 1$, $b = (0, 0)^T$, $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix}$. Gesucht werde das Minimum von

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x .$$

Dazu werde das Gradientenverfahren mit dem Startvektor $x_0 = (a, 1)^T$ angewendet, d.h.

$$x_{k+1} = x_k - \sigma_k \nabla f(x_k), \quad \sigma_k = \frac{\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^T A \nabla f(x_k)} .$$

- Zeigen Sie, daß die Abstiegsrichtungen r_k und r_{k+1} aufeinanderfolgender Iterationsschritte aufeinander senkrecht stehen. Was folgt daraus für zweidimensionale Probleme?
- Zeigen Sie, daß in diesem Beispiel für die durch das Gradientenverfahren gelieferte Folge mit den Gliedern $x_k = (\xi_k, \eta_k)^T$

$$\xi_{k+1} = \rho \xi_k, \quad \eta_{k+1} = -\rho \eta_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

mit $\rho = \frac{a-1}{a+1}$ gilt. Was bedeutet dieses Ergebnis für die Konvergenzrate?

- Zeigen Sie, daß in diesem Beispiel r_k und r_{k+1} bezüglich der durch A induzierten Metrik fast parallel sind.

H 33 Man bestimme die Minima von

a)

$$f(x) = \frac{1}{100}(10^4 \xi_1^2 + 3000 \xi_1 \xi_2 + 9750 \xi_2^2 + \xi_1 \xi_3 + \xi_3^2 + 300 \xi_1 - 400 \xi_2 + \xi_3)$$

b)

$$f(x) = \xi_1^2 + 0.3 \xi_1 \xi_2 + 0.975 \xi_2^2 + 0.01 \xi_1 \xi_3 + \xi_3^2 + 3 \xi_1 - 4 \xi_2 + \xi_3$$

mit dem cg-Verfahren von Hestenes und Stiefel. Man trage $-\lg(\|x_k - x^*\|/\|x^*\|)$ als Funktion von k auf. Starten Sie mit $x_0 = 0$. Im Fall a) ist:

$$x^* = (-0.018478819, 0.023355715, -0.49076058)^T$$

Welcher Zusammenhang besteht zwischen diesen beiden Aufgaben?

H 34 PCG: Wegen Satz 2.4.3 ist die Konvergenz des CG-Verfahrens für $Ax = b$ langsam, wenn die Eigenwerte von A weit auseinander liegen. Deshalb versucht man durch eine Kongruenztransformation, die Verteilung der Eigenwerte zu verbessern. Dieses Vorgehen wird Präkonditionieren genannt und führt zu einem modifizierten Algorithmus, dem Verfahren PCG.

Sei $M = LL^T$ mit der regulären Matrix L .

1.) Zeigen Sie, daß M symmetrisch und positiv definit ist.

Statt der Aufgabe $Ax = b$ wird die äquivalente Form $L^{-1}AL^{-T}L^T x = L^{-1}b$ herangezogen. Zur Abkürzung wird

$$\hat{A} = L^{-1}AL^{-T}, \hat{x} = L^T x \quad \text{und} \quad \hat{b} = L^{-1}b \quad (*)$$

gesetzt.

2.) Zeigen Sie, daß \hat{A} symmetrisch, positiv definit und ähnlich zu $M^{-1}A$ ist.

Bem.: Dies gibt Hinweise, wie die Matrix M und damit L, L^T zu wählen sind.

3.) Wie lautet der CG-Algorithmus für die Aufgabe $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$?

Aus Aufwandsgründen möchte man zwar das transformierte Gleichungssystem lösen, aber gleichzeitig vermeiden, die Matrix \hat{A} explizit bestimmen zu müssen.

Im Folgenden sollen mit $\hat{r}_k, \hat{p}, \dots$ etc. die Zwischenwerte des CG-Verfahrens angewandt auf $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$ bezeichnen. Für den modifizierten Algorithmus definiere wegen (*) als Zwischenwerte $s_k = L\hat{r}_k, y_k = L^{-T}\hat{x}_k$ und $q_k = L\hat{p}_k$. Diese Schreibweise soll andeuten, daß s_k, y_k und q_k nur indirekt mit den entsprechenden Zwischenergebnissen des ursprünglichen CG-Verfahrens angewandt auf $Ax = b$ zu tun haben.

4.) Zeigen Sie

$$\begin{aligned} y_k &= y_{k-1} + \hat{\alpha}_k M^{-1} q_{k-1} \\ s_k &= s_{k-1} - \hat{\alpha}_k A M^{-1} q_{k-1} \\ M^{-1} q_k &= M^{-1} s_k + \hat{\beta}_k M^{-1} q_{k-1}. \end{aligned}$$

Zur besseren Übersichtlichkeit werden die Hilfsvektoren $g_k = M^{-1}q_k$ und $z = M^{-1}s_k$ eingeführt.

5.) Zeigen Sie $\hat{r}_k^T \hat{r}_k = s_k^T z$ und $\hat{p}_k^T \hat{A} \hat{p}_k = g_k^T A g_k$.

6.) Zeigen Sie, daß der im Skript angegebene Algorithmus für das präkonditionierte CG-Verfahren die gewünschten Anforderungen erfüllt. Bem.: Da Gleichungssysteme der Form $Mz = s$ gelöst werden müssen, liefert dies weitere Richtlinien für eine Wahl von M bzw. L, L^T .

Numerische Lineare Algebra

Übung 11, Lösungsvorschlag

Präsenzübung

Ü 32 Lösen Sie das Gleichungssystem $Ax = b$ mit:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & -1 \\ 1 & -1 & 5 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix}$$

mit dem cg-Verfahren von Hestenes und Stiefel und dem Startvektor $x_0 = 0$. Rechnen Sie exakt mit Brüchen.

Mit $r(x) := Ax - b$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} r(x_0) &= (-4, -2, 4)^T & p_0 &= (-4, -2, 4)^T & (r(x_0))^T p_0 &= 36 \\ Ap_0 &= 18(-1, -1, 1)^T & p_0^T Ap_0 &= 180 & \sigma_0 &= 1/5 \end{aligned}$$

$$x_1 = \frac{2}{5}(2, 1, -2)^T$$

$$\begin{aligned} r(x_1) &= \frac{2}{5}(-1, 4, 1)^T & p_1 &= \frac{18}{25}(-1, 2, 1)^T & (r(x_1))^T p_1 &= 4\frac{18}{25} \\ Ap_1 &= \frac{18}{25}(-2, 8, 2)^T & p_1^T Ap_1 &= 20\left(\frac{18}{25}\right)^2 & \sigma_1 &= \frac{5}{18} \end{aligned}$$

$$x_2 = (1, 0, -1)^T$$

Ü 33 Sei $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ symmetrisch und positiv definit mit $k < n$ verschiedenen (reellen) Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_k$. Man zeige, daß in diesem Fall das cg-Verfahren schon nach k Iterationen die Lösung von $Ax^* = b$ liefert, d.h. $x_k = x^*$.

Hinweis: Nach Satz 2.4.3 gilt mit

$$E(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T A(x - x^*) = f(x) + \frac{1}{2}(x^*)^T Ax^*$$

daß

$$E(x_k) \leq E(x_0) \min_{p_k} \max_i |p_k(\lambda_i)| \quad \text{wo } p_k \in \Pi_k : p_k(0) = 1.$$

Für den Fall $\lambda_k = \dots = \lambda_n$ liefert diese Aussage die Behauptung. Denn man wähle dazu in der Aussage

$$P_k(\lambda) = \left(\prod_{i=1}^k \frac{\lambda_i - \lambda}{\lambda_i} \right)$$

Ü 34 Über das cg-Verfahren von Stiefel und Hestenes wurde in der Vorlesung Folgendes bewiesen: Es sei mit

$$r = Ax - b$$

$$\begin{aligned} p_0 &= r_0 \\ x_{i+1} &= x_i - \sigma_i p_i, \quad r_{i+1}^T p_i = 0 \text{ definiert } \sigma_i \\ r_{i+1} &= r_i - \sigma_i A p_i \\ p_{i+1} &= r_{i+1} + \frac{\|r_{i+1}\|^2}{\|r_i\|^2} p_i \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} p_i^T A p_j &= 0 \quad \text{für } i \neq j \\ r_k^T &\perp \text{span}(p_0, \dots, p_{k-1}) \end{aligned}$$

mit $i, j \leq N \leq n$.

Zeigen Sie

$$r_j^T r_i = 0 \quad \text{für } i \neq j, \quad i, j \leq N.$$

Zu zeigen ist lediglich

$$\text{span}(p_0, \dots, p_k) = \text{span}(r_0, \dots, r_k)$$

Wegen $p_0 = r_0$ ist die Induktionsverankerung gegeben. Induktionsschritt:

$$\begin{aligned} \text{span}(p_0, \dots, p_k) &= \text{span}(p_0, \dots, p_{k-1}) \oplus \text{span}(p_k) \\ &= \text{span}(r_0, \dots, r_{k-1}) \oplus \text{span}(r_k + \beta_k p_{k-1}) \\ &= \text{span}(r_0, \dots, r_{k-1}) \oplus \text{span}(r_k) \oplus \text{span}(p_{k-1}) \\ &= \text{span}(r_0, \dots, r_k) \end{aligned}$$

Hausübung

H 32 Seien $a \gg 1$, $b = (0, 0)^T$, $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix}$. Gesucht werde das Minimum von

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x .$$

Dazu werde das Gradientenverfahren mit dem Startvektor $x_0 = (a, 1)^T$ angewendet, d.h.

$$x_{k+1} = x_k - \sigma_k \nabla f(x_k), \quad \sigma_k = \frac{\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^T A \nabla f(x_k)} .$$

- Zeigen Sie, daß die Abstiegsrichtungen r_k und r_{k+1} aufeinanderfolgender Iterationsschritte aufeinander senkrecht stehen. Was folgt daraus für zweidimensionale Probleme?
- Zeigen Sie, daß in diesem Beispiel für die durch das Gradientenverfahren gelieferte Folge mit den Gliedern $x_k = (\xi_k, \eta_k)^T$

$$\xi_{k+1} = \rho \xi_k, \quad \eta_{k+1} = -\rho \eta_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

mit $\rho = \frac{a-1}{a+1}$ gilt. Was bedeutet dieses Ergebnis für die Konvergenzrate?

- Zeigen Sie, daß in diesem Beispiel r_k und r_{k+1} bezüglich der durch A induzierten Metrik fast parallel sind.
- Es gelten $r_k = \nabla f(x_k) = Ax_k - b$, $x_{k+1} = x_k - \alpha r_k$, wobei α den Wert von

$$f(x_k - \alpha r_k) = \frac{1}{2}x_k^T Ax_k - b^T x_k - \alpha x_k^T A r_k + \frac{1}{2}\alpha^2 r_k^T A r_k + \alpha b^T r_k$$

minimieren soll, daraus folgt

$$-x_k^T A r_k + b^T r_k + \alpha r_k^T A r_k = 0 \text{ bzw. } \alpha = \frac{r_k^T r_k}{r_k^T A r_k} .$$

Damit erhält man $r_k^T r_{k+1} = r_k^T (Ax_{k+1} - b) = -r_k^T b + r_k^T Ax_k - \alpha r_k^T A r_k = 0$. Im \mathbb{R}^2 sind also r_k und r_{k+1} parallel. In höheren Dimensionen hat man diese Zyklenbildung im allgemeinen nicht.

- Es gilt $x_{k+1} = x_k - \alpha r_k = \begin{pmatrix} \xi_k \\ \eta_k \end{pmatrix} - \frac{\xi_k^2 + a^2 \eta_k^2}{\xi_k^2 + a^3 \eta_k^2} \begin{pmatrix} \xi_k \\ a \eta_k \end{pmatrix}$. Zu zeigen sind $\xi_k = \rho^k a$, $\eta_k = (-\rho)^k$, $k = 0, 1, \dots$. Für $k = 0$ ist dies nach Voraussetzung erfüllt. Induktiv folgt

$$\begin{pmatrix} \xi_{k+1} \\ \eta_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho^k a \\ (-\rho)^k \end{pmatrix} - \frac{2\rho^{2k} a^2}{\rho^{2k}(a^2 + a^3)} \begin{pmatrix} \rho^k a \\ (-\rho)^k a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho^{k+1} a \\ (-\rho)^{k+1} \end{pmatrix} .$$

Die Konvergenzrate ist damit gleich ρ und deshalb sehr nahe bei 1.

- Für den Winkel φ zwischen r_k und r_{k+1} gilt

$$\cos \varphi = \frac{r_{k+1}^T A r_k}{\sqrt{r_k^T A r_k} \sqrt{r_{k+1}^T A r_{k+1}}} = \frac{a^2 \rho^{2k+1} (1-a)}{\sqrt{a^2 \rho^{2k} (1+a)} \sqrt{a^2 \rho^{2k+2} (1+a)}} = \rho.$$

Daraus folgt $\varphi \approx 0$.

H 33 Man bestimme die Minima von

a)

$$f(x) = \frac{1}{100}(10^4 \xi_1^2 + 3000 \xi_1 \xi_2 + 9750 \xi_2^2 + \xi_1 \xi_3 + \xi_3^2 + 300 \xi_1 - 400 \xi_2 + \xi_3)$$

b)

$$f(x) = \xi_1^2 + 0.3 \xi_1 \xi_2 + 0.975 \xi_2^2 + 0.01 \xi_1 \xi_3 + \xi_3^2 + 3 \xi_1 - 4 \xi_2 + \xi_3$$

mit dem cg-Verfahren von Hestenes und Stiefel. Man trage $-\lg(\|x_k - x^*\|/\|x^*\|)$ als Funktion von k auf. Starten Sie mit $x_0 = 0$. Im Fall a) ist:

$$x^* = (-0.018478819, 0.023355715, -0.49076058)^T$$

Welcher Zusammenhang besteht zwischen diesen beiden Aufgaben?

Mit 8-stelliger Rechnung ergab sich:

a)

$$\nabla f(x) = \frac{1}{100} \begin{pmatrix} 20000x_1 + 3000x_2 + x_3 + 300 \\ 3000x_1 + 19500x_2 - 400 \\ x_1 + 2x_3 + 1 \end{pmatrix}$$

$$\|\nabla f(x_0)\|_2 = 25.000098 \quad \sigma_0 = 5.9524041E-3$$

$$p_0 = (3, -4, .01)^T$$

$$x_1 = (-0.017857213, 0.023809616, -5.9524041E-5)^T$$

$$\|\nabla f(x_1)\|_2 = .031984221 \quad \sigma_1 = 4.4227653E-3$$

$$p_1 = (0.14668378, 0.10204121, -9.8330307E-)^T$$

$$x_2 = (-1.8505957, 2.3358312E-2, -1.0301323E-4)^T$$

$$\|\nabla f(x_2)\|_2 = 9.658395E-5 \quad \sigma_2 = 49.85020$$

$$p_2 = (-2.745139E-7, 1.0086034E-7, -9.842573E-3)^T$$

$$x_3 = (-1.8492273E-2, 2.3353283E-2, -0.49075731)^T$$

$$\|\nabla f(x_3)\|_2 = 8.4102547E-6$$

b) Man erhält das Problem b) aus dem Problem a) durch die Substitution

$$\xi_1 \rightarrow \xi_1/100 \quad \xi_2 \rightarrow \xi_2/100$$

mit folgender Lösung:

$$x^* = (-1.8478819, 2.335571, -4.90765056E-1)^T$$

Die Konditionszahl verbessert sich dadurch extrem. Man sollte also in diesem Zusammenhang eine positiv definite Matrix stets so umskalieren, dass ihre Diagonale ein Vielfaches der Einheitsmatrix wird:

$$A \rightarrow D^{-1/2}AD^{-1/2} \quad \text{mit } D = \text{diag}(A).$$

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 + 0.3x_2 + 0.01x_3 + 3 \\ 0.3x_1 + 1.95x_2 - 4 \\ 0.01x_1 + 2x_3 + 1 \end{pmatrix}$$

$$\|\nabla f(x_0)\|_2 = 26 \quad \sigma_0 = 0.5901044$$

$$p_0 = (3, -4, 1)^T$$

$$x_1 = (-1.7703132, 2.360418, -0.5901044)^T$$

$$\|\nabla f(x_1)\|_2 = 7.0426821E-2 \quad \sigma_1 = 0.48044234$$

$$p_1 = (0.16972389, 0.060885703, -0.19520325)^T$$

$$x_2 = (-1.8518558, 2.331165, -0.49632048)^T$$

$$\|\nabla f(x_2)\|_2 = 3.0721312E-4 \quad \sigma_2 = 0.46289879$$

$$p_2 = (-8.5846644E-3, -9.5181512E-3, -1.2011084E-2)^T$$

$$x_3 = (-1.8478819, 2.335571, -0.49076062)^T$$

H 34 PCG: Wegen Satz 2.4.3 ist die Konvergenz des CG-Verfahrens für $Ax = b$ langsam, wenn die Eigenwerte von A weit auseinander liegen. Deshalb versucht man durch eine Kongruenztransformation, die Verteilung der Eigenwerte zu verbessern. Dieses Vorgehen wird Präkonditionieren genannt und führt zu einem modifizierten Algorithmus, dem Verfahren PCG.

Sei $M = LL^T$ mit der regulären Matrix L .

1.) Zeigen Sie, daß M symmetrisch und positiv definit ist.

Statt der Aufgabe $Ax = b$ wird die äquivalente Form $L^{-1}AL^{-T}L^T x = L^{-1}b$ herangezogen.

Zur Abkürzung wird

$$\hat{A} = L^{-1}AL^{-T}, \quad \hat{x} = L^T x \quad \text{und} \quad \hat{b} = L^{-1}b \quad (*)$$

gesetzt.

2.) Zeigen Sie, daß \hat{A} symmetrisch, positiv definit und ähnlich zu $M^{-1}A$ ist.

Bem.: Dies gibt Hinweise, wie die Matrix M und damit L, L^T zu wählen sind.

3.) Wie lautet der CG-Algorithmus für die Aufgabe $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$?

Aus Aufwandsgründen möchte man zwar das transformierte Gleichungssystem lösen, aber gleichzeitig vermeiden, die Matrix \hat{A} explizit bestimmen zu müssen.

Im Folgenden sollen mit $\hat{r}_k, \hat{p}_k, \dots$ etc. die Zwischenwerte des CG-Verfahrens angewandt auf $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$ bezeichnen. Für den modifizierten Algorithmus definiere wegen (*) als Zwischenwerte $s_k = L\hat{r}_k, y_k = L^{-T}\hat{x}_k$ und $q_k = L\hat{p}_k$. Diese Schreibweise soll andeuten, daß s_k, y_k und q_k nur indirekt mit den entsprechenden Zwischenergebnissen des ursprünglichen CG-Verfahrens angewandt auf $Ax = b$ zu tun haben.

4.) Zeigen Sie

$$\begin{aligned} y_k &= y_{k-1} + \hat{\alpha}_k M^{-1} q_{k-1} \\ s_k &= s_{k-1} - \hat{\alpha}_k A M^{-1} q_{k-1} \\ M^{-1} q_k &= M^{-1} s_k + \hat{\beta}_k M^{-1} q_{k-1}. \end{aligned}$$

Zur besseren Übersichtlichkeit werden die Hilfsvektoren $g_k = M^{-1}q_k$ und $z = M^{-1}s_k$ eingeführt.

5.) Zeigen Sie $\hat{r}_k^T \hat{r}_k = s_k^T z$ und $\hat{p}_k^T \hat{A} \hat{p}_k = g_k^T A g_k$.

6.) Zeigen Sie, daß der im Skript angegebene Algorithmus für das präkonditionierte CG-Verfahren die gewünschten Anforderungen erfüllt. Bem.: Da Gleichungssysteme der Form $Mz = s$ gelöst werden müssen, liefert dies weitere Richtlinien für eine Wahl von M bzw. L, L^T .

Der Algorithmus bekommt in der Schreibweise, die in der Aufgabenstellung eingeführt wurde die Form:

$$\begin{aligned} s_0 &= b - Ax_0 \\ Mz_0 &= s_0, \quad g_0 = z_0 && \text{Gleichungssystem lösen} \\ k &= 1, 2, \dots \\ \hat{\alpha}_k &= s_{k-1}^T z_{k-1} / (g_{k-1}^T A g_{k-1}) \\ y_k &= y_{k-1} + \hat{\alpha}_k g_{k-1} \\ s_k &= s_{k-1} - \hat{\alpha}_k A g_{k-1} \\ Mz_k &= s_k && \text{Gleichungssystem lösen} \\ \hat{\beta}_k &= s_k^T z_k / (s_{k-1}^T z_{k-1}) \\ g_k &= z_k + \hat{\beta}_k g_{k-1} \end{aligned}$$