Institut für Numerische Simulation
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

universitätbonn

Übungen zu Einführung in die Grundlagen der Numerik (V2E1)

Wintersemester 2015/16

Prof. Dr. Martin Rumpf — Alexander Effland — Behrend Heeren — Stefan Simon

Übungsblatt 11 Abgabe: 26.01.2016

Aufgabe 33 4 Punkte

Betrachten Sie das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Berechnen Sie die Lösung dieses Gleichungssystems mit dem CG-Verfahren zu $x_0 = (1, 0)^T$.

Lösung

Die Iterationsvorschrift für CG lautet:

$k = 0$, $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$;
while $\|r_{k+1}\| > TOLERANZ$ **do**

$$\begin{aligned} z &= Ad_k; \\ \alpha_k &= \frac{r_k^T r_k}{d_k^T z}; \\ x_{k+1} &= x_k + \alpha_k d_k; \\ r_{k+1} &= r_k - \alpha_k z; \\ \beta_k &= \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}; \\ d_{k+1} &= r_{k+1} + \beta_k d_k; \\ k &= k + 1; \end{aligned}$$

end

Es folgt $r_0 = d_0 = (-1, 2)^T$. In der ersten Iteration gilt $z = (-4, 5)^T$, $\alpha = \frac{5}{14}$, $x_1 = (\frac{9}{14}, \frac{5}{7})^T$, $r_1 = (\frac{3}{7}, \frac{3}{14})^T$, $\beta_0 = \frac{9}{196}$ und $d_1 = (\frac{75}{196}, \frac{15}{49})^T$. In der zweiten Iteration folgt $z = (\frac{45}{98}, \frac{45}{196})^T$, $\alpha_1 = \frac{14}{15}$, $x_2 = (1, 1)^T$ und $r_2 = (0, 0)^T$ (was klar nach Theorie ist). Die eindeutige Lösung ist also $x = (1, 1)^T$.

Aufgabe 34 6 Punkte

Es sei $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ eine positiv definite und symmetrische Matrix mit $m \leq n$ verschiedenen Eigenwerten. Zeigen Sie, dass das CG-Verfahren die Lösung in höchstens m Schritten berechnet.

Hinweis: Betrachten Sie das Polynom

$$\frac{(-1)^m}{\lambda_1 \cdots \lambda_m}(x-\lambda_1)\cdots(x-\lambda_m)\,.$$

Lösung

Sei $\phi(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$. In der k. Iteration ist die Iterierte x_k im Krylov-Raum $\mathcal{K}_k$, also gilt

$$x_k = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i A^{i-1} b = p(A)b$$

für ein Polynom $p(s) = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i s^{i-1}$. Es folgt

$$2(\phi(x_k) - \phi(A^{-1}b)) = \inf_{x\in\mathcal{K}_k} \left\| x - A^{-1}b \right\|_A^2 = \inf_{\deg(p)<k} \left\| (p(A) - A^{-1})b \right\|_A^2 .$$

A ist positiv definit und symmetrisch, also existiert $S \in GL(n)$ mit $A = SDS^{-1}$ und $D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Weiterhin gilt

$$\left\| (p(A) - A^{-1})b \right\|_A^2 = \left\| (p(D) - D^{-1})S^{-1}b \right\|_D^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(\lambda_i p(\lambda_i) - 1)^2((S^{-1}b)_i)^2}{\lambda_i} .$$

Gesucht ist also dasjenige Polynom p mit $\deg(p) < k$, das obigen Ausdruck minimiert, oder äquivalent: es ist ein Polynom $\tilde{p}$ mit $\deg(\tilde{p}) \leq k$ gesucht, sodass

$$\inf_{\deg(p)<k} \sum_{i=1}^{n} \frac{(\lambda_i p(\lambda_i) - 1)^2((S^{-1}b)_i)^2}{\lambda_i} = \inf_{\deg(\tilde{p})\leq k,\ \tilde{p}(0)=1} \sum_{i=1}^{n} \frac{\tilde{p}(\lambda_i)^2((S^{-1}b)_i)^2}{\lambda_i} .$$

Falls A nur m verschiedene Eigenwerte besitzt (o.B.d.A $\lambda_i \neq \lambda_j$ für $1 \leq i < j \leq m$), können wir nun das Polynom

$$\tilde{p}(x) = \frac{(-1)^m}{\lambda_1 \cdots \lambda_m}(x-\lambda_1)\cdots(x-\lambda_m)$$

betrachten. Wegen $\tilde{p}(\lambda_i) = 0$ folgt die Behauptung.

Aufgabe 35 **6 Punkte**

Wir untersuchen den Aufwand des CG-Verfahrens für das Poisson-Problem auf dem n-dimensionalen Würfel $[0,1]^n \subset \mathbb{R}^n$. Sei dazu $\mathbf{A}_h \in \mathbb{R}^{N^n,N^n}$ die zugehörige finite Differenzen Matrix. Sie können verwenden (vgl. Sie hierzu Aufgabe 23), dass die Eigenwerte von $\mathbf{A}_h$ gegeben sind durch

$$\lambda_\alpha := \frac{4}{h^2} \sum_{i=1}^{n} \sin^2\left(\frac{\alpha_i \pi h}{2}\right),$$

wobei $h = \frac{1}{N+1}$ und $\alpha \in \{1, \ldots, N\}^n$.

i) Zeigen Sie, dass $\theta^* = \frac{h^2}{2n}$.
ii) Zeigen Sie, dass $\rho(M_{\theta^*}) = 1 - Ch^2 + O(h^3)$.
iii) Wie viele Schritte sind nötig, um eine gegebene Fehlertoleranz $\varepsilon > 0$ zu erreichen, d.h. ab welchem k gilt $\rho(M_{\theta^*})^k \leq \varepsilon$?
iv) Geben Sie den Gesamtaufwand des CG-Verfahrens an, um eine gegebene Fehlertoleranz $\varepsilon > 0$ zu erreichen. Benutzen Sie hierzu, dass für $\mathbf{A}_h$ die maximale Anzahl der von 0 verschiedenen Einträge pro Zeile gegeben ist durch $M = 1 + 2n$.

Lösung

i) Es ist

$$\lambda_{min} = \frac{4n}{h^2} \sin^2(\frac{\pi h}{2})$$
$$\lambda_{max} = \frac{4n}{h^2} \sin^2(\frac{\pi N}{2(N+1)}) = \frac{4n}{h^2} \cos^2(\frac{\pi h}{2})$$

Daher ist

$$\theta^* = \frac{2}{\lambda_{min} + \lambda_{max}} = \frac{h^2}{2n}\,.$$

ii) Weiterhin gilt

$$\rho(M_{\theta^*}) = \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}}{\lambda_{max} + \lambda_{min}}$$
$$= \cos^2(\frac{\pi h}{2}) - \sin^2(\frac{\pi h}{2}) = 1 - 2\sin^2(\frac{\pi h}{2})$$
$$= 1 - \frac{\pi^2}{2} h^2 + O(h^3)\,,$$

wobei im letzten Schritt die Taylorentwicklung von $\sin^2(\frac{\pi h}{2})$ benutzt wurde.
iii) Die Bedingung $\rho = \rho(M_{\theta^*})^k \leq \varepsilon$ is äquivalent zu

$$k \geq \frac{|\ln(\varepsilon)|}{|\ln(\rho)|}\,.$$

Taylorentwicklung von ln im Punkt 1 ergibt

$$\ln(x) = 0 + 1 \cdot (x-1) + O((x-1)^2)$$
$$\Rightarrow \ln(1 - \frac{\pi}{2} h^2 + O(h^3)) = O(h^2)\,,$$

also muss gelten

$$k \geq C|\ln(\varepsilon)| h^{-2}\,.$$

iv) Pro Iteration (Matrix-Vektor-Multiplikation) ist der Aufwand

$$O(N^n M) = O(N^n(1+2n))\,.$$

Daher ist der Gesamtaufwand $C|\ln(\varepsilon)|h^{-2} N^n (1+2n) = C|\ln(\varepsilon)| n h^{-n-2}$.

Bemerkung: Vergleich mit Gauss-Elimination:
Gauss benötigt Aufwand $O(N^n(N^{n-1})^2) = O(h^{-3n+2})$, also ab $n = 3$ ist CG schneller.

Aufgabe 36 **6 Punkte**

Sei $F \in C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ eine strikt konvexe Funktion mit $F(x) \to \infty$ für $\|x\| \to \infty$.
i) Zeigen Sie, dass es zu $p \neq 0$ ein eindeutig bestimmtes $\lambda^*(p, x)$ gibt mit

$$F(x + \lambda^* p) = \min_{\lambda \in \mathbb{R}} F(x + \lambda p)\,.$$

ii) Zeigen Sie, dass die Funktion

$$\lambda(x) := \min_{\lambda \in \mathbb{R}} F(x - \lambda \nabla F(x))$$

auf der Menge $M = \{x \in \mathbb{R}^n \ : \ \nabla F(x) \neq 0\}$ differenzierbar ist. **Tipp:** Betrachten Sie die Optimalitätsbedingung in λ und verwenden Sie den Satz über implizite Funktionen.
iii) Leiten Sie aus dem CG-Verfahren (unter der Annahme, dass λ^* berechenbar ist) ein Verfahren her, so dass die konstruierte Folge x^k gegen x^* mit $F(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x)$ konvergiert.

Lösung

i) Betrachte die Funktion $f(\lambda) = F(x + \lambda p)$. Da F strikt konvex ist und $p \neq 0$, ist auch f strikt konvex, daher ist ein Minimierer (falls er existiert) eindeutig. Für die Existenz betrachte eine Minimalfolge $(\lambda^k)_k$. Da $f(\lambda) \to \infty$ für $|\lambda| \to \infty$ ist $(\lambda^k)_k$ beschränkt und eine Teilfolge $(\lambda^{k_l})_l$ konvergiert gegen ein λ^*, das wegen der (Unterhalb-)Stetigkeit von f der gesuchte Minimierer ist.
ii) Da F differenzierbar ist, ist $\lambda^*(x)$ charakterisiert durch die Gleichung

$$\langle \nabla F(x - \lambda^*(x) \nabla F(x)), \nabla F(x) \rangle = 0$$

Wir betrachten also die Funktion

$$G(x, \lambda) = \langle \nabla F(x - \lambda \nabla F(x)), \nabla F(x) \rangle$$

1) Zu einem gegeben $x_0 \in M$ gibt es nach Teil i) ein λ_0 mit $G(x_0, \lambda_0) = 0$
2) Es ist

$$\frac{\partial G}{\partial \lambda}(x, \lambda) = -\nabla F(x)^T D^2 F(x - \lambda F(x)) \nabla F(x)$$

Wegen strikter Konvexität ist dieser Ausdruck kleiner als 0, insbesondere ungleich 0. Damit folgt die Aussage aus dem Satz über implizite Funktionen.
iii) Zu einem gegebenen Startwert x^0 definieren wir das Iterationsverfahren durch

$$p^k = -\nabla F(x^k)$$
$$\lambda^k = \lambda^*(p^k, x^k)$$
$$x^{k+1} = x^k + \lambda^k p^k\,,$$

solange $p^k \neq 0$ und sonst $x^{k+1} = x^k$.
Dann ist für $p^k \neq 0$:

$$F(x^{k+1}) = \min_{\lambda \in \mathbb{R}} F(x^k + \lambda p^k) \leq F(x^k)\,,$$

also ist die Folge $(F(x^k))_k$ monoton fallend. Sie ist sogar streng monoton fallend, denn falls $\lambda^k \neq 0$ gilt die strikte Ungleichung. Falls jedoch $\lambda^k = 0$, dann wäre $F(x^k) < F(x^k + \lambda p^k)$ für alle $\lambda \neq 0$ und damit

$$\frac{F(x^k + \lambda p^k) - F(x^k)}{|\lambda|} > 0 \quad \forall \lambda \neq 0$$
$$\Rightarrow \nabla F(x^k) \cdot p^k \geq 0$$

im Widerspruch zu $\nabla F(x^k) \cdot p^k = -\|\nabla F(x^k)\|$ und $p^k = -\nabla F(x^k) \neq 0$.
Zusammenfassend ist die Folge $(F(x^k))_k$ also streng monoton fallend, bis sie möglicherweise konstant wird und ab dann ist $\nabla F(x^k) = 0$.
Weiterhin ist für $p^k \neq 0$ auch $\lambda^k > 0$, denn aus der strikten Konvexität folgt

$$0 > F(x^{k+1}) - F(x^k) > \nabla F(x^k)^T(-\lambda^k \nabla F(x^k)) = -\lambda^k \|\nabla F(x^k)\|^2\,.$$

Um zu zeigen, dass $(x^k)_k$ konvergiert gehen wir wie folgt vor. Da $F(x) \to \infty$ für $\|x\| \to \infty$ ist somit $(x^k)_k$ beschränkt und es existiert eine weitere Teilfolge $x^{k_l} \to x^*$ für $l \to \infty$. Wegen der Stetigkeit von F gilt dann $F(x^{k_l}) \to F(x^*)$ für $l \to \infty$ Wegen der Monotonie von F konvergiert dann aber auch die gesamte Folge $(x^k)_k$.
Es bleibt noch zu zeigen, dass $\nabla F(x^*) = 0$ für den Fall, dass die Folge $(x^k)_k$ nicht konstant wird. Dazu benutzen wir

$$\|x^{k+1} - x^k\| = \lambda^k \|\nabla F(x^k)\|\,.$$

Angenommen $p^* = -\nabla F(x^*) \neq 0$. Dann muss $\lambda^k \to 0$, weil die Folge $(x^k)_k$ konvergiert. Wegen Stetigkeit von ∇F konvergiert (p^k) gegen $p^* \neq 0$. Wie bereits oben gezeigt, ist dann $\lambda^*(p^*, x^*) > 0$. Nach Aufgabenteil ii) ist aber λ auf der Menge M differenzierbar, insbesondere stetig, also ist dies ein Widerspruch zu $\lambda^k \to 0$.