Übungsblatt 7.

Abgabe am **Dienstag**, **10.12.**

Aufgabe 1. (Biorthogonalisierungsverfahren)

In der Vorlesung wurden Verfahren vorgestellt, die auf Basis einer orthogonalisierung von Krylov-Vektoren eine Approximation an die Lösung berechnen. Sei $A \in \mathbb{K}^{n\times n}$ eine nicht hermitesche Matrix. Der folgende von Lanczos vorgestellte Algorithmus berechner ein Paar biorthogonaler Basen für die beiden Krylov-Räume $\mathcal{K}_k(A, v_1)$ und $\mathcal{K}_k(A^H, w_1)$ mit gegebenen $v_1, w_1 \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}$.

Algorithmus 1 (Lanczos-Biorthogonalisierung)**.**
`Input:` $v_1, w_1 \in \mathbb{K}^n$ mit $(v_1, w_1) = 1$.
`Output:` biorthogonales System $\{v_j, w_j\}$, $j = 1, \ldots, k+1$.

$\beta_1 = \delta_1 = 0$ und $v_0 = w_0 = 0$.
`for` $j = 1, \ldots, k$
  $\alpha_j = (Av_j, w_j)$;
  $\hat{v}_{j+1} = Av_j - \alpha_j v_j - \beta_j v_{j-1}$;
  $\hat{w}_{j+1} = A^H w_j - \overline{\alpha}_j w_j - \beta_j w_{j-1}$;
  $\beta_{j+1} = (\hat{v}_{j+1}, \hat{w}_{j+1})^{1/2}$;
  `if` $\beta_{j+1} = 0$ `then` STOP;
  $v_{j+1} = \hat{v}_{j+1}/\beta_{j+1}$;
  $w_{j+1} = \hat{w}_{j+1}/\beta_{j+1}$;

Die Lanczos-Biorthogonalisierung ist offenbar eine Verallgemeinerung des Lanczos-Verfahrens für hermiteschen Matrizen. Falls kein vorzeitiger Abbruch erfolgt, werden Matrizen $V_{k+1} = [v_1, \ldots, v_{k+1}]$, $W_{k+1} = [w_1, \ldots, w_{k+1}]$ und eine symmetrische Tridiagonalmatrix

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_k \\ & & \beta_k & \alpha_k \end{bmatrix}$$

mit $\alpha_i \in \mathbb{C}$ und $\beta_i \in \mathbb{R}$ erzeugt.
Beweise:
Das obige Verfahren breche nicht vorzeitig ab. Dann gilt $V_k^H W_k = I$ und

$$AV_k = V_k T_k + \beta_{k+1} v_{k+1} e_k^T, \quad A^H W_k = W_k T_k^H + \beta_{k+1} w_{k+1} e_k^T, \quad T_k = W_k^H A V_k$$

sowie $\operatorname{span}\{v_1, \ldots, v_k\} = \mathcal{K}_k(A, v_1)$ und $\operatorname{span}\{w_1, \ldots, w_k\} = \mathcal{K}_k(A^H, w_1)$

Aufgabe 2. (BiCG)

Ziel des BiCG-Verfahrens ist die Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ mit regulärer nicht-hermitescher Matrix $A \in \mathbb{K}^{n\times n}$. Zusätzlich zum im CG-Verfahren geforderten $r_k \perp \mathcal{K}(A, r_0)$ wird gefordert, dass $r_k \perp \mathcal{K}(A^H, r_0^*)$.

a) Die Lanczos-Biorthogonalisierung aus Aufgabe 1 mit Startvektor $v_1 = r_0/\|r_0\|_2$ breche nicht vorzeitig ab. Zeige: Ist T_k regulär, so erfüllt $x_k := x_0 + \|r_0\|_2 V_k T_k^{-1} e_1$ die Bedingungen $x_k \in x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)$ und $r_k = b - Ax_k \perp \mathcal{K}_k(A^H, w_1)$.

Denkt man sich das duale Gleichungssystem $A^H x^* = b^*$ gegeben und ist x_0^* eine Näherungslösung und $r_0^* := b^* - A^H x_0^* \neq 0$, $w_1 := r_0^*/\|r_0^*\|_2$, so erfüllt

$$x_k^* := x_0^* + \|r_0^*\|_2 W_k T_k^{-H} e_1$$

die Bedingungen

$$x_k^* \in x_0^* + \mathcal{K}_k(A^H, r_0^*), \quad r_k^* := b^* - A^H x_k^* \perp \mathcal{K}_k(A, v_1).$$

Wir nehmen an, T_k besitze eine LR-Zerlegung $T_k = L_k R_k$ mit den Nebendiagonalelementen λ_i, $i = 2, \dots, k$, von L_k. Dann ist

$$x_k = x_0 + P_k z_k, \quad x_k^* = x_0^* + P_k^* z_k^*,$$

wobei $P_k = [p_0, \dots, p_{k-1}] := V_k R_k^{-1}$, $P_k^* = [p_0^*, \dots, p_{k-1}^*] := W_k L_k^{-H}$ sowie $z_k := \|r_0\|_2 L_k^{-1} e_1$, $z_k^* := \|r_0^*\|_2 R_k^{-H} e_1$. Wegen

$$(P_k^*)^H A P_k = L_k^{-1} W_k^H A V_k R_k^{-1} = L_k^{-1} T_k R_k^{-1} = I$$

sind die Spalten von P_k und P_k^* bi-A-konjugiert. Nach Aufgabe 1 erhalten wir wegen

$$r_k = b - Ax_k = r_0 - \|r_0\|_2 A V_k T_k^{-1} e_1 = \zeta_k v_{k+1}, \quad \zeta_k \in \mathbb{C},$$

dass r_k ein Vielfaches von v_{k+1} und entsprechend r_k^* ein Vielfaches von w_{k+1} ist. Die Residuen sind insbesondere biorthogonal.
Dabei kann z_k rekursiv bestimmt werden:

b) Folgere für $k \geq 0$, $\alpha_0 = \|r_0\|_2$ und $\alpha_k = -\lambda_{k+1}\alpha_{k-1}$, dass $z_{k+1} = \begin{bmatrix} z_k \\ \alpha_k \end{bmatrix}$.

Folglich ist

$$x_{k+1} = x_0 + P_{k+1} z_{k+1} = x_0 + P_k z_k + \alpha_k p_k = x_k + \alpha_k p_k, \quad x_{k+1}^* = x_k^* + \overline{\alpha}_k p_k^*.$$

Daraus folgt für die Residuen

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k, \quad r_{k+1}^* = r_k^* - \overline{\alpha}_k A^H p_k^*.$$

Durch Vergleich der letzten Spalten von $P_{k+1} R_{k+1} = V_{k+1}$ erhält man $v_{k+1} = \mu_k p_{k-1} + \nu_k p_k$ mit geeigneten $\mu_k, \nu_k \in \mathbb{K}$. Weil r_k ein Vielfaches von v_{k+1} ist, ergibt sich bis auf Skalierung

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k, \quad p_{k+1}^* = r_{k+1}^* + \overline{\beta}_k p_k^*$$

mit geeignetem β_k. Aus den Orthogonalitätsbedingungen erhält man ferner

$$\alpha_k = \frac{(r_k, r_k^*)}{(Ap_k, p_k^*)} \quad \text{und} \quad \beta_k = \frac{(r_{k+1}, r_{k+1}^*)}{(r_k, r_k^*)}.$$

c) Gib den Algorithmus des BiCG-Verfahrens, dass in dieser Aufgabe entwickelt wurde, in Pseudocode an.

Aufgabe 3. (Vorkonditionierung)

a) Es seien $\{A_n\}_{n\in\mathbb{N}}$, $\{B_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ Folgen regulärer Matrizen $A_n, B_n \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $n \in \mathbb{N}$, sodass für jedes n die Abschätzung $\|I_n - A_n B_n\|_2 \leq \delta < 1$ gilt.

   Zeige, dass dann ein $c > 0$ mit $\operatorname{cond}_2(A_n B_n) \leq c$ existiert!

b) Die Umkehrung der Aussage in (a) gilt nicht:

   Gib Folgen $\{A_n\}_{n\in\mathbb{N}}$, $\{B_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ mit $\operatorname{cond}_2(A_n B_n) \leq c$ an, sodass für alle $n \in \mathbb{N}$ die Ungleichung $\|I_n - A_n B_n\|_2 > 1$ erfüllt ist!

Abgabe der Programmieraufgabe am 16. oder 17. Dezember im CIP-Pool

Programmieraufgabe. (PCG mit Incomplete Cholesky)

In Aufgabe 3 von Übungsblatt 1 wurde die Cholesky-Zerlegung eingeführt. Es handelt dich dabei um eine modifizierte LU-Zerlegung für hermitesche Matrizen. Auch die unvollständige LU-Zerlegung lässt sich für solche Matrizen zur unvollständigen Cholesky-Zerlegung (Incomplete Cholesky, IC) variieren.

Schreibe ein Programm, dass das Gleichungssystem $Ax = b$ bei gegebenem N mittels PCG löst. Als Vorkonditionierer soll dabei IC verwendet werden.

Teste anhand des Gleichungssystems aus der Programmieraufgabe von Blatt 5 mit $N = 100$.
