Projektionsmethoden und polynomielle Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme

B. Kwella und U. Schendel

Preprint No. A-4/95

Forschungsprojekt "Parallele Numerik"
Institut für Mathematik I, FU Berlin

SERIE A MATHEMATIK

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung

Diese Arbeit gibt einen Überblick über iterative Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme und nimmt eine Klassifizierung vor. Es werden projektive und polynomielle Ansätze untersucht, die Ideen zur Lösung nichtsymmetrischer Systeme liefern. Aufbauend auf der hier vorgestellten allgemeinen Theorie, wie Minimierungs- und Konvergenzeigenschaften von Projektionsmethoden, werden spezielle Krylov-Projektionsmethoden untersucht und konkrete Algorithmen für unterschiedliche Problemstellungen angegeben.

1 Einleitung

In diesem Artikel werden eine Reihe von iterativen Methoden zur Lösung von linearen Gleichungssystemen der Form

$$Ax = b \tag{1}$$

untersucht, wobei $A \in I\!R^{N\times N}$ eine gegebene nichtsinguläre $N \times N$-Matrix, $b \in I\!R^N$ ein gegebener Vektor und $x \in I\!R^N$ der gesuchte Lösungsvektor ist.
In Anlehnung an die Arbeit von Joubert und Manteuffel (siehe [JoMa90]) werden effiziente Lösungverfahren für große, schwach besetzte Systeme, deren Koeffizientenmatrix A in der Regel unsymmetrisch ist, vorgestellt.

Iterative Methoden berechnen bekanntlich ausgehend von einem Startvektor $x_0 \in I\!R^N$ eine Folge von Näherungslösungen $\{x_i\}_{i\in I\!N}$, $x_i \in I\!R^N$, von (1) mit einem Algorithmus der Form

$$x_i = \Theta_{i-1}(x_{i-1}), \quad i \in I\!N, \tag{2}$$

wobei Θ_{i-1} die Iterationsvorschrift im i-ten Iterationsschritt darstellt. Weiterhin bezeichne $x_* \in I\!R^N$ die exakte Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$, $e_i = x_* - x_i$ den Fehler im i-ten Iterationsschritt und $r_i = b - Ax_i = Ae_i$ das Residuum.

Man sagt, ein iteratives Verfahren zur Lösung von (1) *bricht* im i-ten Iterationsschritt *ab*, wenn die Näherungslösung x_i nicht existiert oder nicht eindeutig ist. Ein nichtabbrechendes Verfahren *konvergiert*, falls bezüglich einer Vektornorm

$$\|e_i\| = \|x_i - x_*\| \longrightarrow 0, \quad i \to \infty, \tag{3}$$

gilt. Erhält man die exakte Lösung nach einer endlichen Anzahl von Iterationsschritten, so spricht man von einem *endlichen* Iterationsverfahren, d.h. es gibt ein $n \in I\!N$, so daß für alle $i \geq n \quad x_i = x_*$ gilt. [KwSch93]

Zur weiteren Bearbeitung werden folgende Notationen benötigt:
Zwei Vektoren $x, y \in I\!R^N$ heißen *A-orthogonal*, wenn

$$(x, Ay) = 0$$

gilt, wobei mit $(\cdot,\cdot)$ das euklidische *Skalarprodukt* im $I\!R^N$ bezeichnet wird.
Mit A^T bezeichnet man die transponierte Matrix von A. Weiterhin heißt eine Matrix $A \in I\!R^{N\times N}$ *symmetrisch*, falls $A = A^T$ gilt.
Eine symmetrische Matrix heißt positiv bzw. negativ *definit*, falls für alle $x \in I\!R^N \backslash \{0\}$

$$(x^T, Ax) > 0 \text{ bzw. } (x^T, Ax) < 0$$

gilt.
Ist A symmetrisch und positiv definit, dann wird durch

$$\|x\|_A := (x, Ax)^{1/2}$$

die sogenannte *A-Norm* definiert.

2 Projektionsmethoden

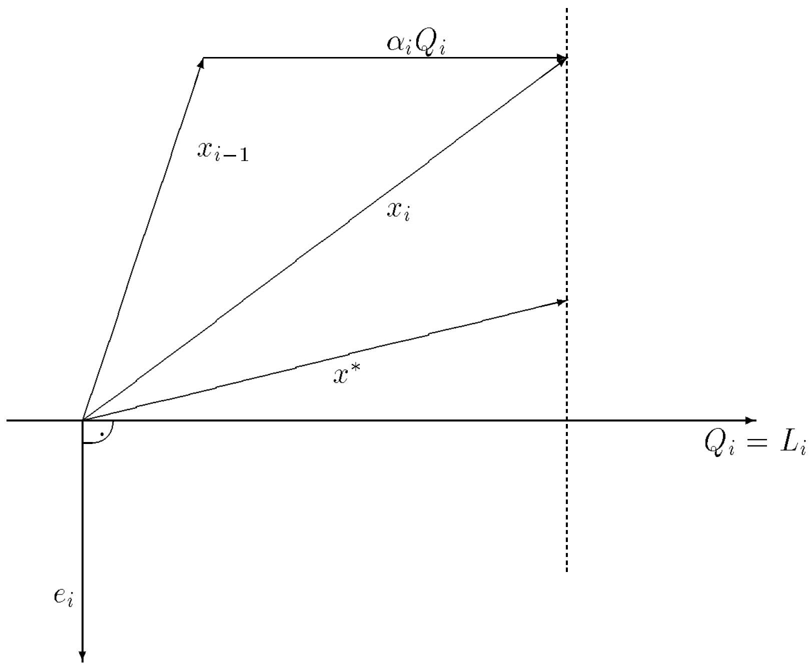
In diesem Abschnitt werden iterative Methoden behandelt, deren Näherungslösung eine Linearkombination der vorher berechneten Lösung und eines Vektors aus einem Unterraum ist. Für ein i bezeichnet man mit $\mathbf{L}_i$ einen l_i dimensionalen und mit $\mathbf{Q}_i$ einen q_i dimensionalen Unterraum des $\mathbb{R}^N$. Hiermit kann folgende Definition eingeführt werden.

Definition 2.1 *Ein iteratives Verfahren der Form (2) mit einem beliebigen Startvektor x_0 heißt Projektionsmethode, wenn für alle i, $i \in \mathbb{N}$, die Näherungslösung x_{i-1} existiert und x_i die folgenden Bedingungen erfüllt:*

(i) $x_i - x_{i-1} \in \mathbf{Q}_i$

(ii) $x_i - x_* \perp \mathbf{L}_i$

Man nennt $x_{i-1} + \mathbf{Q}_i$ auch den *Lösungsraum*, in dem die Näherungslösung x_i liegt. Definition 2.1 macht jedoch keine Aussage über Existenz und Eindeutigkeit von x_i. Die durch 2.1 (ii) gegebene Orthogonalitätsbeziehung bezeichnet man auch als *Petrov-Galerkin Bedingung*. Diese gibt an, daß der Fehler im i-ten Iterationsschritt senkrecht zu allen Vektoren des Unterraums $\mathbf{L}_i$ steht.
Die folgende Abbildung mit $\mathbf{L}_i = \mathbf{Q}_i$ verdeutlicht die Zusammenhänge.



Zur Konstruktion einer neuen Näherungslösung x_i wird x_{i-1} parallel zu $\mathbf{Q}_i$ verschoben und zwar so weit, daß der Fehler im i-ten Iterationsschritt e_i senkrecht zu $\mathbf{L}_i$ steht.

Sei nun $L_i = (l_1, \ldots, l_{l_i})$ [$Q_i = (q_1, \ldots, q_{q_i})$] die $N \times l_i$ [$N \times q_i$] Matrix, deren Spalten eine Basis des $\mathbf{L}_i$ [$\mathbf{Q}_i$] bilden. Die Näherungslösung einer Projektionsmethode kann dann nach 2.1 dargestellt werden als

$$x_i = x_{i-1} + Q_i \alpha_i \qquad \alpha_i \in I\!R^{q_i}. \tag{4}$$

Damit erhält man für das Residuum bzw. den Fehler

$$\begin{aligned} r_i &= b - Ax_i \\ &= r_{i-1} - AQ_i\alpha_i \\ e_i &= x_* - x_i \\ &= e_{i-1} - Q_i\alpha_i. \end{aligned} \tag{5}$$

Wendet man die Petrov-Galerkin Bedingung aus 2.1 auf L_i an, ergibt sich als Bedingung an α_i

$$L_i^T e_i = L_i^T e_{i-1} - L_i^T Q_i \alpha_i = 0,$$

wobei L^T die transponierte Matrix zu L_i ist. Äquivalent dazu erhält man α_i als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$L_i^T Q_i \alpha_i = L_i^T e_{i-1}$$

mit l_i Gleichungen und q_i Unbekannten. Für $l_i < q_i$ ergibt sich kein eindeutiges α_i und somit auch keine eindeutige Näherungslösung, während für $l_i > q_i$ gar keine Lösung existiert, bzw. nur eine mit kleinstem Abstand gefunden werden kann. Ist das Gleichungssystem quadratisch, so ergibt sich sofort folgendes Ergebnis.

Satz 2.1 *Ist $l_i = q_i$, dann bricht das Verfahren genau dann ab, wenn $L_i^T Q_i$ singulär ist, wenn also Rang $L_i^T Q_i < l_i$ bzw. q_i ist.*

In diesem Zusammenhang ergibt sich eine weitere wichtige Aussage.

Korollar 2.1 *Für ein e_0 sei das Projektionsverfahren nichtabbrechend und aus $x_{i-1} \neq x_*$ für alle i folgt $\dim \mathbf{Q}_{i-1} < \dim \mathbf{Q}_i$. Dann erhält man für ein $N \times N$-Problem die exakte Lösung (bei exakter Arithmetik) nach spätestens N Schritten, das Verfahren ist also endlich.*

Beweis : Die Näherungslösungen eines nicht abbrechenden Projektionsverfahren existieren und sind nach Definition eindeutig. Somit ist

$$\begin{aligned} & x_i &&= x_* \\ \Longleftrightarrow\ & e_i &&= x_* - x_i = 0 \\ \Longleftrightarrow\ & e_i &&= x_* - x_{i-1} - \alpha_i Q_i \\ & &&= e_{i-1} - \alpha_i Q_i = 0 \\ \Longleftrightarrow\ & e_{i-1} &&\in \mathbf{Q}_i \end{aligned}$$

Da $\dim \mathbf{Q}_i$ streng monoton wächst, existiert ein $n \leq N$ mit $e_{n-1} \in \mathbf{Q}_n$. Somit ist $x_n = x_*$ mit $n \leq N$ die exakte Lösung. □

Existiert nun die Inverse von $L_i^T Q_i$, ist also insbesondere $l_i = q_i$, dann gilt

$$\alpha_i = (L_i^T Q_i)^{-1} L_i^T e_{i-1}. \tag{6}$$

Somit lassen sich (4) und (5) schreiben als

$$x_i = x_{i-1} + Q_i (L_i^T Q_i)^{-1} L_i^T e_{i-1} \tag{7}$$

und

$$\begin{aligned} r_i &= (I - Q_i (L_i^T Q_i)^{-1} L_i^T) r_{i-1} \\ e_i &= (I - Q_i (L_i^T Q_i)^{-1} L_i^T) e_{i-1}. \end{aligned} \tag{8}$$

Definiert man nun

$$P_i := I - Q_i (L_i^T Q_i)^{-1} L_i^T \tag{9}$$

so ist P_i eine Projektion, da

$$\begin{aligned} P_i^2 &= I - 2 Q_i (L_i^T Q_i)^{-1} L_i^T + Q_i (L_i^T Q_i)^{-1} (L_i^T Q_i)(L_i^T Q_i)^{-1} L_i^T \\ &= P_i \end{aligned}$$

gilt. Damit ergibt sich die für Projektionsmethoden charakteristische Darstellung des Fehlers

$$e_i = P_i \, e_{i-1}$$

bzw. des Residuums

$$r_i = P_i \, r_{i-1}.$$

Im Folgenden wird nun untersucht, unter welchen Bedingungen ein Projektionsverfahren nicht abbrechend ist. Es kann immer eine Matrix $B_i \in \mathbb{R}^{N \times N}$ konstruiert werden mit $L_i = B_i^T Q_i$, wenn $\mathbf{L}_i$ und $\mathbf{Q}_i$ die gleiche Dimension $\neq 0$ besitzen. Dabei ist $B_i^T := L_i (Q_i^T Q_i)^{-1} Q_i^T$.
Mit Hilfe von $B_i = Q_i (Q_i^T Q_i)^{-1} L_i^T$ kann (9) geschrieben werden als

$$P_i = I - Q_i (Q_i^T B_i Q_i)^{-1} Q_i^T B_i.$$

Die Matrix B_i beschreibt die Abhängigkeit zwischen den beiden Unterräumen $\mathbf{Q}_i$ und $\mathbf{L}_i$. Ist B_i definit bzgl. $\mathbf{Q}_i$, also $v^T B_i v \neq 0$ für alle $v \in \mathbf{Q}_i \backslash \{0\}$ gilt, so ist auch $Q_i^T B_i Q_i = L_i^T Q_i$ definit und somit nichtsingulär, das Verfahren bricht nach Satz 2.1 im i-ten Iterationsschritt nicht ab. Dieses Ergebnis motiviert den folgenden Satz:

Satz 2.2 (Beschränktheit) *Sei $l_i = q_i \neq 0$ und $L_i = B_i^T Q_i$ für alle i, wobei $\mathbf{Q}_i, \mathbf{L}_i$ und B_i von e_0 abhängig sein können. Weiterhin nimmt man an, daß ein c_i, welches unabhängig von e_0 ist, existiert mit der Eigenschaft*

$$0 < \|B_i\| \|y\|^2 \leq c_i |y^T B_i y|$$

für alle e_0 und alle $y \in \mathbf{Q}_i \backslash \{0\}$.
Dann bricht das Verfahren in keinem Schritt ab und es gilt die Abschätzung

$$\|x_i\| \leq \|x_{i-1}\| + c_i \|e_{i-1}\|.$$

Beweis : Sei $y = Q_i v$, dann ist $y^T B_i y = v^T L_i^T Q_i v$. Nach Voraussetzung gilt nun :

$$\frac{v^T L_i^T Q_i v}{v^T v} \frac{\|v\|^2}{\|Q_i v\|^2} = \frac{y^T B_i y}{\|y\|^2} \geq \frac{\|B_i\|}{c_i} > 0.$$

Daraus folgt, daß $L_i^T Q_i$ definit und somit nichtsingulär ist, das Verfahren bricht in diesem Schritt also nicht ab.
Um die Abschätzung zu zeigen, betrachtet man eine Näherungslösung

$$x_i = x_{i-1} + Q_i (Q_i^T B_i Q_i)^{-1} Q_i^T B_i e_{i-1}.$$

Setzt man hier $\tilde{Q}_i = Q_i R$ mit R quadratisch und $\tilde{Q}_i^T \tilde{Q}_i = I$, dann kann man x_i schreiben als

$$x_i = x_{i-1} + \tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i)^{-1} \tilde{Q}_i^T B_i e_{i-1}.$$

Dann gilt die Abschätzung

$$\|x_i\| \leq \|x_{i-1}\| + \|\tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i)^{-1}\| \|\tilde{Q}_i^T B_i e_{i-1}\|.$$

Um eine untere Schranke für $\|x_i\|$ zu finden, betrachtet man weiterhin

$$\begin{aligned}
\|\tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i)^{-1}\|^2 &= 1/\min_{\|w\|=1} \|\tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i w\|^2 \\
&= 1/\min_{\|w\|=1} w^T \tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i (ww^T + (I - ww^T)) \tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i w \\
&= 1/\min_{\|w\|=1} (|w^T \tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i w|^2 + \|(I - ww^T)) \tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i w\|^2) \\
&\leq 1/\min_{\|w\|=1} |w^T \tilde{Q}_i (\tilde{Q}_i^T B_i \tilde{Q}_i|^2 \\
&\leq 1/\min_{y \in Q_i, \|y\|=1} |y^T B_i y|^2.
\end{aligned}$$

Dabei folgt die letzte Ungleichung mit $y = \tilde{Q}_i w$ aus der Tatsache, daß $\|\tilde{Q}_i w\| = \|w\|$ gilt. Beachtet man die Voraussetzungen an B, so erhält man schließlich

$$\begin{aligned}
\|x_i\| &\leq \|x_{i-1}\| + \sup_{y \in Q_i \backslash \{0\}} \frac{\|y\|^2}{|y^T B_i y\|} \|B_i\| \|e_{i-1}\| \\
&\leq \|x_{i-1}\| + c_i \|e_{i-1}\|.
\end{aligned}$$

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß ein Projektionsverfahren im i-ten Iterationschritt nicht abbricht, wenn die Matrix B_i, die die Beziehung zwischen den zwei dimensionsgleichen Unterräumen $\mathbf{L}_i$ und $\mathbf{Q}_i$ beschreibt, definit ist bzw. gewissen Schranken unterliegt. Wächst außerdem die Dimension der Unterrräume in jedem Schritt, so ist das Verfahren endlich.

2.1 Balanzierte Projektionsmethoden

In diesem Abschnitt werden Projektionsmethoden untersucht, wo es möglich ist, die Abhängigkeit der Unterräume durch eine feste Matrix B darzustellen. Ihre besonderen Eigenschaften werden vorgestellt.

Definition 2.2 *Man nennt eine Projektionsmethode balanziert, falls eine feste Matrix $B \in \mathbb{R}^{N \times N}$ existiert, so daß für alle i und e_0 gilt:*

$$L_i = B^T Q_i.$$

Die Petrov-Galerkin Bedingung $e_i \perp \mathbf{L}_i$ aus Definition 2.1 (ii) ist somit äquivalent zu $e_i \perp B^T Q_i$, also gilt

$$(Be_i, z) = 0 \qquad \forall z \in \mathbf{Q}_i.$$

Ist die Matrix B definit, also $y^T By \neq 0$ für alle $y \neq 0$, so sind die Voraussetzungen von Satz 2.2 erfüllt. Beachtet man, daß eine reelle Matrix B genau dann definit ist, wenn ihr symmetrischer Anteil $H(B) := \frac{B^T+B}{2}$ positiv bzw. negativ definit ist (siehe [JoYo87]), so ergibt sich folgendes Ergebnis sofort aus Satz 2.2.

Korollar 2.2 (Beschränktheit) *Eine balanzierte Projektionsmethode bricht in keinem Schritt ab, falls B definit ist. Gilt außerdem*

$$\rho_{min}(B) = \inf_{x \neq 0} \frac{|y^T By|}{y^T y},$$

dann ist

$$\|x_i\| \leq \|x_{i-1}\| + \frac{\|B\|}{\rho_{min}(B)} \|e_{i-1}\|.$$

Beweis : Der Beweis ist eine direkte Anwendung von Satz 2.2. □

Wiederum erhält man ein wichtiges Resultat, wenn die Dimension der Unterräume $\mathbf{L}_i$ und $\mathbf{Q}_i$ in jedem Iterationsschritt wächst.

Satz 2.3 (gleichmäßige Beschränktheit) *Seien die Vorausetzungen von Korollar 2.2 erfüllt und gilt zusätzlich $\mathbf{Q}_i \subseteq \mathbf{Q}_{i+1}$ für alle i, dann existiert für alle i die Schranke*

$$\|x_i\| \leq \|x_0\| + \frac{\|B\|}{\rho_{min}(B)} \|e_0\|.$$

Beweis : Der Beweis kann analog zum Beweis von Satz 2.2 geführt werden unter Beachtung, daß eine Näherungslösung x_i unter der Voraussetzung $\mathbf{Q}_i \subseteq \mathbf{Q}_{i+1}$ folgende Form hat:

$$x_i = x_0 + Q_i(Q_i^T B_i Q_i)^{-1} Q_i^T B_i e_0.$$

$\square$

Ist die Matrix B selbst symmetrisch und positiv definit, dann ist der Projektor $P_i = Q_i(Q_i^T B_i Q_i)^{-1} Q_i^T B_i$ orthogonal bzgl. des inneren Produktes $(\cdot,\cdot)_B := (B\cdot,\cdot)$. In diesem Fall wird durch $\|\cdot\|_B$ eine Norm definiert und man findet eine Näherungslösung, die den Fehler bzgl. dieser Norm minimiert.

Satz 2.4 (Minimierung) *Basiert eine balanzierte Projektionsmethode auf einer Matrix B, die symmetrisch und positiv definit ist, dann ist x_i das eindeutige Minimum des Fehlers $\|e_i\|_B$ über dem affinen Lösungsraum $x_{i-1} + \mathbf{Q}_i$ und es gilt $\|e_i\|_B \leq \|e_{i-1}\|_B$.*

Beweis : Unter obigen Voraussetzungen und Beachtung der Darstellung $e_i = P_i e_{i-1}$ erhält man nun, daß e_i die B-orthogonale Projektion von e_{i-1} auf das Komplement von $\mathbf{Q}_i$ ist und es gilt:

$$\begin{aligned} e_i^T B e_i &= e_{i-1}^T B e_{i-1} - e_{i-1} B Q_i (Q_i^T B Q_i)^{-1} Q_i^T B e_{i-1} \\ &\leq e_{i-1}^T B e_{i-1}. \end{aligned}$$

Man nimmt nun an, daß eine weitere Näherungslösung $x^{'}$ aus dem Lösungsraum existiert. Sei $e^{'} = x_* - x^{'}$ der dazugehörige Fehler, dann ist für ein w

$$e^{'} = e_i + Q_i w.$$

Wendet man die Eigenschaften des Projektors an, so erhält man

$$\begin{aligned} e^{'T} B e^{'} &= e_i^T B e_i + w^T Q_i^T B Q_i w \\ &> e_i^T B e_i \quad \text{für } w \neq 0, \end{aligned}$$

was zeigt, daß x_i das eindeutige Minimum ist. $\square$

Eine Aussage über die Konvergenz von Projektionsverfahren macht der folgende Satz, der ein Theorem von [EiES83] verallgemeinert.

Satz 2.5 (Konvergenz) *Für eine balanzierte Projektionsmethode, die auf einer symmetrisch positiv definiten Matrix B basiert, für die $Z := BA^{-1}$ definit und außerdem $r_{i-1} \in \mathbf{Q}_i$ ist, gilt: Es existiert ein $\epsilon > 0$, unabhängig von e_0, so daß für alle i die Abschätzung*

$$\|e_i\|_B \leq (1-\epsilon)\|e_{i-1}\|_B$$

gültig ist.

Beweis: Ist B symmetrisch und positiv definit, dann wird der Fehler e_i über dem affinen Unterraum $e_{i-1} + \mathbf{Q}_i$ bzgl. der B-Norm minimiert. Sei nun

$$\tilde{e}_i = e_{i-1} - \lambda A e_{i-1},$$

wobei λ durch die Beziehung $B\tilde{e}_i \perp A e_{i-1} = r_{i-1}$ definiert ist. Falls dies eine Minimierung über einem kleineren Unterraum nach sich zieht, muß gelten:

$$\|e_i\|_B \leq \|\tilde{e}_i\|_B.$$

Man erhält

$$\lambda = \frac{(Ae_{i-1})^T B(e_{i-1})}{(Ae_{i-1})^T B(Ae_{i-1})}.$$

Mit den projektiven Eigenschaften ergibt sich

$$\|\tilde{e}_i\|_B^2 = \|e_{i-1}\|_B^2 - \frac{|e_{i-1}^T B A e_{i-1}|^2}{(Ae_{i-1})^T B(Ae_{i-1})}.$$

Unter Vernachlässigung der Indizes und Beachtung von $Ae = r$ erhält man schließlich

$$\begin{aligned}
\frac{\|\tilde{e}\|_B^2}{\|e\|_B^2} &= 1 - \frac{|e^T B A e|^2}{(e^T B e)(e^T A^T B A e)} \\
&= 1 - \frac{|r^T A^{-1\,T} B r|^2}{(r^T A^{-1\,T} B A^{-1} r)(r^T B r)} \\
&= 1 - \frac{|r^T Z r|^2}{(r^T A^{-1\,T} B A^{-1} r)(r^T B r)} \\
&\leq 1 - \frac{\rho_{min}(Z)^2}{\|A^{-1}\|^2 \ \ \|B\|^2}
\end{aligned}$$

mit

$$\rho_{min}(M) = \min_{v \neq 0} \frac{v^T M v}{v^T v}$$

für jede Matrix M, die definit ist genau dann, wenn $\rho_{min}(M) \neq 0$ ist. □

Zusammenfassend kann nun für balanzierte Projektionsmethoden festgestellt werden, daß sie, basierend auf einer definiten Matrix B, nicht abbrechend sind. Ist die Matrix B weiterhin sogar symmetrisch und positiv definit, so erhält man Verfahren, die eine minimale Näherungslösung erzeugen und konvergent sind.

2.2 Beispiele und Algorithmen

In diesem Abschnitt wird die Konstruktion eines speziellen Projektionsverfahren vorgestellt, welches in [GrPfSch91] genau analysiert wird.

Man definiert sich zunächst zu einer Näherungslösung x_{i-1} eine Hyperebene $E_i \in I\!R^{N-1}$ der Form

$$E_i := \{v \in I\!R^N | p_{i-1}^T Av - p_{i-1}^T b = 0\},$$

mit einem geeigneten p_{i-1}. Wählt man $\mathbf{Q}_i := A^T p_{i-1}$, so ist $\mathbf{Q}_i$ orthogonal zu E_i. Charakteristisch für Projektionsmethoden ist eine Näherungslösung x_i somit darstellbar als

$$x_i = x_{i-1} + \lambda_{i-1} A^T p_{i-1}, \quad \lambda_{i-1} \in I\!R,$$

sie wird also parallel zu $A^T p_{i-1}$ um den Betrag λ_{i-1} verschoben und somit orthogonal auf E_i projiziert. Da aber auch $x_i \in E_i$ ist, gilt

$$\lambda_{i-1} = -\frac{p_{i-1}^T r_{i-1}}{p_{i-1}^T A A^T p_{i-1}}.$$

Beim **Projektionsverfahren von Kaczmarz** unterteilt man jeden Iterationsschritt in N Teilschritte, d.h. man wählt $p_{i-1} := e_j$, $j = 1, \ldots, N$, den j-ten Einheitsvektor und erhält so

$$x_i = x_{i-1} - \frac{e_j r_{i-1}}{\|A^T e_j\|} A^T e_j, \quad j = 1, \ldots, N.$$

Man kann dieses Verfahren verallgemeinern, in dem man den Vektor p_{i-1} durch eine Matrix V_i ersetzt, es wird also nicht mehr unbedingt auf eine Hyperebene, sondern auf einen Unterraum beliebiger Dimension projiziert.

Seine Anwendung findet das Projektionsverfahren von Kaczmarz im Zusammenhang mit blockiterativen Methoden, so daß aus ihnen parallele Algorithmen gewonnen werden können.

3 Polynomielle Methoden

In diesem Kapitel werden iterative Methoden vorgestellt, die ebenso wie Projektionsmethoden eine Näherungslösung als Linearkombination der vorher berechneten Lösung und eines Vektors aus einem Unterraum bestimmen. Hier wird jedoch a priori keine Orthogonalitätseigenschaft des Fehlers gefordert. Zur Konstruktion der Lösungsräume werden zunächst einige Begriffe eingeführt.

Mit Π_k^n bezeichne man die Menge aller Polynome P_k vom Grad $\leq k$, für die $P_k(0) = n$ gilt. Damit ergibt sich folgende Definition.

Definition 3.1 *Sei $r_i = b - Ax_i \neq 0$ das Residuum eines Iterationsverfahrens zur Lösung von (1) mit einem beliebigen Startvektor x_0. Dann heißt ein Polynom $R_{ik} \in \Pi_{ik}^1$, $k \in I\!N$, Residuenpolynom von A, wenn für das Residuum*

$$r_i = R_{ik}(A) r_0,$$

gilt.

Besitzt das Residuum eine Residuenpolynomdarstellung, dann gilt auch für den Fehler

$$e_i = R_{ik}(A)e_0.$$

Mit diesem Begriff kann nun folgende Definition eingeführt werden.

Definition 3.2 *Ein iteratives Verfahren der Form (2) mit einem beliebigen Startvektor x_0 heißt polynomielle (polynomial-based) Methode k-ten Grades, wenn für das Residuum eine Residuenpolynomdarstellung existiert und das Residuenpolynom im i-ten Iterationsschritt vom Grad ik ist.*

In jedem Iterationsschritt ist daher das Residuenpolynom vom Grad k.

Ebenso wie die Definition des Residuenpolynoms verallgemeinert auch Definition 3.2 die sonst in der Literatur gebräuchlichen Begriffe. Einige Autoren, wie beispielsweise Elman und Saad ([Elma82], [Saad87]), definieren ein Residuenpolynom nur für den Fall, daß $k = 1$ gilt, woraus die in Abschnitt 3.1 gezeigten speziellen Eigenschaften folgen.

Zuvor jedoch wird noch eine generelle Aussage bezüglich der Konvergenz dieser Verfahren angegeben.

Lemma 3.1 *Ein Iterationsverfahren der Form (2), das außerdem eine polynomielle Methode k-ten Grades ist, konvergiert, falls*

$$\lim_{i\to\infty} \|R_{ik}(A)\| = 0 \tag{10}$$

gilt.

Beispielsweise bestimmen *Tschebyscheff-Methoden*, die zu den polynomiellen Methoden gehören, ein Residuenpolynom in Abhängigkeit vom Spektrum der Matrix A so, daß dessen Norm möglichst klein ist. Die im nächsten Abschnitt untersuchten Iterationsverfahren verwenden andere Ansätze zur Konstruktion eines geeigneten Residuenpolynoms.

3.1 Krylov-Projektions-Methoden

Polynomielle Methoden ersten Grades besitzen also im i-ten Iterationsschritt ein Residuenpolynom vom Grade $\leq i$, also $r_i = R_i(A)r_0$. Somit gilt

$$\begin{aligned} b - Ax_i &= R_i(A)r_0 \\ b - r_0 - (c_1A + \ldots + c_iA^i)r_0 &= Ax_i \\ Ax_0 - (c_1A + \ldots + c_iA^i)r_0 &= Ax_i. \end{aligned}$$

Da A regulär ist, liegt eine Näherungslösung x_i in

$$\begin{aligned} x_i &\in x_0 + \text{ span } \{r_0, Ar_0, A^2r_0, \ldots, A^{i-1}r_0\} \\ x_i &\in x_0 + \mathbf{K}_i(r_0, A). \end{aligned} \tag{11}$$

$\mathbf{K}_k(x, A) =$ span $\{x, Ax, A^2x, \ldots, A^{k-1}x\}$ nennt man *Krylov-Raum*. Deshalb bezeichnet man polynomielle Verfahren ersten Grades auch als Krylov-Methoden. Der Krylov-Raum hat die Dimension k, wenn die durch $A \in I\!R^{N\times N}$ und $x \in I\!R^N \backslash \{0\}$ erzeugten Vektoren $\{x, Ax, A^2x, \ldots, A^{k-1}x\}$, $k \in I\!N$, $k \le N$ linear unabhängig sind.
Hierzu betrachtet man das Minimalpolynom eines Vektors $x \in I\!R^N \backslash \{0\}$ bezüglich der Matrix A, welches das Polynom kleinsten Grades $P_k \in \Pi_k$ mit $k \le N$ ist, für das

$$P_k(A)x = 0$$

gilt. Das Minimalpolynom $P_k(A)$ zu $x \neq 0$ ist genau dann vom Grad k, wenn für jedes $j < k$ die Vektoren $\{x, Ax, A^2x, \ldots, A^jx\}$ linear unabhängig und die Vektoren $\{x, Ax, A^2x, \ldots, A^kx\}$ linear abhängig sind. Somit gilt $\mathbf{K}_i(x, A) \subset \mathbf{K}_{i+1}(x, A)$ für alle $i \le k$.

Eine Näherungslösung x_i einer Krylov-Methode ist nach (11)

$$x_i = x_{i-1} + \alpha_{i-1}p_{i-1} \qquad \alpha_{i-1} \in I\!R, \;\; p_{i-1} \in \mathbf{K}_i(r_0, A). \tag{12}$$

Somit ist

$$\begin{aligned} e_i &= x_* - x_i = x_* - x_{i-1} - \alpha_{i-1}p_{i-1} \\ &= e_{i-1} - \alpha_{i-1}p_{i-1}, \\ r_i &= r_{i-1} - \alpha_{i-1}Ap_{i-1}. \end{aligned}$$

Mit $p_0 := r_0$ liegt $r_i \in \mathbf{K}_i(r_0, A)$, besitzt also eine Residuenpolynomdarstellung $r_i = R_i(A)r_0$ und erfüllt so Definition 3.2.
Viele polynomielle Verfahren zur Lösung des linearen Gleichungssystem $Ax = b$ basieren auf dem Prinzip anstelle von (1) ein äquivalentes Minimierungsproblem zu formulieren. Sie lösen in jedem Iterationsschritt ein Optimierungsproblem, d.h. sie bestimmen α_i derart, daß der Fehler bzw. das Residuum bzgl. irgendeiner Vektornorm über einem affinen Unterraum minimal ist. Die bekanntesten Vertreter dieser Methoden sind Abstiegsverfahren. Charakteristisch für diese Klasse von Iterationsverfahren ist der Abstieg in Gradientenrichtung der zu minimierenden Funktion. In Abschnitt 3.2 werden konkrete Algorithmen angegeben, die ihre Richtungsvektoren in Abhängigkeit von Eigenschaften der Koeffizientenmatrix A bzw. der durch die Unterräume bestimmten Matrix B wählen. Beispielsweise konstruiert man A-orthogonale bzw. A^TA-orthogonale Richtungsvektoren p_i, die zugehörigen Residuen ergeben sich dann als orthogonal bzw. A-orthogonal zueinander.

Zur Konstruktion polynomieller Methoden, die außerdem projektive Eigenschaften besitzen, wählt man $\mathbf{Q}_i = \mathbf{K}_i(r_0, A)$ und bestimmt die Richtungsvektoren p_i derart, daß die Petrov-Galerkin Bedingung

$$Be_i \perp \mathbf{K}_i(r_0, A)$$

erfüllt ist. Diese Krylov-Methoden sind somit auch balanzierte Projektionsmethoden; man nennt sie *Krylov-Projektionsmethoden.*
Aus der Orthogonalitätsbeziehung $e_i \perp B^T \mathbf{K}_i(r_0, A)$ und der Existenz von $\alpha_i p_i$ mit $\alpha_i \neq 0$, erhält man sofort, daß

$$\begin{aligned} p_i &\in \mathbf{K}_{i+1}(r_0, A) \\ p_i &\perp B^T \mathbf{K}_i(r_0, A) \end{aligned} \tag{13}$$

gilt.

Polynomielle Projektionsverfahren ersten Grades sind endlich. Dies folgt einerseits aus Satz 2.1, da sie balanzierte Projektionsmethoden sind und die Dimension der Unterräume in jedem Schritt wächst. Anderseits erhält man dieses Ergebnis für polynomielle Iterationsverfahren, die Näherungslösungen mit orthogonalen Residuen in einem Krylov-Raum bestimmen, durch Betrachtungen des Minimalpolynoms.

Satz 3.1 *Die Näherungslösung x_n einer polynomielle Methode ersten Grades mit orthogonalen Residuen ist gleich der exakten Lösung x_* des Gleichungssystems $Ax = b$ (bei exakter Arithmetik) genau dann, wenn der Grad des Minimalpolynoms von r_0 bezüglich der Matrix A gleich n ist.*

Beweis : Sei nun $x_n = x_*$, dann gilt

$$r_n = R_n(A) r_0 = 0.$$

Dies bedeutet aber, daß die Vektoren $\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^n r_0\}$ linear abhängig sind, da sie eine nichttriviale Darstellung der Null bilden.

Weiterhin gilt für alle $j < n$

$$r_j = R_j(A) r_0 \neq 0,$$

und nach obigen Betrachtungen folgt die lineare Unabhängigkeit der Vektoren $\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^j r_0\}$. Weiterhin gilt dies aber genau dann, wenn das Minimalpolynom von r_0 bezüglich A den Grad n hat.

Umgekehrt impliziert aber die lineare Abhängigkeit der $\{r_0, \ldots, A^n r_0\}$ und die lineare Unabhängigkeit der $\{r_0, \ldots, A^{n-1} r_0\}$ die Gleichheit der durch sie aufgespannten Krylov-Räume $\mathbf{K}_n(r_0, A) = \mathbf{K}_{n-1}(r_0, A)$. Nach Konstruktion ist $r_n \in \mathbf{K}_n(r_0, A) = \mathbf{K}_{n-1}(r_0, A)$ und außerdem orthogonal zu $\mathbf{K}_{n-1}(r_0, A)$. Dies kann aber nur erfüllt sein, wenn $r_n = 0$ ist. Weiterhin gibt es aber auch kein $j < n$ mit $r_j = 0$, da dies im Widerspruch zur linearen Unabhängigkeit steht. $\square$

Da im $\mathbb{R}^N$ aber $N+1$-Vektoren linear abhängig sind und deshalb

$$r_N = R_N(A) r_0 = c_0 r_0 + c_1 A r_0 + \cdots + c_N A^N r_0 = 0$$

gilt, erhält man daraus sofort

Korollar 3.1 *Für ein $N \times N$-Problem erhält man nach spätestens N Schritten die Lösung.*

Weitere wichtige Aussagen über Krylov-Projektionsmethoden ergeben sich analog zu Satz 2.2 bis 2.5. Auch hier erhält man Resultate, die abhängig von Eigenschaften der Matrix B sind.
So ist eine polynomielle Projektionsmethode mit einer festen Matrix B genau dann *nicht abbrechend*, wenn B definit ist. Dies bedeutet aber auch, ist B indefinit, so bricht das Verfahren im ersten Iterationsschritt ab, da für ein $r_0 \neq 0$ gilt: $r_0^T B r_0 = 0$. Allgemeiner kann festgestellt werden:

Satz 3.2 *Ein Krylov-Projektionsmethode mit einem beliebigen Startresiduum r_0, basierend auf der Matrix A und einer festen Matrix B, sei nichtabbrechend im i-ten Schritt und es gelte $x_i \neq x_*$. Dann bricht das Verfahren auch im $i+1$-ten Iterationsschritt genau dann nicht ab, wenn für den, bis auf Vielfache, eindeutigen Richtungvektor p_i, der die Bedingungen (13) erfüllt, gilt:*

$$p_i^T B p_i \neq 0.$$

Beweis: Ein Induktionsargument liefert: In jedem Iterationsschritt existiert der eindeutige Richtungsvektor $p_i \in \mathbf{K}_{i+1}(r_0, A)$ und erfüllt $p_i \perp B^T \mathbf{K}_i(r_0, A)$ genau dann, wenn $p_j^T B p_j \neq 0$ für $j < i$. Ein eindeutiges α_i existiert nun genau dann, wenn $p_i^T B p_i \neq 0$ gilt. □

Wendet man nun die Orthogonalitätsbeziehung $e_{i+1} \perp B^T \mathbf{K}_{i+1}(r_0, A)$ auf $p_i \in \mathbf{K}_{i+1}(r_0, A)$ an, so erhält man sofort $(e_i, Bp_i) - \alpha_i (p_i, Bp_i) = 0$, woraus sich unter Beachtung von $(p_i, Bp_i) \neq 0$

$$\alpha_i = \frac{(e_i, Bp_i)}{(p_i, Bp_i)} \tag{14}$$

ergibt. Weiterhin existiert ein Vektor $p_i \neq 0$ nur, wenn i kleiner als der Grad des Minimalpolynoms von r_0 bzgl. der Matrix A ist. Aus (13) und (14) erhält man, daß die Richtungsvektoren B orthogonal sind, d.h. $p_j^T B p_i = 0$ für alle $j < i$. Somit sind sie insbesondere linear unabhängig und bilden eine Basis für den Raum span $\{p_0, \ldots, p_{i-1}\} =$ span $\{r_0, \ldots, r_{i-1}\} =$ span $\{r_0, Ar_0, \ldots, A^{i-1} r_0\} = \mathbf{K}_i(r_0, A)$.

Wählt man für eine Krylov-Projektionsmethode einen geeigneten Startvektor x_0, so daß der Fehler e_0 und x_0 gewissen Schranken unterliegen, und ist wiederum die Matrix B definit, so ergibt sich analog zu Satz (2.2) auch hier die *Beschränktheit* der Folge von Näherungslösungen.
Auch die Eigenschaft der *Minimierung* überträgt sich für eine symmetrisch und positiv definite Matrix B. Man erhält also eine eindeutig bestimmte Näherungslösung x_i, die den Fehler e_i bzgl. der B-Norm über dem Lösungsraum $x_0 + \mathbf{K}_i(r_0, A)$ minimiert. Für weitere Diskussionen sei auf [JoMa90] verwiesen.

Wie schon oben erwähnt, ergeben sich durch die unterschiedliche Wahl von B, die natürlich auch abhängig ist von Eigenschaften der Koeffizientenmatrix A, verschiedene Iterationsverfahren, auf die im nächsten Abschnitt näher eingegangen wird.

3.2 Beispiele und Algorithmen

Krylov-Projektionsmethoden können in drei wichtige Unterklassen, abhängig von Eigenschaften, die die Matrix B erfüllt, eingeteilt werden. Verfahren, die durch eine symmetrisch positiv definite Matrix B charakterisiert sind, heißen **konjugierte Gradientenmethoden**.
Das klassische *konjugierte Gradienten-Verfahren (cg-Verfahren)* liefert für eine symmetrisch positiv definite Matrix A eine eindeutige Näherungslösung x_i, die den Fehler über dem Unterraum minimiert. Genaue Untersuchungen findet man beispielsweise bei [Hest80].

Für einen beliebigen Startvektor $x_0 \in I\!R^N$ und $r_0 = b - Ax_0$ führt man folgende Iterationen mit $p_0 = r_0$ durch:

$$\begin{aligned}
x_i &= x_{i-1} + \alpha_{i-1} p_{i-1} \\
& \quad mit \;\; \alpha_{i-1} = \frac{(r_{i-1}, p_{i-1})}{(p_{i-1}, Ap_{i-1})} \\
r_i &= r_{i-1} - \alpha_{i-1} p_{i-1} \\
p_i &= r_i - \beta_{i-1} p_{i-1} \\
& \quad mit \;\; \beta_{i-1} = \frac{(r_i, Ap_{i-1})}{(p_{i-1}, Ap_{i-1})}
\end{aligned}$$

Die durch das cg-Verfahren erzeugten Richtungsvektoren p_i sind für eine symmetrische positiv definite Koeffizientenmatrix A-orthogonal, d.h. $(p_i, Ap_j) = 0$, für $i \neq j$. Insbesondere sind die Vektoren $\{p_0, \ldots, p_{i-1}\}$ linear unabhängig und spannen einen Unterraum des $I\!R^N$ auf. Die Residuen r_i sind orthogonal und somit insbesondere linear unabhängig. Das cg-Verfahren ist eine polynomielle Methode ersten Grades, da die Menge der Richtungsvektoren bzw. der Residuen einen Krylov-Raum der Dimension i aufspannen, d.h. $r_i \in \mathbf{K}_i(r_0, A)$, es existiert also eine Residuenpolynomdarstellung $r_i = R_i(A)r_0$. Eine Näherungslösung x_i liegt in $x_0 + \mathbf{K}_i(r_0, A)$ und minimiert die Funktion $E(x) = \|e\|_A^2$ über dem affinen Krylovraum.
Ebenso gehört das cg-Verfahren mit $B = A$ zu den balanzierten Projektionsmethoden mit einer symmetrisch positiv definiten Matrix B. Der Fehler e_i steht somit senkrecht zu $A\mathbf{K}_i$.

Das *konjugierte Residuen-Verfahren (cr-Verfahren)* ist eine Variante des cg- Verfahrens für eine symmetrisch positiv definite Matrix A, bei der nicht der Fehler, sondern das Residuum minimiert wird. Der Grundalgorithmus des cg-Verfahrens bleibt bei diesem Verfahren erhalten. Da jedoch hier das Optimum der Funktion $F(x) := \|r\|_2^2$ zu bestimmen ist, unterscheiden sich die α_i und β_i von denen des cg-Verfahrens. Wählt man $\alpha_i = \frac{(r_i, Ap_i)}{(Ap_i, Ap_i)}$ und $\beta_i = \frac{(Ar_{i-1}, Ap_i)}{(Ap_i, Ap_i)}$, so konstruiert man $A^T A$-orthogonale Richtungsvektoren p_i und die Residuen sind A-orthogonal.

Das cr-Verfahren ist auch eine Krylov-Projektionsmethode mit $B = A^T A$ symmetrisch und positiv definit. Man beachte, daß die Hesse-Matrix $HF(x) := \frac{\delta^2 F}{\delta x_i \delta x_j}$ hier für beliebiges nichtsinguläres A wieder symmetrisch und positiv definit ist, das Minimierungsproblem also für eine größere Klasse von Aufgaben definiert ist.

Das cr-Verfahren bzw. die Minimierung der Funktion $F(x)$ bildet nun die Grundlage für eine Klasse von Lösungsverfahren mit einer nichtsymmetrischen $N \times N$-Matrix A, deren symmetrischer Anteil $H(A)$ positiv definit ist.

Die vom cr-Verfahren erzeugten Richtungsvektoren sind $A^T A$-orthogonal, falls A symmetrisch und positiv definit ist. Ist die Symmetrie von A nicht mehr gegeben, so verliert man im allgemeinen diese Orthogonalität. Dies führt auf die zweite Unterklasse von polynomiellen Projektionsmethoden, den **Orthogonalen Fehlermethoden**, charakterisiert durch eine unsymmetrische, aber definite Matrix B sind.

Beispielsweise erzeugt das allgemeine cr-Verfahren (*gcr-Verfahren*) ([EiES83]) eine Menge $A^T A$-orthogonaler Richtungsvektoren, indem alle vorher berechneten Richtungsvektoren benutzt werden, um p_{i+1} zu berechnen. Es ergibt sich der folgende Algorithmus, der auf eine definite Matrix A, deren symmetrischer Anteil $H(B)$ zusätzlich positiv definit sein muß, angewandt werden kann.

$$
\begin{aligned}
x_i &= x_{i-1} + \alpha_{i-1} p_{i-1} \\
& \quad mit \ \ \alpha_{i-1} = \frac{(r_{i-1}, Ap_{i-1})}{(Ap_{i-1}, Ap_{i-1})} \\
r_i &= r_{i-1} - \alpha_{i-1} A p_{i-1} \\
p_i &= r_i - \sum_{j=0}^{i-1} \beta_j^{(i)} p_j \\
& \quad mit \ \ \beta_j^{(i)} = \frac{(Ar_i, Ap_j)}{(Ap_j, Ap_j)}
\end{aligned}
$$

Weiterhin sind die Residuen des gcr-Verfahrens A-orthogonal und besitzen eine Residuenpolynomdarstellung. Mit $B = A$ definit ist es eine Krylov-Projektionsmethode, die die Residuennorm über dem affinen Krylov-Raum $x_0 + \mathbf{K}_i(r_0, A)$ minimiert. Allgemein kann jedoch über die Minimierungseigenschaft von orthogonalen Fehlermethoden keine Aussage gemacht werden.
Der Nachteil des gcr-Verfahrens, der es praktisch undurchführbar macht, liegt in dem großen Arbeitsaufwand pro Iterationsschritt und vor allem in dem hohen Speicherbedarf, da alle bisher berechneten Richtungsvektoren gespeichert werden müssen. Es bildet jedoch die Grundlage für iterative Projektionsmethoden, die in Abschnitt 3.4 vorgestellt werden.

Die dritte Unterklasse polynomieller und projektiver Iterationsverfahren basieren auf einer symmetrischen, nicht notwendig definiten Matrix B; man bezeichnet sie als **Symmetrische Krylov-Projektionsmethoden**. Beachtet man jedoch, daß wesentliche Eigenschaften nur für definite Matrizen B gelten, können diese Verfahren abbrechend und ihre Näherungslösungen unbeschränkt sein. Sie werden deshalb in diesem Zusammenhang nicht näher untersucht. Ein klassisches Beispiel ist die SYMMLQ-Methode, die in [PaSa75] genauer beschrieben ist.

3.3 Semi-Krylov-Projektions-Methoden

Eine Möglichkeit um beispielsweise unökonomische orthogonale Fehlermethoden praktisch durchführbar zu machen, bzw. für bestimmte A überhaupt nichtabbrechende Verfahren zu entwickeln, bieten polynomielle Methoden k-ten Grades. Sie besitzen nach Definition 3.2 in jedem Iterationsschritt ein Residuenpolynom vom Grad $\leq k$, d.h. es gilt: $r_i = R_{ik}(A)r_0$. Zu einem fest vorgegeben $k \in \mathbb{N}$ mit $k << N$ wird hier in jedem Iterationsschritt die Fehler- bzw. Residuennorm über einem k-dimensionalen Unterraum minimiert. Das ursprüngliche Problem der Optimierung über dem ganzen Krylov-Raum wird dadurch verlagert auf das Lösen einer k-dimensionalen Minimierungsaufgabe in jedem Iterationsschritt.
Mit $r_i = R_{ik}(A)r_0$ ergibt sich

$$\begin{aligned} b - Ax_i &= R_k(A)r_{i-1} \\ b - r_{i-1} - (c_1A + \ldots + c_kA^k)r_{i-1} &= Ax_i \\ Ax_{i-1} - (c_1A + \ldots + c_kA^k)r_{i-1} &= Ax_i \end{aligned}$$

und daraus folgt für eine Näherungslösung

$$x_i \in x_{i-1}\mathbf{K}_k(r_{i-1}, A).$$

In jedem Iterationsschritt spannen die Richtungsvektoren bzw. die Residuen einer polynomiellen Methode k-ten Grades einen Krylov-Raum der Dimension k auf. Man nennt sie daher *Semi-Krylov-Methoden.* Eine Näherungslösung x_i liegt in $x_0 + \mathbf{K}_{ik}(r_0, A)$, jedoch wird in der Regel nicht der ganzen Raum genutzt.
Für eine *Semi-Krylov-Projektionsmethode* ist daher $\mathbf{Q}_{ik} \subseteq \mathbf{K}_{ik}$ und $\mathbf{L}_{ik} \subseteq B_{ik}\mathbf{K}_{ik}$. In der Regel gilt dim $\mathbf{Q}_{ik}$, dim $\mathbf{L}_{ik} \leq ik$. Existiert zusätzlich eine feste Matrix B mit $L_{ik} = B^TQ_{ik}$, so nennt man das Verfahren *balanziert.*

Semi-Krylov-Projektionsmethoden sind ökonomischer als "volle" Krylov-Verfahren, besitzen aber keine Eigenschaften wie Endlichkeit oder Minimierung über dem ganzen Lösungsraum. Jedoch minimiert x_i die Fehler- bzw. Residuennorm über dem affinen Unterraum $x_{i-1} + \mathbf{K}_k(r_{i-1}, A)$. Da diese Optimierung in jedem Schritt über dem zugehörigen Krylov-Raum geschieht, erhofft man sich, daß die Norm des Fehlers bzw. des Residuums über dem ganzen Lösungsraum nicht anwächst. Über die Endlichkeit der Methoden kann im Allgemeinen auch keine Aussage gemacht werden, da die Dimension des aufspannenden Unterraums nicht notwendig wächst.

Im nächsten Abschnitt werden einige Beispiele von Semi-Krylov-Projektionsmethoden vorgestellt, die sich wiederum in der Konstruktion der Richtungsvektoren, die abhängig von Eigenschaften der Matrix A bzw. B sind, unterscheiden.

3.4 Beispiele und Algorithmen

Typische Beispiele für balanzierte Semi-Krylov-Projektionsmethoden sind sog. **Truncated und Restarted Methoden**. Das in Abschnitt 3.2 vorgestellte gcr-Verfahren liefert für eine definite Matrix A mit positiv definitem symmetrischen Anteil eine Lösung. Jedoch ist der Arbeits- und Speicheraufwand so erheblich, daß es praktisch nicht angewandt wird. Die erste Idee ist nun, die Summe zur Berechnung der p_i nach k Schritten abzubrechen (truncated gcr), d.h. man benutzt anstelle aller Richtungsvektoren nur die letzten k und erhält somit eine Menge von $k+1$ A^TA- orthogonalen Richtungsvektoren $\{p_{i-k}, \ldots, p_{i-1}, p_i\}$. Diesem Prinzip folgt das von Vinsome (siehe [Vins76]) vorgestellte Verfahren **Orthomin(k)** mit folgendem Algorithmus:

$$
\begin{aligned}
x_i &= x_{i-1} + \alpha_{i-1} p_{i-1} \\
& \quad mit \quad \alpha_{i-1} = \frac{(r_{i-1}, Ap_{i-1})}{(Ap_{i-1}, Ap_{i-1})} \\
r_i &= b - Ax_i \\
p_i &= r_i - \sum_{j=\max(0,i-k)}^{i-1} \beta_j^{(i)} p_j \\
& \quad mit \quad \beta_j^{(i)} = \frac{(Ar_i, Ap_j)}{(Ap_j, Ap_j)}
\end{aligned}
$$

Dann gilt auch hier für eine Matrix A, deren symmetrischer Anteil positiv definit ist: Innerhalb des Iterationsschrittes sind die letzten k durch den Algorithmus erzeugten Richtungsvektoren A^TA-orthogonal, d.h. $(Ap_i, Ap_j) = 0 \quad i \geq k, \; j = i-k, \ldots, i-1$. Zwei aufeinanderfolgende Residuen sind A-orthogonal und x_i minimiert die Residuennorm über dem affinen Unterraum $x_{i-k-1} + span\{p_{i-k-1}, \ldots, p_{i-1}\}$.

Ein zweiter Ansatz, das gcr-Verfahren durchfürbar zu machen, beruht darauf, den gcr-Algorithmus nach jeweils k Iterationen neu zu starten (**restarted gcr, gcr(k-1)**). Dabei konstruiert man sukzessive stets einen k-dimensionalen Unterraum, aus dem dann eine Näherungslösung bestimmt wird. Der Algorithmus berechnet Zwischennäherungen $\tilde{x}_j$, so daß für die $x_{i-1} =: \tilde{x}_0, \ldots, \tilde{x}_k =: x_i$ gilt, mit:

$$
\begin{aligned}
\tilde{x}_j &= \tilde{x}_{j-1} + \tilde{\alpha}_{j-1} \tilde{p}_{j-1} \\
& \quad mit \quad \tilde{\alpha}_{j-1} = \frac{(\tilde{r}_{j-1}, A\tilde{p}_{j-1})}{(A\tilde{p}_{j-1}, A\tilde{p}_{j-1})} \\
\tilde{r}_j &= \tilde{r}_{j-1} - \tilde{\alpha}_{j-1} A\tilde{p}_{j-1} \\
\tilde{p}_j &= \tilde{r}_j - \sum_{l=0}^{j-1} \tilde{\beta}_l^{(j)} \tilde{p}_l \\
& \quad mit \quad \tilde{\beta}_l^{(j)} = \frac{(A\tilde{r}_j, A\tilde{p}_l)}{(A\tilde{p}_l, A\tilde{p}_l)}.
\end{aligned}
$$

Für eine Matrix A mit positiv definitem symmetrischen Anteil sind auch hier innerhalb jedes Iterationsschrittes die Richtungsvektoren $\tilde{p}_i$ A^TA-orthogonal und die Resi-

duen $\tilde{r}_i$ sind A-orthogonal. Die Norm des Residuum wird über dem affinen Krylovraum $x_{i-1} + K(r_{i-1}, A, k+1)$ minimiert.
Das gcr(k)-Verfahren ist eine polynomielle Methode $k+1$-ten Grades, die mit $B = A^T A$ definit in keinem Iterationsschritt abbricht.

Das Verfahren **gmres(k)**, welches bei [SaSc86] genau analysiert wird, kann nun auf eine beliebige nichtsinguläre Matrix A angewandt werden. Im ersten Teil des gmres(k)-Algorithmus erzeugt man orthonormale Richtungsvektoren mit dem Gram-Schmidt Verfahren, die eine Basis für einen Krylov-Raum bilden.

$$\begin{aligned} \tilde{p}_j &= Ap_{j-1} - \sum_{l=1}^{j-1} h_{lj} p_l \\ & \quad mit \quad h_{lj} = (Ap_{j-1}, p_l) \\ p_j &= \tilde{p}_j / h_{j,j-1} \\ & \quad mit \quad h_{j,j-1} = \|\tilde{p}_j\|_2 \end{aligned}$$

Man gibt sich also k Suchrichtungen p_j vor und löst nun im zweiten Teil ein explizites Minimierungsproblems im $\mathbb{R}^k$ mit der Methode der kleinsten Quadrate, um eine Näherungslösung $x_i = x_{i-1} + \sum_{j=1}^{k} c_j p_j$ zu bestimmen.

gmres(k) ist ein polynomielles Iterationsverfahren k-ten Grades, welches in der Praxis benutzt wird, um lineare Gleichungssysteme mit beliebiger regulärer Koeffizientenmatrix zu lösen. Das Verfahren bricht nicht ab, aber es stagniert möglicherweise. Ist der symmetrische Anteil von A positiv definit, dann erzeugt gmres(k), bei exakter Arithmetik, die gleiche Lösung wie gcr(k-1).

4 Nicht polynomielle Projektionsmethoden und nicht projektive polynomielle Methoden

Schließlich sollen in diesem Kapitel noch Methoden erwähnt werden, die entweder nur projektiv bzw. nur polynomiell sind.
Zu den *nicht polynomiellen Projektionsmethoden* gehören beispielsweise blockorientierte konjugierte Gradientenverfahren, sowie die in [SaSiYip88] untersuchten Methoden USYMLQ und USYMQR. Diese Verfahren sind definiert durch

$$x_i \in x_0 + \tilde{\mathbf{K}}_i(r_0, A^T), \quad e_i \perp A^T \tilde{\mathbf{K}}_i(r_0, A)$$

bzw.

$$x_i \in x_0 + \tilde{\mathbf{K}}_i(r_0, A^T), \quad e_i \perp A^T A \tilde{\mathbf{K}}_i(r_0, A^T)$$

über dem sogenannten *Quasi-Krylov-Raum*

$$\tilde{\mathbf{K}}_i(v, A) = \text{ span } \{v, Av, AA^T v, AA^T Av, \ldots\}.$$

Diese Methoden sind in der Regel nicht polynomiell, nach Definition zählen sie aber zu den Projektionsverfahren. Die USYMLQ-Methode kann jedoch trotzdem abbrechend sein, während das USYMQR-Verfahren balanziert ist mit einer Matrix $B = A^T A$, die für eine beliebige nichtsinguläre Matrix A symmetrisch und positiv definit ist, und somit die in Abschnitt 2.1 vorgestellten Eigenschaften besitzt.

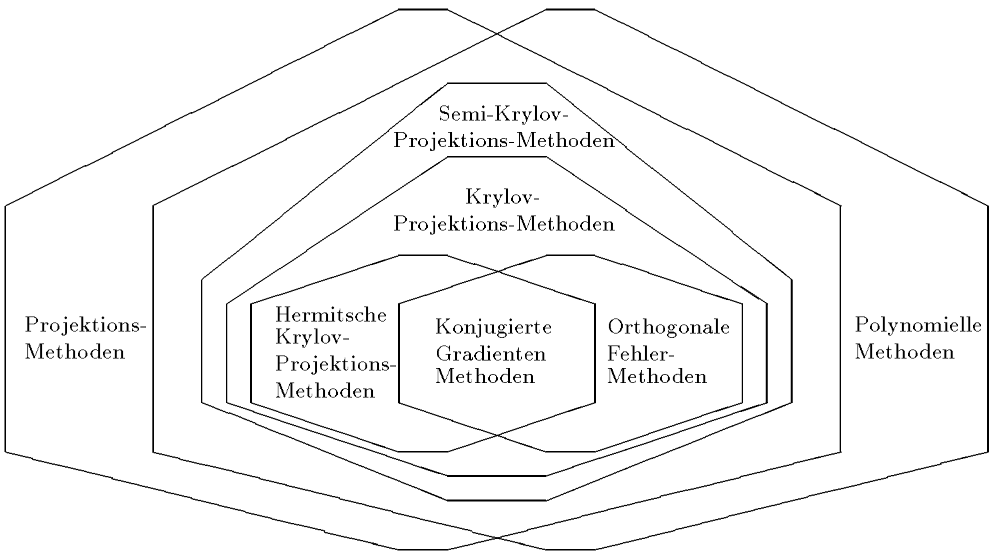
Ein Beispiel für eine *nicht projektive polynomielle Methode* ist das quadratische konjugierte Gradientenverfahren (CGS), welches von [Sonn89] vorgestellt wurde. Ein durch diese Methode erzeugtes Residuum kann dargestellt werden als

$$r_i = (P_i(A))^2 r_0,$$

ist somit nicht mehr projektiv, erzeugt jedoch wiederum eine Näherungslösung über einem Krylov-Raum.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden iterative Methoden zur Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ untersucht. Eine Klassifizierung und Analyse wurde anhand spezieller Eigenschaften vorgenommen. So kann eine Aussage über Konvergenz der Iterationsverfahren, Minimierungseigenschaften sowie Fehlerschranken getroffen werden. Charakteristisch ist, daß Verfahren mit "schönen" Eigenschaften nur auf eine eingeschränkte Klasse von Koeffizientenmatrizen A anwendbar ist. Die folgende Abbildung verdeutlicht die Zusammenhänge.



Der abschließende Überblick liefert eine Auswahl typischer Verfahren, deren Verwendung von Eigenschaften der Matrix A abhängig ist.

Konjugierte Gradienten-Methoden
cg-verfahren, cr-Verfahren

- Koeffizientenmatrix A: symmetrisch, positiv definit;
- endliche Verfahren mit $n \leq N$, eindeutig bestimmte Näherungslösung; Minimierung über Lösungsraum.

Orthogonale Fehlermethoden
gcr-Verfahren

- A nicht notwendig symmetrisch, der symmetrische Anteil $H(A)$ muß jedoch positiv definit sein;
- allgemein kann keine Aussage über die Minimierungseigenschaften von Näherungslösungen gemacht werden.

Hermitsche/Symmetrische Krylov-Projektionsmethoden
SYMMLQ-Verfahren

- A symmetrisch, nicht notwendig definit;
- abbrechende verfahren, unbeschränkte Näherungslösungen.

Semi-Krylov-Projektionsmethoden
orthomin(k)-Verfahren (truncated Verfahren), gcr(k-1)-Verfahren (restarted Verfahren)

- A besitzt positiv definiten symmetrischen Anteil;
- Näherungslösungen mit Minimierungseigenschaften über einem k-dimensionalen Unterraum.

gmres(k) (restarted Verfahren)

- A beliebig nichtsingulär;
- Näherungslösungen mit Minimierungseigenschaften über einem k-dimensionalen Unterraum; nicht abbrechendes Verfahren, möglicherweis stagnierend.

Literatur

[EiES83] S.C.Eisenstat, H.C.Elman und M.H.Schultz, *Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations,* SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol.20, S.345-357, 1983.

[Elma82] H.C.Elman, *Iterative Methods for Large, Sparse, Nonsymmetric Systems of Linear Equations,* Yale University Doctoral Dissertation, New Haven, 1982.

[GrPfSch91] E.Groß, M.Pfister, U.Schendel, *Projektionsmethoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme,* Preprint No. A-91-24, Fachbereich Mathematik, Freie Universität Berlin, 1991.

[Hest80] M.R.Hestenes, *Conjugate Direction Methods in Optimization,* Springer-Verlag, New York, 1980.

[JoMa90] W.D.Joubert, Th.A.Manteuffel, *Iterative Methods for Nonsymmetric Linear Systems* in... Academic Press, 1990.

[JoYo87] W.D.Joubert, D.M.Young, *Necessary and sufficient conditions for the simplification of generalized conjugate gradient algorithms,* Linear Algebra and its Applications, Vol. 88/89, S.449-485, 1987.

[KwSch93] B.Kwella, U.Schendel, *Operator-Koeffizienten-Methoden,* Preprint No. A-5/93, Serie A Mathematik, FU Berlin

[PaSa75] C.C.Paige, M.A.Saunders, *Solution of sparse indefinite systems of linear equations,* SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol.12, S.617-629, 1975.

[SaSc86] Y.Saad und M.H.Schultz, *GMRES: A Generalized Minimum Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems,* SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, Vol.7, S.856-869, 1986.

[Saad87] Y.Saad, *Least Squares Polynomials in the Complex Plane and their Use for Solving Nonsymmetric Linear Systems,* SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol.24, S.155-169, 1987.

[SaSiYip88] M.A.Saunders, H.D.Simon, E.L.Yip, Two conjugate-gradient-type methods for sparse unsymmetric linear equations, SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol.25, S.927-940, 1988.

[Sonn89] P.Sonneveld, *CGS, a Fast Lanczos-type Solver for Nonsymmetric Linear Systems,* SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol. 10, S.35-52, 1989.

[Vins76] P.K.W.Vinsome, *Orthomin, an iterative method for solving sparse sets of simultaneous linear equations,* in Proc. Fourth Symposium on Reservoir Simulation, Society of Petroleum Engineers of AIME, S.149-159, 1976.