Numerisches Rechnen

(für Informatiker)

M. Grepl

J. Berger & J.T. Frings

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Wintersemester 2010/11

Problemstellung

Lineare Gleichungssysteme, iterative Verfahren

- geg.: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, $n \gg 1$, A dünnbesetzt;
  ges.: $x \in \mathbb{R}^n$, so dass $Ax = b$, wobei

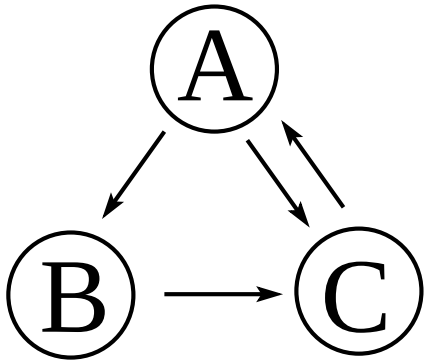
$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

  und die meisten $a_{i,j} = 0$ sind.

- Annahme: A nichtsingulär, d.h. $\det(A) \neq 0$
  $\Rightarrow$ Spalten von A bilden eine Basis in $\mathbb{R}^n$
  $\Rightarrow$ $Ax = b$ eindeutig lösbar.

Suchmaschinenranking – PageRank

Internet mit 3 Webseiten



Gegeben:

- Webseiten A, B und C
- Verlinkung der Seiten

Gesucht:

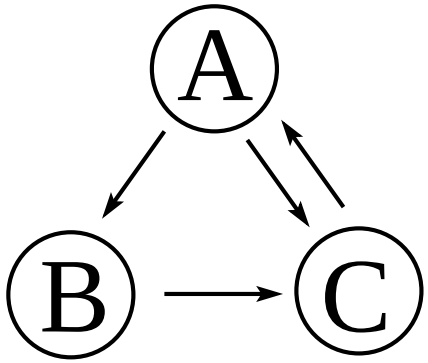
- PageRank $\mathbf{PR}(\cdot)$ von A, B und C

Modell des Zufalls-Surfers:

$$\underbrace{\begin{bmatrix}\mathbf{PR}(A)\\ \mathbf{PR}(B)\\ \mathbf{PR}(C)\end{bmatrix}}_{x} = \underbrace{\frac{1-d}{3}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}}_{\frac{1-d}{3}\,\mathbf{e}} + \underbrace{d\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\\ \frac{1}{2} & 0 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 0\end{bmatrix}}_{d\,\bar{G}} \underbrace{\begin{bmatrix}\mathbf{PR}(A)\\ \mathbf{PR}(B)\\ \mathbf{PR}(C)\end{bmatrix}}_{x}$$

Suchmaschinenranking – PageRank

Internet mit 3 Webseiten



Gegeben:

- Webseiten A, B und C
- Verlinkung der Seiten

Gesucht:

- PageRank $\mathbf{PR}(\cdot)$ von A, B und C

Modell des Zufalls-Surfers:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{PR}(A) \\ \mathbf{PR}(B) \\ \mathbf{PR}(C) \end{bmatrix} = \frac{1-d}{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + d \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{PR}(A) \\ \mathbf{PR}(B) \\ \mathbf{PR}(C) \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad (\mathbf{I} - d\,\bar{G})\,x = \tfrac{1-d}{3}\,\mathbf{e} \quad \text{(LGS)}$$

Suchmaschinenranking – PageRank

Größe des Index bei Google:

- September 2005: $>$ 8 Milliarden
- Anzahl der indizierten Seiten seitdem nicht mehr gelistet.

$\Rightarrow$ The World's Largest Matrix Computation (C. Moler)

Berechnungsverfahren:

$$\mathbf{PR}(p_i) = \frac{1-d}{N} + d \sum_{p_j \in I(p_i)} \frac{\mathbf{PR}(p_j)}{O(p_j)}.$$

oder in Matrix-Vektor-Notation

$$x = \frac{1-d}{N}\,\mathbf{e} + d\,\bar{G}\,x.$$

mit $x = [\mathbf{PR}(p_1)\ \mathbf{PR}(p_2)\ \ldots]^T$.

Suchmaschinenranking – PageRank

Berechnungsverfahren:

- Iterativ
  - Initialisiere: $x(t=0) = \frac{1}{N}$
  - Löse (Fixpunktgleichung)
$$x(t+1) = \frac{1-d}{N}\,\mathbf{e} + d\,\bar{G}\,x(t).$$
    bis $|x(t+1) - x(t)| < \varepsilon$.
- Algebraisch
  - Für $t \longrightarrow \infty$ (stationärer Zustand) ergibt sich
$$x = \frac{1-d}{N}\,\mathbf{e} + d\,\bar{G}\,x.$$
  - Lösung des Gleichungssystems
$$(I - d\,\bar{G})\,x = \frac{1-d}{N}\,\mathbf{e}.$$

Suchmaschinenranking – PageRank

- Power Method

  Gleichung lässt sich auch schreiben als

$$x = \left(\frac{1-d}{N} \mathbf{E} + d\,\bar{G} \right) x = \tilde{G}\,x.$$

  da

  - $\bar{G}$ Übergangswahrscheinlichkeiten darstellt, und
  - x eine Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\sum_{i=1}^{N} x_i = 1$ ist.

  Lösung mit Power Method

  - Initialisiere: $x(t=0) = \frac{1}{N}$
  - Löse (Fixpunktgleichung)

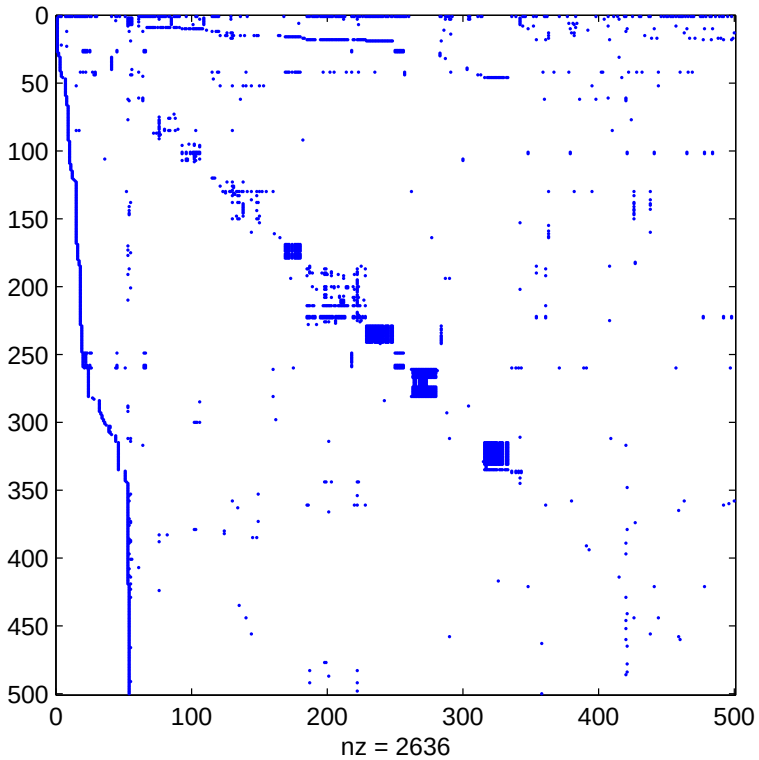
$$x(t+1) = \tilde{G}\,x(t).$$

    bis $|x(t+1) - x(t)| < \varepsilon$.

  Hier: eindeutiger max. EW $\lambda_{\max} = 1$ (Perron-Frobenius)

Suchmaschinenranking – PageRank

Connectivity Matrix G von "Harvard 500" (Stand: August 2003)



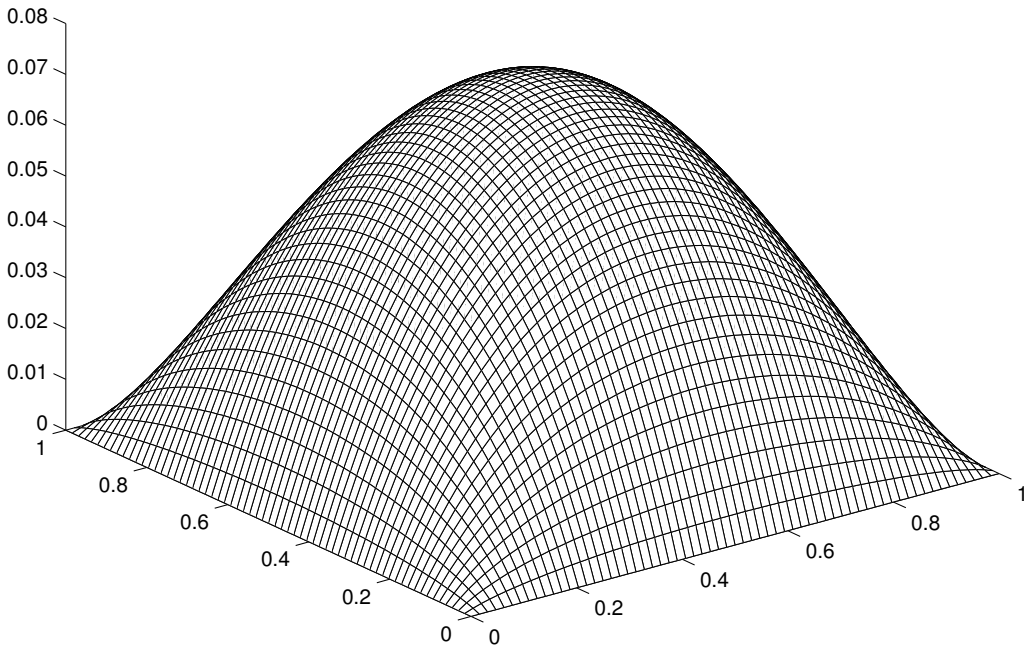
Elemente: 250000, `nnz(G)` = 2636, density = 0.0105

Poisson-Gleichung

Gesucht $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, $\Omega = [0,1]^2$, so daß

$$\begin{aligned} -\Delta u &= 1 \quad \text{in } \Omega, \\ u &= 0 \quad \text{auf } \partial\Omega. \end{aligned}$$

Typisches Beispiel: Wärmeleitungsgleichung, Diffusionsgleichung.



Poisson-Gleichung

Diskretisierung mit Finite Differenzen Verfahren:

- Regelmäßiges quadratisches Gitter mit Schrittweite $h = \frac{1}{n}$
- Ersetzen der Ableitungen durch Finite Differenzen
- Gesucht ist $x \in \mathbb{R}^m$, $m = (n-1)^2$, so dass

$$Ax = b$$

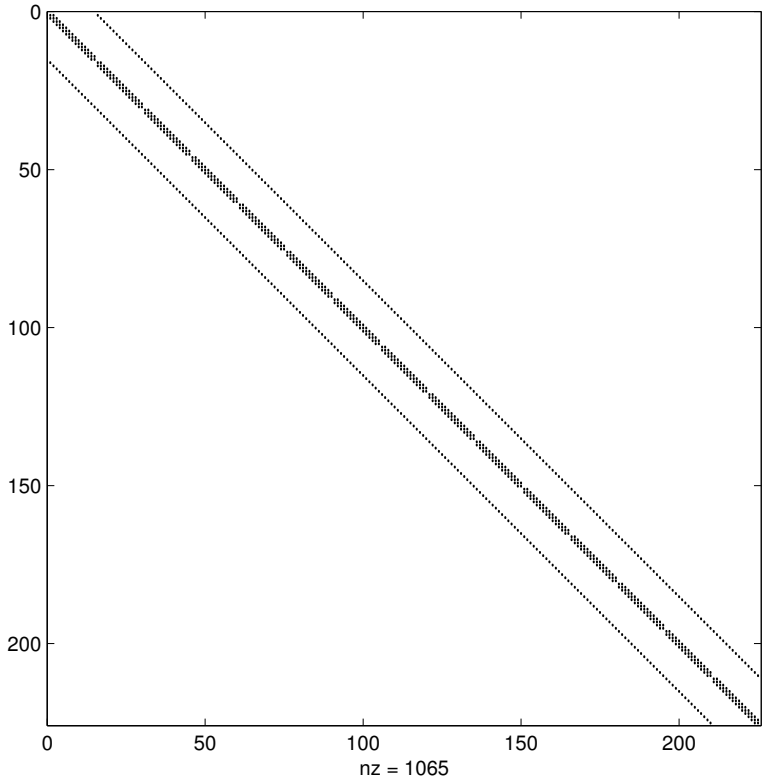
mit $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} T & -I & & \\ -I & T & -I & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & -I & T & -I \\ & & -I & T \end{bmatrix}, \quad T = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & -1 & 4 & -1 \\ & & -1 & 4 \end{bmatrix},$$

$T \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ und der Identitätsmatrix. $I \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$.

Poisson-Gleichung

Diskretisierung mit Finite Differenzen Verfahren: `spy(A)`



Elemente: 50625, `nnz(G)` = 1065, density = 0.021

Poisson-Gleichung

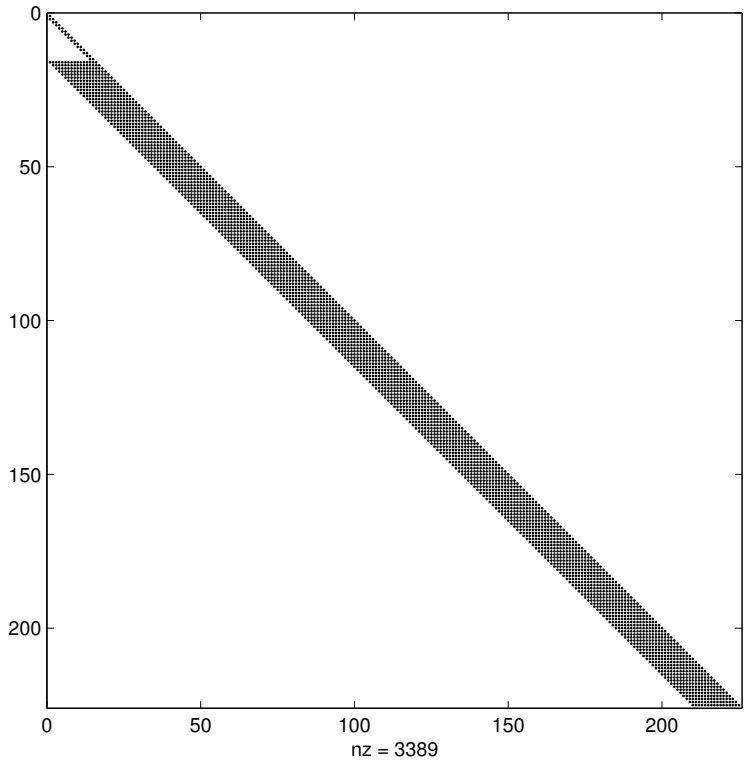
Eigenschaften von Steifigkeitsmatrizen:

- Hochdimensionalität
  Anzahl der Unbekannten $\sim h^{-d}$ bei d Ortsvariablen
- Dünnbesetztheit
- Blockstruktur
  Bei Diskretisierung auf regelmäßigen Rechteckgittern
- Schlechte Kondition
  Diskrete Poisson-Gleichung: $\kappa(A) = \left(\frac{2}{\pi h}\right)^2$
- Symmetrie, Positiv-Definitheit
- Diagonaldominanz (strikt für $<$)

$$\sum_{j \neq i} |a_{i,j}| \leq |a_{i,i}| \text{ für alle } i,$$

Poisson-Gleichung

Problem des "fill in" bei Cholesky-Zerlegung $\boldsymbol{A = LDL^T}$: spy(L)



h	1/16	1/32	1/64	1/128	
nz($\mathbf{A_1}$)	1065	4681	19593	80137	$\approx 5h^{-2}$
nz($\mathbf{L}$)	3389	29821	250109	2048509	$\approx h^{-3}$

Dünnbesetzte Matrizen in Matlab

Löse $A\,x = b$

- `x = inv(A)b`
- `x = A^(-1)b`
- `x = A\b`

Sparse Matrices

- "Matlab is slow only if you use it incorrectly." (Mathworks)
- Wenn A dünnbesetzt ist, ist der Code langsam, wenn man den folgenden Befehl zu oft benutzt :

$$\texttt{A(i,j)} = \cdots$$

- Warum? Hat damit zu tun, wie Matlab Matrizen speichert . . .

Dünnbesetzte Matrizen in Matlab

Beispiel, wie dünnbesetzte Matrizen in Matlab gespeichert werden:

```
C = [
4.5 0.0 3.2 0.0
3.1 2.9 0.0 0.9
0.0 1.7 3.0 0.0
3.5 0.4 0.0 1.0 ] ;
C = sparse (C)
```

```
C =
   (1,1)        4.5000
   (2,1)        3.1000
   (4,1)        3.5000
   (2,2)        2.9000
   (3,2)        1.7000
   (4,2)        0.4000
   (1,3)        3.2000
   (3,3)        3.0000
   (2,4)        0.9000
   (4,4)        1.0000
```

```
column 1:
     k       row index      value
     1.0000     1.0000     4.5000
     2.0000     2.0000     3.1000
     3.0000     4.0000     3.5000
column 2:
     k       row index      value
     4.0000     2.0000     2.9000
     5.0000     3.0000     1.7000
     6.0000     4.0000     0.4000
column 3:
     k       row index      value
     7.0000     1.0000     3.2000
     8.0000     3.0000     3.0000
column 4:
     k       row index      value
     9.0000     2.0000     0.9000
    10.0000     4.0000     1.0000
```

Was passiert, wenn wir den folgenden Befehl eingeben?

```
C(3,1) = 42
```

Dünnbesetzte Matrizen in Matlab

Vorher:

```
column 1:
     k       row index      value
     1.0000     1.0000     4.5000
     2.0000     2.0000     3.1000
     3.0000     4.0000     3.5000
column 2:
     k       row index      value
     4.0000     2.0000     2.9000
     5.0000     3.0000     1.7000
     6.0000     4.0000     0.4000
column 3:
     k       row index      value
     7.0000     1.0000     3.2000
     8.0000     3.0000     3.0000
column 4:
     k       row index      value
     9.0000     2.0000     0.9000
    10.0000     4.0000     1.0000
```

Nachher:

```
column 1:
     k       row index      value
     1.0000     1.0000     4.5000
     2.0000     2.0000     3.1000
     3.0000     3.0000    42.0000
     4.0000     4.0000     3.5000
column 2:
     k       row index      value
     5.0000     2.0000     2.9000
     6.0000     3.0000     1.7000
     7.0000     4.0000     0.4000
column 3:
     k       row index      value
     8.0000     1.0000     3.2000
     9.0000     3.0000     3.0000
column 4:
     k       row index      value
    10.0000     2.0000     0.9000
    11.0000     4.0000     1.0000
```

Dünnbesetzte Matrizen in Matlab

- Der Befehl `C(3,1) = 42` benötigt Zeit, die proportional zu den Einträgen in C ist, die ungleich null sind
- Besseres Vorgehen: drei Vektoren generieren, die die Reihen und Spalten und zugehörige Einträge beinhalten:

```
I(...) = ...;
J(...) = ...;
X(...) = ...;
```

- Zusammenbau der Matrix mit:

```
A = sparse(I,J,X,n,n);
```

- Doppelte Einträge werden summiert (z.B. beim Finite Differenzen Code)
- Preallocate memory (`spalloc`).

Lineare Iterationsverfahren

Aufgabe

Für $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (nichtsingulär) und $b \in \mathbb{R}^n$ ist das Gleichungssystem

$$A\,x = b$$

zu lösen. Wir nehmen an, daß n groß ($n \gtrapprox 1000$) und A dünnbesetzt ist.

Beispiele:

- Google-Matrix
- Markov-Ketten
- Netzwerkanalyse
- Diskretisierung von (partiellen) DGL (Finite Differenzen, Finite Elemente, Finite Volumen)
- ...

Lineare Iterationsverfahren

Erinnerung: Nachiteration

- Sei $\boldsymbol{x^0}$ eine näherungweise Lösung von $\boldsymbol{A\,x = b}$ mit Residuum $\boldsymbol{r^0 = b - Ax^0}$.

Lineare Iterationsverfahren

Erinnerung: Nachiteration

- Sei $\boldsymbol{x^0}$ eine näherungweise Lösung von $\boldsymbol{A\,x = b}$ mit Residuum $\boldsymbol{r^0 = b - Ax^0}$.
- Der Fehler, $\boldsymbol{\delta^0 = x - x^0}$, erfüllt

$$\boldsymbol{A\,\delta^0 = A\,x - A\,x^0 = b - A\,x^0 = r^0}$$

Lineare Iterationsverfahren

Erinnerung: Nachiteration

- Sei x^0 eine näherungweise Lösung von $A\,x = b$ mit Residuum $r^0 = b - Ax^0$.
- Der Fehler, $\delta^0 = x - x^0$, erfüllt

$$A\,\delta^0 = A\,x - A\,x^0 = b - A\,x^0 = r^0$$

- Exakte Lösung ergibt sich aus

$$x = x^0 + \delta^0 = x^0 + A^{-1}(b - A\,x^0)$$

Lineare Iterationsverfahren

Erinnerung: Nachiteration

- Sei x^0 eine näherungweise Lösung von $A\,x = b$ mit Residuum $r^0 = b - Ax^0$.
- Der Fehler, $\delta^0 = x - x^0$, erfüllt
$$A\,\delta^0 = A\,x - A\,x^0 = b - A\,x^0 = r^0$$
- Exakte Lösung ergibt sich aus
$$x = x^0 + \delta^0 = x^0 + A^{-1}(b - A\,x^0)$$
- Problem: Lösung des LGS
$$A\,\delta^0 = b - A\,x^0$$
benötigt.

Lineare Iterationsverfahren

Erinnerung: Nachiteration

- Sei x^0 eine näherungweise Lösung von $A\,x = b$ mit Residuum $r^0 = b - Ax^0$.
- Der Fehler, $\delta^0 = x - x^0$, erfüllt
$$A\,\delta^0 = A\,x - A\,x^0 = b - A\,x^0 = r^0$$
- Exakte Lösung ergibt sich aus
$$x = x^0 + \delta^0 = x^0 + A^{-1}(b - A\,x^0)$$
- Problem: Lösung des LGS
$$A\,\delta^0 = b - A\,x^0$$
benötigt.
- aber ...

Lineare Iterationsverfahren

Annahme: wir haben eine näherungweise Lösung x^0

$$x = x^0 + A^{-1}(b - A\,x^0)$$

Idee:

Lineare Iterationsverfahren

Annahme: wir haben eine näherungweise Lösung x^0

$$x = x^0 + C(b - A\,x^0)$$

Idee:

- Ersetze A^{-1} durch C, wobei
  - A^{-1} durch C "gut" approximiert wird, und
  - der Aufwand der Matrix-Vektor Multiplikation Cy gering ist.

Lineare Iterationsverfahren

Annahme: wir haben eine näherungweise Lösung x^0

$$x^{k+1} = x^k + C(b - A\,x^k),\ k = 0, 1, 2, \ldots$$

Idee:

- Ersetze A^{-1} durch C, wobei
  - A^{-1} durch C "gut" approximiert wird, und
  - der Aufwand der Matrix-Vektor Multiplikation Cy gering ist.
- Führe Iteration für $k = 0, 1, 2, \ldots$ ein.

Lineare Iterationsverfahren

Annahme: wir haben eine näherungweise Lösung x^0

$$x^{k+1} = x^k + C(b - A\,x^k),\ k = 0, 1, 2, \ldots$$

Idee:

- Ersetze A^{-1} durch C, wobei
  - A^{-1} durch C "gut" approximiert wird, und
  - der Aufwand der Matrix-Vektor Multiplikation Cy gering ist.
- Führe Iteration für $k = 0, 1, 2, \ldots$ ein.

Fixpunktiteration:

$$x^{k+1} = x^k + C(b - A\,x^k) := \Phi(x^k),\ k = 0, 1, 2, \ldots.$$

Lineare Iterationsverfahren

- Fixpunktgleichung

$$\Phi(x) := x + C(b - A\,x)$$

mit geeignetem $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ nichtsingulär.

- Fixpunktiteration

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \Phi(x^k) = x^k + C(b - A\,x^k) \\ &= (I - CA)x^k + Cb, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \end{aligned}$$

Lineare Iterationsverfahren

- Fixpunktgleichung

$$\Phi(x) := x + C(b - A\,x)$$

mit geeignetem $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ nichtsingulär.

- Fixpunktiteration

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \Phi(x^k) = x^k + C(b - A\,x^k) \\ &= (I - CA)x^k + Cb, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \end{aligned}$$

- Für den Fehler $e^k := x^k - x^*$ ergibt sich

$$e^{k+1} = x^{k+1} - x^* = \Phi(x^k) - \Phi(x^*) = (I - CA)e^k$$

also

$$\boxed{e^k = (I - CA)^k\, e^0, \quad k = 0, 1, 2, \ldots}$$

Satz 13.3

Das Verfahren konvergiert für jeden Startwert $\boldsymbol{x^0}$ gegen die Lösung $\boldsymbol{x^*}$ des Gleichungssystems genau dann, wenn

$$\boldsymbol{\rho(I - CA) < 1}$$

gilt, wobei $\boldsymbol{\rho(I - CA)}$ der Spektralradius, also der betragsmäßig größte Eigenwert, von $\boldsymbol{I - CA}$ ist.

Satz 13.3

Das Verfahren konvergiert für jeden Startwert x^0 gegen die Lösung x^* des Gleichungssystems genau dann, wenn

$$\rho(I - CA) < 1$$

gilt, wobei $\rho(I - CA)$ der Spektralradius, also der betragsmäßig größte Eigenwert, von $I - CA$ ist.

Folgerung 13.5

Für eine beliebige Vektornorm $\|\cdot\|$ mit zugehöriger Operatornorm gilt:

$$\|x^k - x^*\| \leq \|I - CA\|^k \, \|x^0 - x^*\|, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Die Konvergenz ist für jeden Startwert x^0 gesichert, falls für *irgendeine* Norm die Bedingung

$$\|I - CA\| < 1$$

erfüllt ist.

Konvergenzrate

- *Maß für die Konvergenzgeschwindigkeit*: $\rho(I - CA)$.

Konvergenzrate

- *Maß für die Konvergenzgeschwindigkeit*: $\rho(I - CA)$.
- Je kleiner $\rho(I - CA)$ ist, desto schneller wird der Fehler reduziert.

Konvergenzrate

- *Maß für die Konvergenzgeschwindigkeit*: $\rho(I - CA)$.
- Je kleiner $\rho(I - CA)$ ist, desto schneller wird der Fehler reduziert.
- Mittlere Fehlerreduktion in k Iterationsschritten

$$\sigma_k = \left(\frac{\|e^k\|}{\|e^0\|} \right)^{\frac{1}{k}} \to |\lambda_1| = \rho(I - CA) \text{ für } k \to \infty$$

Konvergenzrate

- *Maß für die Konvergenzgeschwindigkeit*: $\rho(I - CA)$.
- Je kleiner $\rho(I - CA)$ ist, desto schneller wird der Fehler reduziert.
- Mittlere Fehlerreduktion in k Iterationsschritten

$$\sigma_k = \left(\frac{\|e^k\|}{\|e^0\|} \right)^{\frac{1}{k}} \to |\lambda_1| = \rho(I - CA) \text{ für } k \to \infty$$

- Reduktion des Anfangfehlers $\|e^0\|$ um Faktor $\frac{1}{e}$ benötigt $k = (-\ln \sigma_k)^{-1}$ Iterationsschritte

Konvergenzrate

- *Maß für die Konvergenzgeschwindigkeit*: $\rho(I - CA)$.
- Je kleiner $\rho(I - CA)$ ist, desto schneller wird der Fehler reduziert.
- Mittlere Fehlerreduktion in k Iterationsschritten

$$\sigma_k = \left(\frac{\|e^k\|}{\|e^0\|} \right)^{\frac{1}{k}} \to |\lambda_1| = \rho(I - CA) \text{ für } k \to \infty$$

- Reduktion des Anfangfehlers $\|e^0\|$ um Faktor $\frac{1}{e}$ benötigt $k = (-\ln \sigma_k)^{-1}$ Iterationsschritte
- *Asymptotische Konvergenzrate*

$$-\ln(\rho(I - CA))$$

Wahl von C

Zu $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ wähle $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ so, daß

- A^{-1} durch C genügend gut in dem Sinne approximiert wird, daß $\rho(I - CA)$ möglichst klein ist.
- die Operation

$$y \longrightarrow Cy$$

mit möglichst geringem Aufwand durchführbar ist.

Beachte:
Bei den meisten iterativen Verfahren wird die Operation $y \longrightarrow Cy$ durchgeführt, ohne daß die Matrix C explizit berechnet wird.

Komplexität

Zum Vergleich der unterschiedliche Verfahren, gehen wir davon aus, daß

- eine Klasse von Gleichungssytemen $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ vorliegt
- vorgegeben ist, mit welchem Faktor $\boldsymbol{R}$ ein (beliebiger) Startfehler reduziert werden soll ($\|\boldsymbol{e^k}\| = \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{R}}\|\boldsymbol{e^0}\|$)

Komplexität eines iterativen Verfahrens

Größenordnung der Anzahl arithmetischer Operationen, die benötigt werden, um für das vorliegende Problem eine Fehlerreduktion um den Faktor $\boldsymbol{R}$ zu erreichen.

Lineare Iterationsverfahren

- Jakobi
- Gauß-Seidel
- SOR
- Conjugate Gradients (später)

Problemstellung

Lineare Gleichungssysteme, iterative Verfahren

geg.: $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, $\det(A) \neq 0$,
und $n \gg 1$, A dünnbesetzt;

ges.: $x \in \mathbb{R}^n$, so dass $Ax = b$, wobei

$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

und die meisten $a_{i,j} = 0$ sind.

Vorgehen

$$x^{k+1} = x^k + C(b - A\,x^k),\ k = 0, 1, 2, \ldots.$$

Definition

Definiere die Zerlegung

$$A = D - L - U$$

wobei

$$D = \begin{bmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix},$$

$$L = -\begin{bmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_{2,1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix}, \quad U = -\begin{bmatrix} 0 & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & a_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix}.$$

Definition

Diagonaldominanz

Eine Matrix $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt strikt diagonaldominat, falls gilt

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{i,j}| < |a_{i,i}|.$$

Zeilen-/Spaltensummenkriterium

Eine Matrix $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ erfüllt das starke Zeilensummenkriterium (bzw. Spaltensummenkriterium), wenn

$$\max_{i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} < 1, \quad \left(\text{bzw.} \quad \max_{j} \sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} < 1 \right).$$

Jacobi-Verfahren

Beim Jacobi- oder Gesamtschrittverfahren:

$$C = (\mathbf{diag}(A))^{-1} = D^{-1}.$$

Die Iterationsvorschrift lautet

$$x^{k+1} = (I - D^{-1}A)\, x^k + D^{-1}b,$$

d.h. in Komponentenschreibweise ergibt sich:

Algorithmus 13.7 (Jacobi-Verfahren)

Gegeben: Startvektor $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Für $k = 0, 1, \ldots$ berechne:

$$x_i^{k+1} = a_{i,i}^{-1} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{i,j}\, x_j^k \right), \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

Jacobi-Verfahren

Vorgehen:

- Löse i-te Gleichung nach der i-ten Unbekannte x_i auf.
- Verwende Werte aus dem vorherigen Iterationsschritt für die übrigen Unbekannten ($x_j,\ j \neq i$).
- Beachte:
  - x^k und x^{k+1} müssen gespeichert werden
  - Verfahren leicht parallelisierbar

Rechenaufwand. Der Rechenaufwand pro Iterationsschritt ist beim Jacobi-Verfahren angewandt auf eine dünnbesetzte Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ vergleichbar mit einer Matrix-Vektor-Multiplikation $A\,x$, beansprucht also $O(n)$ Operationen.

Konvergenz

Satz 13.9

Für das Jacobi-Verfahren gelten folgende Konvergenzkriterien:

- Falls A als auch $2D - A$ symmetrisch positiv definit sind, folgt
$$\rho(I - D^{-1}A) < 1.$$
- Falls A irreduzibel diagonaldominant ist, gilt
$$\rho(I - D^{-1}A) \leq \|I - D^{-1}A\|_\infty < 1.$$

Satz: hinreichende Bedingung

Das Jacobi-Verfahren konvergiert, falls A das starke Zeilensummen- oder Spaltensummenkriterium erfüllt.

Beispiel 13.10

Das Diffusionsproblem mit der Matrix $\mathbf{A_1}$. Es gilt

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{I}-\mathbf{CA}) &= \rho(\mathbf{I}-\mathbf{D}^{-1}\mathbf{A_1}) \\ &= \max\{\,|1-\tfrac{1}{4}h^2\lambda| \mid \lambda \text{ Eigenwert von } \mathbf{A_1}\} \\ &= 1-2\sin^2(\tfrac{1}{2}\pi h) = \cos(\pi h) \approx 1-\tfrac{1}{2}\pi^2h^2.\end{aligned}$$

Für die asymptotische Konvergenzrate gilt somit

$$-\ln(\rho(\mathbf{I}-\mathbf{D}^{-1}\mathbf{A_1})) \approx -\ln(1-\tfrac{1}{2}\pi^2h^2) \approx \tfrac{1}{2}\pi^2h^2.$$

Um einen Startfehler um einen Faktor R zu reduzieren, sind etwa

$$K = \frac{-\ln R}{\ln \rho(\mathbf{I}-\mathbf{D}^{-1}\mathbf{A_1})} \approx \frac{2}{\pi^2h^2}\ln R$$

Iterationsschritte erforderlich.

Beachte: Die geschätzte Anzahl der notwendigen Iterationsschritte wächst in Abhängigkeit der Schrittweite h wie die Konditionszahlen der betreffenden Matrizen.

Beispiel 13.10

Sei # die Anzahl von Iterationsschritten, die zur Reduktion des Startfehlers um einen Faktor $R = 10^3$ benötigt werden, und K die theoretische Schätzung von # aus:

$$K = \frac{-\ln 10^3}{\ln(\cos \pi h)} \approx \frac{2}{\pi^2 h^2} \ln 10^3.$$

Ergebnisse:

h	1/40	1/80	1/160	1/320
#	2092	8345	33332	133227
K	2237	8956	35833	143338

Komplexität. Da $m \sim h^{-2}$, folgt, daß $K \sim m$ Iterationsschritte benötigt werden. Da jeder Schritt einen zu m proportionalen Aufwand erfordert, ergibt sich, daß die Komplexität des Jacobi-Verfahrens (für diese Problemstellung) etwa $c\,m^2$ ist.

Beispiel

- **Gleichungssystem**

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 100 \\ 100 \\ 100 \\ 100 \\ 100 \end{bmatrix}$$

Beispiel

Konvergenz

Table 1.3. Solution by the Jacobi Iteration Method

k	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
1	25.000000	25.000000	25.000000	25.000000	25.000000
2	25.000000	31.250000	37.500000	31.250000	25.000000
3	25.000000	34.375000	40.625000	34.375000	25.000000
4	25.000000	35.156250	42.187500	35.156250	25.000000
5	25.000000	35.546875	42.578125	35.546875	25.000000
...	.....	.....	.....	.....	.....
16	25.000000	35.714284	42.857140	35.714284	25.000000
17	25.000000	35.714285	42.857142	35.714285	25.000000
18	25.000000	35.714285	42.857143	35.714285	25.000000

Gauß-Seidel-Verfahren

Beim Gauß-Seidel- oder Einzelschrittverfahren:

$$C = (D - L)^{-1}.$$

Die Iterationsvorschrift lautet

$$x^{k+1} = (I - (D - L)^{-1} A)\, x^k + (D - L)^{-1} b,$$

oder $$(D - L)\, x^{k+1} = U\, x^k + b,$$

d.h. in Komponentenschreibweise ergibt sich:

Algorithmus 13.12 (Gauß-Seidel-Verfahren)

Gegeben: Startvektor $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Für $k = 0, 1, \ldots$ berechne:

$$x_i^{k+1} = a_{i,i}^{-1} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}\, x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j}\, x_j^k \right),\ i = 1, 2, \ldots, n.$$

Gauß-Seidel-Verfahren

Vorgehen:

- Löse i-te Gleichung nach der i-ten Unbekannte x_i auf.
- Verwende die bereits vorher berechneten Komponenten der neuen Annäherung.
- Beachte:
  - Nur ein Vektor muss gespeichert werden
  - Verfahren nicht mehr einfach parallelisierbar
  - Ergebnis hängt von der Reihenfolge der Berechnung ab.

Rechenaufwand. Für eine dünnbesetzte Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist der Rechenaufwand pro Iterationsschritt beim Gauß-Seidel-Verfahren vergleichbar mit dem Aufwand beim Jacobi-Verfahren, beträgt also $O(n)$ Operationen.

Konvergenz

Satz 13.13

Für das Gauß-Verfahren gelten folgende Konvergenzkriterien:

- Falls A symmetrisch positiv definit sind, folgt
$$\rho(I - (D - L)^{-1}A) < 1$$
- Falls A irreduzibel diagonaldominant ist, gilt
$$\rho(I - (D - L)^{-1}A) \leq \|I - (D - L)^{-1}A\|_\infty < 1.$$

Satz: hinreichende Bedingung

Das Gauß-Seidel-Verfahren konvergiert, falls A das starke Zeilensummen- oder Spaltensummenkriterium erfüllt.

Beispiel 13.15

Das Diffusionsproblem mit der Matrix $\mathbf{A_1}$. Dafür gilt:

$$\rho(\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{A_1}) = \rho(\mathbf{I} - (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{A_1}) = (\rho(\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A_1}))^2$$

Hieraus ergibt sich:

$$\rho(\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{A_1}) = \cos^2(\pi h) \approx 1 - \pi^2 h^2 \ .$$

$$-\ln(\rho(\mathbf{I} - (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{A_1})) \approx -\ln(1 - \pi^2 h^2) \approx \pi^2 h^2.$$

Um einen Startfehler um einen Faktor R zu reduzieren sind (asymptotisch) etwa K Iterationsschritte erforderlich, wobei

$$K = \frac{-\ln R}{\ln(\rho(\mathbf{I} - (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{A_1}))} \approx \frac{1}{\pi^2 h^2} \ln R.$$

Ergebnisse:

h	1/40	1/80	1/160	1/320
#	1056	4193	16706	66694
K	1119	4478	17916	71669

Beispiel 13.15

Komplexität

Für das Gauß-Seidel-Verfahren angewandt auf die diskrete Poisson-Gleichung

$$\mathbf{A_1 x} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{A_1} \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad m = (n-1)^2, \quad n = \frac{1}{h}$$

ist die Komplexität $c\,m^2$ Operationen.

Beispiel

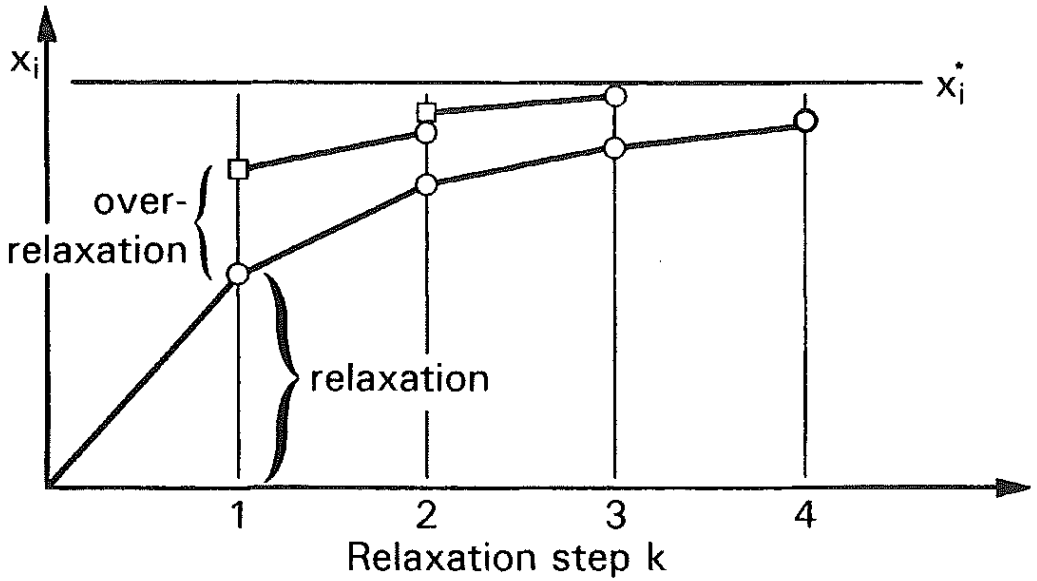
Konvergenz

Table 1.4. Solution by the Gauss-Seidel Iteration Method

k	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	
1	25.000000	31.250000	32.812500	26.953125	23.925781
2	26.074219	33.740234	40.173340	34.506226	25.191498
3	24.808502	34.947586	42.363453	35.686612	25.184757
4	24.815243	35.498485	42.796274	35.791447	25.073240
5	24.926760	35.662448	42.863474	35.752489	25.022510
...	.....	.....	.....	.....	.....
13	25.000002	35.714287	42.857142	35.714285	25.999999
14	25.000001	35.714286	42.857143	35.714285	25.000000
15	25.000000	35.714286	42.857143	35.714286	25.000000

Successive Over-Relaxation

- In vielen Fällen ist die Veränderung der x_i von Iteration zu Iteration immer in die gleiche Richtung
- Korrektur ("over-relaxing") des Iterationsschritts kann die Konvergenz verbessern



Successive Over-Relaxation

Iterationsvorschrift bei Gauß-Seidel-Verfahren:

$$x_i^{k+1} = x_i^k + a_{i,i}^{-1}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}\, x_j^{k+1} - \sum_{j=i}^{n} a_{i,j}\, x_j^k\right),\ i = 1, \ldots, n.$$

Algorithmus 13.17 (SOR-Verfahren)

Gegeben: Startvektor $x^0 \in \mathbb{R}^n$, Parameter $\omega \in (0, 2)$. Für $k = 0, 1, \ldots$ berechne:

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \omega\, a_{i,i}^{-1}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}\, x_j^{k+1} - \sum_{j=i}^{n} a_{i,j}\, x_j^k\right),\ i = 1, \ldots, n.$$

Dies entspricht der Iterationsvorschrift

$$(\tfrac{1}{\omega} D - L)\, x^{k+1} = (\tfrac{1}{\omega} D - L)\, x^k - A\, x^k + b,$$

d.h. $C = (\tfrac{1}{\omega} D - L)^{-1}$.

Successive Over-Relaxation

Rechenaufwand. Beim SOR-Verfahren ist der Rechenaufwand pro Iterationsschritt vergleichbar dem Aufwand beim Gauß-Seidel-Verfahren, also $\boldsymbol{O(n)}$ Operationen für eine dünnbesetzte Matrix $\boldsymbol{A \in \mathbb{R}^{n \times n}}$.

Satz 13.18. Sei $\mathbf{M}_\omega := \mathbf{I} - (\frac{1}{\omega}\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{A}$ die Iterationsmatrix des SOR-Verfahrens. Es gilt:

- $\rho(\mathbf{M}_\omega) \geq |\omega - 1|$.
- Für $\mathbf{A}$ s.p.d. gilt:

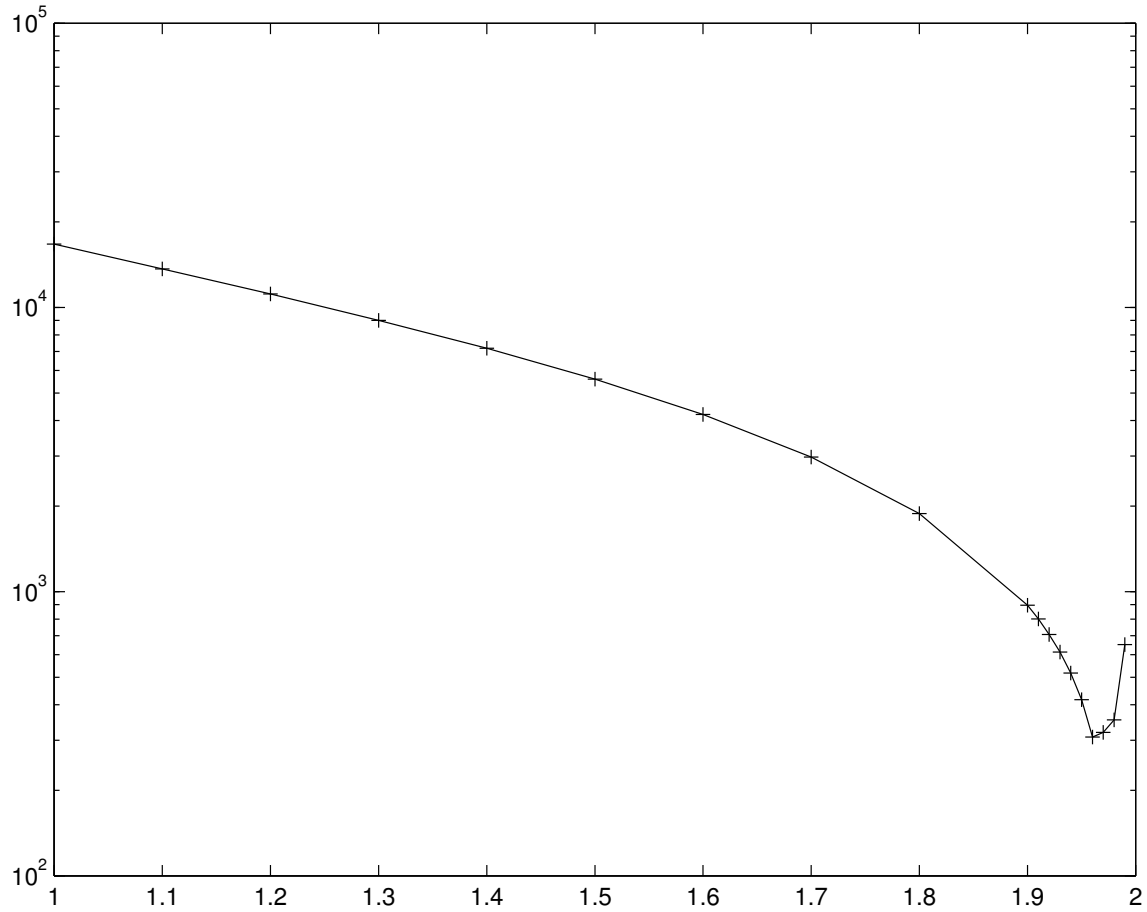
$$\rho(\mathbf{M}_\omega) < 1 \quad \text{für alle } \omega \in (0, 2).$$

- Sei $\mathbf{A}$ irreduzibel diagonaldominant mit $a_{i,j} \leq 0$ für alle $i \neq j$ und $a_{i,i} > 0$ für alle i. Dann gilt:

$$\rho(\mathbf{M}_\omega) < 1 \quad \text{für alle } \omega \in (0, 1].$$

Beispiel 13.19

Anzahl der Iterationen in Abhängigkeit von ω ($h = \frac{1}{160}$)



Optimaler Wert von ω

- Der optimale Wert von ω ist stark problemabhängig
- Für die meisten Probleme ist der optimal Wert nicht bekannt
- Ausnahme: diskrete Poisson-Gleichung (Matrix A_1)

Satz 13.20.
Wir betrachten die diskretisierte Poisson-Gleichung $\mathbf{A_1 x = b}$.
Sei $\mu := \rho(\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A_1}) < 1$ der Spektralradius der Iterationsmatrix des Jacobi-Verfahrens.
Sei $\mathbf{M}_\omega$ die Iterationsmatrix des SOR-Verfahrens.
Dann ist $\rho(\mathbf{M}_\omega)$ für den Relaxationsparameter

$$\omega_{\text{opt}} := \frac{2}{1+\sqrt{1-\mu^2}} = 1 + \left(\frac{\mu}{1+\sqrt{1-\mu^2}}\right)^2$$

optimal und

$$\rho(\mathbf{M}_{\omega_{\text{opt}}}) = \omega_{\text{opt}} - 1.$$

Komplexität

Komplexität.

Für die diskretisierte Poisson-Gleichung $\mathbf{A}_1\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ergibt sich beim SOR-Verfahren mit dem *optimalen* ω-Wert *eine sehr große Komplexitätsverbesserung im Vergleich zum Jacobi- und zum Gauß-Seidel-Verfahren.*

$$\rho(\mathbf{M}_{\omega_{\text{opt}}}) = \omega_{\text{opt}} - 1 = \left(\frac{\cos(\pi h)}{1+\sin(\pi h)}\right)^2 = \frac{1-\sin(\pi h)}{1+\sin(\pi h)} \approx 1 - 2\pi h.$$

$$K = -\frac{\ln R}{\ln \rho(\mathbf{M}_{\omega_{\text{opt}}})} \approx \frac{1}{2\pi h} \ln R \approx \frac{\ln R}{2\pi}\sqrt{m}.$$

Da der Aufwand pro Iteration proportional zu m ist, hat dieses Verfahren eine Komplexität (für die vorliegende Problemstellung) von

$$c\, m^{1.5} \quad \text{Operationen.}$$

Beispiel 13.21

Poisson-Gleichung $\mathbf{A}_1\mathbf{x} = \mathbf{b}$ mit $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{b}$ und R wie in Beispiel 13.10.

Wir verwenden das SOR-Verfahren mit $\omega = \omega_{\text{opt}}$.

Ergebnisse:

h	1/40	1/80	1/160	1/320
#	73	146	292	585
K	44	88	176	352

Beispiel

Konvergenz

Table 1.5. Solution by the SOR Method

k	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
1	27.500000	35.062500	37.142188	30.151602	26.149503
2	26.100497	34.194375	41.480925	35.905571	25.355629
3	24.419371	35.230346	42.914285	35.968342	25.167386
4	24.855114	35.692519	42.915308	35.790750	25.010375
5	24.987475	35.726188	42.875627	35.717992	24.996719
...	.....	.....	.....	.....	.....
11	24.999996	35.714285	42.857145	35.714287	25.000000
12	25.000000	35.714286	42.857143	35.714286	25.000000
13	25.000000	35.714286	42.857143	35.714286	25.000000

Zusammenfassung

- Viele Problem in der Praxis führen auf große dünnbesetzte lineare Gleichungssysteme
- Direkte Verfahren
  - Berechnung der Lösung bis auf Rundungsfehler in $O(n^3)$ Operationen
  - Problem des "fill-in" bei dünnbesetzten Matrizen
- Iterative Verfahren
  - Bestimmung der Lösung näherungweise
  - Konvergenz hängt von Spektralradius $\rho(I - CA)$ ab
- Wenn A das strenge Zeilen- oder Spaltensummenkriterium erfüllt, konvergieren das **Jacobi-Verfahren**, das **Gauss-Seidel-Verfahren**, und **Succesive Over-Relaxation**.