

Numerische Mathematik und Numerische Lineare Algebra in den Datenwissenschaften

Prof. Dr. rer. nat. Jens Starke
Sommersemester 2025

Inhaltsverzeichnis

1	Wiederholung	3
2	Iteratives Vorgehen zur Lösung linearer Gleichungssysteme	6
2.1	Splittingverfahren	6
2.2	Zwei einfache Iterationsverfahren	8
2.3	Gradientenverfahren	10
2.3.1	Gradientenverfahren für Optimierung	10
2.3.2	Das Verfahren der konjugierten Gradienten	11
2.3.3	Eigenschaften des CG-Verfahrens	12
2.3.4	Praktische Aspekte der Implementierung	16
2.4	Präkonditionierung des CG-Verfahren	17
2.4.1	Präkonditionierung mittels Cholesky	17
2.4.2	Algorithmus: PCG-Verfahren	18
2.5	Anwendung und Konvergenzgeschwindigkeit des CG-Verfahren	19
2.5.1	Lösen von Randwertproblemen mittels CG-Verfahren	19
2.5.2	Konvergenzgeschwindigkeit des CG-Verfahren	20
3	Eigenwertprobleme	24
3.1	Einleitung	24
3.2	Einschließungssätze und Stabilität	24
3.2.1	Gerschgorin-Kreise	25
3.2.2	Stabilität von Eigenwerten	26
3.3	Iterative Verfahren	27
3.3.1	Potenz-Methode	27
3.3.2	Inverse Iteration	28
3.4	Page-Rank-Algorithmus	29
3.4.1	Stochastische Vektoren/Matrizen	29
3.4.2	Vorgehensweise für weitere Eigenwerte/Eigenvektoren	31
4	Krylov-Raum-Methoden für EW-Probleme	35
4.1	Galerkin-Approximation	35
4.2	Arnoldi-Methode	36
4.3	Lanczos-Methode	40
4.4	Pseudospektren	42

Inhaltsverzeichnis

Diese Mitschrift basiert auf der gleichnamigen Vorlesung *Numerische Mathematik und Numerische Lineare Algebra in den Datenwissenschaften*, gehalten im Sommersemester 2025 an der Universität Rostock.

Alle Rechte an Inhalt und Struktur der Lehrveranstaltung liegen bei dem Modulverantwortlichen, Prof. Dr. rer. nat. Jens Starke, sowie der Universität Rostock.

Diese Mitschrift dient ausschließlich zu Lern- und Dokumentationszwecken. Eine kommerzielle Nutzung oder Weiterverbreitung ohne Zustimmung ist nicht gestattet.

Literaturempfehlungen:

1. Martin Hantu-Bourgeois, Grundlagen der Numerik und des wissenschaftlichen Rechnens, Mathematische Leitfäden, Vieweg + Teubner Verlag Wiesbaden, 2009, DOI: [10.1007/978-3-8348-9309-3](https://doi.org/10.1007/978-3-8348-9309-3)
2. Eberhard Zeidler, Nichtlineare Funktionalanalysis und ihre Anwendung, Springer Spektrum Wiesbaden, 2012, DOI: [10.1007/978-3-658-00289-3_3](https://doi.org/10.1007/978-3-658-00289-3_3)

1 Wiederholung

Wir starten mit einer kurzen Wiederholung zur Fixpunktiteration zum Lösen von Gleichungen der Form $Tx = x$ durch die Iterationsvorschrift $x^{(n+1)} = Tx^{(n)}$.

Satz 1.1 (Banach 1922). Sei M eine abgeschlossene nichtleere Teilmenge in einem vollständig metrischem Raum (X, d) und $T : M \rightarrow M$ eine Selbstabbildung (d.h. $T(M) \subset M$) und k -kontraktiv (d.h. $d(Tx, Ty) \leq k \cdot d(x, y) \forall x, y \in M$ mit $0 \leq k < 1$). Dann folgt:

1. Existenz und Eindeutigkeit: die Gleichung $Tx = x$ hat genau eine Lösung, d.h. T hat genau einen Fixpunkt in der Menge M .
2. Konvergenz der Iteration $x^{(k+1)} = Tx^{(k)}$. Die Folge $(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ konvergiert gegen den Fixpunkt \hat{x} für einen beliebigen Startpunkt $x^{(0)} \in M$.
3. Fehlerabschätzung: Für alle $n = 0, 1, \dots$ gilt
 - a-priori: $d(x^{(n)}, \hat{x}) \leq k^n(1 - k)^{-1}d(x^{(0)}, x^{(1)})$
 - a-posteriori: $d(x^{(n+1)}, \hat{x}) \leq k(1 - k)^{-1}d(x^{(n)}, x^{(n+1)})$
4. Konvergenzrate: Für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt $d(x^{(n+1)}, \hat{x}) \leq k \cdot d(x^{(n)}, \hat{x})$

Beweis.

2. Wir zeigen, dass $(x^{(n)})$ eine Cauchy-Folge ist: Für den Abstand zweier benachbarter Folgeglieder $x^{(n)}$ und $x^{(n+1)}$ gilt

$$d(x^{(n)}, x^{(n+1)}) = d(Tx^{(n-1)}, Tx^{(n)}) \leq k \cdot d(x^{(n-1)}, x^{(n)}) \leq \dots \leq k^n \cdot d(x^{(0)}, x^{(1)})$$

Mehrfache Anwendung der Dreiecksungleichung liefert daher für $n, m \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} d(x^{(n)}, x^{(n+m)}) &\leq d(x^{(n)}, x^{(n+1)}) + d(x^{(n+1)}, x^{(n+2)}) + \dots + d(x^{(n+m-1)}, x^{(n+m)}) \\ &\leq (k^n + k^{n+1} + \dots + k^{n+m}) \cdot d(x^{(0)}, x^{(1)}) \\ &\leq k^n(1 + k + k^2 + \dots) \cdot d(x^{(0)}, x^{(1)}) \\ &= k^n \cdot (1 - k)^{-1}d(x^{(0)}, x^{(1)}) \end{aligned}$$

Demnach folgt $d(x^{(n)}, x^{(n+m)}) \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$ und da X vollständig ist konvergiert $(x^{(n)})$ gegen ein $\hat{x} \in X$.

1. Da T stetig ist (aufgrund der k -Kontraktivität) folgt für die konvergente Folge $(x^{(n)})$, dass

$$\hat{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} x^{(n+1)} = \lim_{n \rightarrow \infty} Tx^{(n)} = T\hat{x}$$

Da M abgeschlossen ist existiert also ein Fixpunkt in M .

Dieser ist eindeutig, denn für x, y mit $Tx = x$ und $Ty = y$ gilt $d(x, y) = d(Tx, Ty) \leq kd(x, y)$, also $d(x, y) = 0$ und damit $x = y$ (Definitheit der Metrik).

3. Aus dem Beweis zu 2. haben wir $d(x^{(n)}, x^{(n+m)}) \leq k^n(1 - k)^{-1}d(x^{(0)}, x^{(1)})$, wegen der Stetigkeit der Metrik folgt die a-priori-Fehlerabschätzung aus $m \rightarrow \infty$.

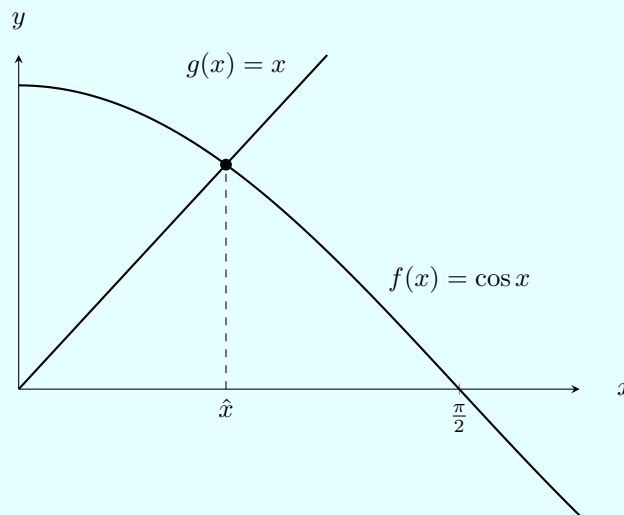
Die a-posteriori-Fehlerabschätzung folgt analog aus dem Ansatz

$$\begin{aligned}
 d(x^{(n+1)}, x^{(n+1+m)}) &\leq d(x^{(n+1)}, x^{(n+2)}) + \dots + d(x^{(n+m)}, x^{(n+1+m)}) \\
 &\leq (k + \dots + k^m) \cdot d(x^{(n)}, x^{(n+1)}) \\
 &\leq k(1 + k + k^2 + \dots) \cdot d(x^{(n)}, x^{(n+1)}) \\
 &= Ck \cdot (1 - k)^{-1} d(x^{(n)}, x^{(n+1)})
 \end{aligned}$$

4. Folgt direkt durch $d(x^{(n+1)}, \hat{x}) = d(Tx^{(n)}, T\hat{x}) \leq k \cdot d(x^{(n)}, \hat{x})$

□

Beispiel 1.2. Wir betrachten das Nullstellenproblem $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto \cos x - x = 0$. Umformung ergibt $\underbrace{\cos x}_{Tx} = x$ und somit die Fixpunktiteration $x^{(k+1)} = Tx^k = \cos(x^{(k)})$



Prüfung der Voraussetzungen des Banach'schen FP-Satzes:

Wir wählen als Einschränkung $M = [0, 1]$, dies liefert uns eine Selbstabbildung auf einer abgeschlossenen Teilmenge M des vollständig metrischen Raum \mathbb{R} mit der Abstandsfunktion $d(x, y) = |x - y|$.

Weiter ist die Abbildung k -kontraktiv, denn nach dem Mittelwertsatz der Differentialrechnung gilt

$$|\cos x - \cos y| = \underbrace{|\sin \xi|}_{\leq \sin(1)} \cdot |x - y| \leq \underbrace{0,85}_{=:k} \cdot |x - y|, \quad \text{für } \xi \in [0, 1]$$

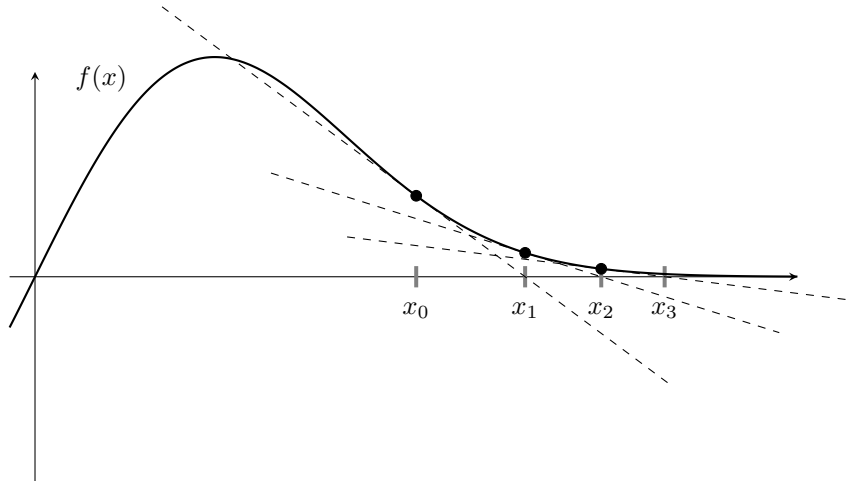
Wir können also nach Banach die Existenz und Eindeutigkeit eines Fixpunkt \hat{x} folgern, diesen Fixpunkt finden wir durch die konvergente Folge $x^{(k+1)} = \cos x^k$.

Wir betrachten im folgenden die Idee der Umwandlung eines Nullstellenproblems in Fixpunkt-Gleichung noch etwas allgemeiner. Für eine Gleichung $f(x) = 0$ mit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ haben wir verschiedene Möglichkeiten zur Umformung:

- Betrachte $Tx := x - f(x)$ gefolgt aus $f(x) = 0 \Leftrightarrow -f(x) = 0 \Leftrightarrow x - f(x) = x$.
- Betrachte $Tx := x - \omega \cdot f(x)$ mit $\omega \neq 0$ (lineare Relaxation)

1 Wiederholung

- c) Betrachte $Tx := x - \omega \cdot g(f(x))$ mit $\omega \neq 0$ und geeigneter Funktion g (nichtlineare Relaxation).
Wenn $g(0) \neq 0$ dann betrachte $Tx := x - \omega \cdot (g(f(x)) + g(0))$
- d) Betrachte $Tx := x - (f'(x))^{-1}f(x)$ (Newtonverfahren). Newton hat teils Probleme, bei falschen Startwerten:



- e) Betrachte $Tx := h^{-1}(f(x) - g(x))$, wobei $f(x) = h(x) + g(x)$ (Splitting-Verfahren)

2 Iteratives Vorgehen zur Lösung linearer Gleichungssysteme

2.1 Splittingverfahren

Gegeben sei das LGS $Ax = b$ für $A \in \mathbb{K}^{n \times n}, b \in \mathbb{K}^n, x \in \mathbb{K}^n$, wobei $\mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$. Wir wollen dieses LGS nun in ein FP-Problem umformen, sei hierfür A nicht singulär (sonst nicht lösbar).

Wir schreiben $A = M - N$, wobei M invertierbar und häufig sogar eine Diagonalmatrix ist (damit M leicht zu invertieren ist). Dies liefert:

$$Ax = b \iff (M - N)x = b \iff Mx = Nx + bx = \underbrace{M^{-1} \cdot (Nx + b)}_{\tilde{T}x}$$

\tilde{T} ist affin-linear, wir erhalten also unser FP-Problem $x = \tilde{T}x = Tx + c$ mit $T = M^{-1}N$ und $c = M^{-1}b$

Algorithmus 1: Splittingverfahren

Initialisierung: $A = M - N$ mit $N \in GL(n, \mathbb{K})$

- 1 Wähle $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ beliebig
- 2 **for** $k = 0, 1, \dots$
- 3 | löse $Mx^{(k)} = Nx^{(k-1)} + b$
- 4 **until stop**

Die Konvergenz dieses Algorithmus folgt aus Banachschen Fixpunktsatz.

Bemerkung 2.1. Nach gleicher Überlegung lässt sich auch unser obiges Splittingverfahren für Nullstellenbestimmung herleiten:

$$f(x) = 0 \iff h(x) + g(x) := f(x) = 0 \iff h(x) = f(x) - g(x) \iff x = h^{-1}(f(x) - g(x))$$

Wiederholung: Eine Matrixnorm ist eine Norm auf dem Vektorraum der Matrizen, d.h. $\|\cdot\| : \mathbb{K}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$, bereits bekannte Matrixnormen sind:

- Frobeniusnorm: $\|A\|_F := \left(\sum_{i,j} |a_{ij}|^2 \right)^{1/2}$
- Spaltensummennorm $\|A\|_1 := \max_j \sum_i |a_{ij}|$
- Zeilensummennorm $\|A\|_\infty := \max_i \sum_j |a_{ij}|$
- Spektralnorm $\|A\|_2 := \sqrt{\lambda_{\max}(A^H A)}$, $(A^H := \overline{A}^T)$

Im allgemeinen induziert eine Vektornorm auch immer eine Matrixnorm, diese nennen wir Operator-norm:

$$\|A\|_{\text{op}} := \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

2.1 Splittingverfahren

Die oben aufgelisteten Normen $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_2$ und $\|\cdot\|_\infty$ sind die Operatornormen zu den jeweiligen p -Normen.

Eine Norm $\|\cdot\|$ auf $\mathbb{K}^{n \times n}$ heißt submultiplikativ, falls $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ und sie heißt verträglich mit einer Vektornorm $\|\cdot\|_V$, falls $\|Ax\|_V \leq \|A\| \cdot \|x\|_V$.

Operatornormen sind immer submultiplikativ und verträglich zu der Vektornorm, aus welcher sie induziert wurden.

Satz 2.2. Ist $\|\cdot\|$ eine Norm auf $\mathbb{K}^{n \times n}$, die mit einer Vektornorm $\|\cdot\|$ verträglich ist, und ist $\|M^{-1}N\| < 1$, dann konvergiert der Algorithmus 1 für jedes $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ gegen $A^{-1}b$, d.h. gegen die Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$.

Beweis. Sei $\tilde{T}(x) := Tx + c$ mit $T = M^{-1}N$ und $c = M^{-1}b$.

Offensichtlich gilt $\tilde{T} : \mathbb{K}^n \rightarrow \mathbb{K}^n$, sowie

$$\|\tilde{T}(x) - \tilde{T}(y)\| = \|Tx - Ty\| \leq \|T\| \cdot \|x - y\|$$

Da $\|T\| = \|M^{-1}N\| < 1$, ist \tilde{T} eine k -kontraktive Selbstabbildung und somit konvergiert die Folge (x^k) aus dem Algorithmus gegen den eindeutigen Fixpunkt \hat{x} mit $\tilde{T}(\hat{x}) = \hat{x}$.

Einsetzen der Definition von \tilde{T} liefert:

$$\hat{x} = T\hat{x} + c = M^{-1}(N\hat{x} + b) \implies M\hat{x} = N\hat{x} + b \implies A\hat{x} = (M - N)\hat{x} = b$$

□

Korollar 2.3. Sei A invertierbar, so konvergiert der obige Algorithmus genau dann für alle Startwerte $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ gegen $\hat{x} = A^{-1}b$, wenn für den Spektralradius $\rho(T) = \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(T)\}$ die Ungleichung $\rho(T) < 1$ erfüllt ist.

Beweis.

\Leftarrow : Falls $\rho(T) < 1$ dann existiert eine Norm $\|\cdot\|_\varepsilon$ auf \mathbb{K}^n und eine dadurch induzierte Operatornorm $\|\cdot\|_\varepsilon$ auf $\mathbb{K}^{n \times n}$ mit $\|T\|_\varepsilon \leq \rho(T) + \varepsilon < 1$ für ε klein genug (vgl. Aufgabe 2.3).

Satz 2.2 liefert dann die Konvergenz des Algorithmus.

\Rightarrow : Angenommen $\rho(T) \geq 1$, d.h. es existiert ein Eigenwert λ von T mit $|\lambda| \geq 1$ und zugehörigem Eigenvektor z . Für $x^{(0)} = \hat{x} + z$ und festem k ergibt sich der Iterationsfehler

$$x^{(k)} - \hat{x} = Tx^{(k-1)} + c - \hat{x} = Tx^{(k-1)} - T\hat{x} = T(x^{(k-1)} - \hat{x})$$

Induktiv folgt

$$x^{(k)} - \hat{x} = T^k(x^{(0)} - \hat{x}) = T^k z = \lambda^k z$$

und es gilt $\|x^{(k)} - \hat{x}\| = |\lambda^k| \cdot \|z\|$.

Für größer werdendes k kann $x^{(k)}$ also nicht gegen \hat{x} konvergieren.

□

Satz 2.4. Unter gleichen Voraussetzungen des vorangegangenen Korollars gilt

$$\max_{x^{(0)} \in \mathbb{K}^n} \limsup_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - \hat{x}\|^{1/k} = \rho(T)$$

2.2 Zwei einfache Iterationsverfahren

Beweis. Aus dem Beweis von Korollar 2.3 geht hervor, dass

$$\max_{x^{(0)} \in \mathbb{K}^n} \limsup_{k \rightarrow \infty} \left\| \hat{x} - x^{(k)} \right\|^{1/k} \geq \limsup_{k \rightarrow \infty} \left\| T^k z \right\|^{1/k} = \limsup_{k \rightarrow \infty} |\lambda| \cdot \|z\|^{1/k} = |\lambda| = \rho(T)$$

Mit der Norm $\|\cdot\|_\varepsilon$ gilt nun Für jeden Startwert $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$:

$$\left\| x^{(k)} - \hat{x} \right\|_\varepsilon = \left\| T^k (x^{(0)} - \hat{x}) \right\|_\varepsilon \leq \|T\|_\varepsilon^k \cdot \left\| x^{(0)} - \hat{x} \right\|_\varepsilon$$

Da im \mathbb{K}^n alle Normen äquivalent sind, also insbesondere auch $\|\cdot\|_\varepsilon$ und $\|\cdot\|$, existiert eine Konstante $c_\varepsilon > 0$ mit

$$\left\| x^{(k)} - \hat{x} \right\|^{1/k} \leq \left(c_\varepsilon \cdot \left\| x^{(k)} - \hat{x} \right\|_\varepsilon \right)^{1/k} \leq \|T\|_\varepsilon \cdot \left(c_\varepsilon \cdot \left\| x^{(0)} - \hat{x} \right\|_\varepsilon \right)^{1/k} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \|T\|_\varepsilon$$

Folglich ist

$$\varrho(T) \leq \max_{x^{(0)}} \limsup_{k \rightarrow \infty} \left\| x^{(k)} - \hat{x} \right\|^{1/k} \leq \|T\|_\varepsilon$$

□

Dieser Satz liefert den Konvergenzfaktor und die Konvergenzrate des Splittingverfahren, zur Erinnerung für eine Folge $(x^{(k)})$ mit Grenzwert \hat{x} ist:

- Konvergenzfaktor q : $|x^{(k)} - \hat{x}| \approx C \cdot q^k$ für k groß
- Konvergenzrate r : $r = -\log_{10}(q)$

Korollar 2.5. Die Zahl $\varrho(T)$ ist der (asymptotischer) Konvergenzfaktor von der Iteration $x^{(k)} = Tx^{(k-1)} + c$.
Die (asymptotische) Konvergenzrate lässt sich daher ausdrücken durch $r = -\log_{10} \varrho(T)$

2.2 Zwei einfache Iterationsverfahren

Mittels der Zerlegung $A = D - L - R$, wobei D die Diagonale, $-L$ die untere (linke) Hälfte und $-R$ die obere (rechte) Hälfte der Matrix A sind, erhalten wir einen Spezialfall des Splittingverfahren.

Durch die Wahl $M = D$ und $N = L + R$ ergibt sich

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(b + (L + R)x^{(k)})$$

bzw. in algorithmischer Form:

Algorithmus 2: Jacobi / Gesamtschritt Verfahren

Gegeben sei das Lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit $a_{ii} \neq 0$.

Initialisierung: Wähle beliebigen Startvektor $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$

```

1 for  $k = 0, 1, \dots$ 
2   for  $i = 1, \dots, n$ 
3      $x_i^{(k+1)} \leftarrow \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} \right)$ 
4   end
5 until stop
```

2.2 Zwei einfache Iterationsverfahren

Die zugehörige Iterationsmatrix ist hierbei $\mathcal{J} = M^{-1}N = D^{-1}(L + R)$ und nennt sich (beim Jacobi Verfahren) Gesamtschrittoperator.

Einen weitere Version des Splitting-Verfahren ergibt sich durch die Wahl $M = D - L$ und $N = R$. Hierbei bildet $D - L$ eine obere Dreiecksmatrix und die Inversion ergibt sich mittels Vorwärtssubstitution:

Algorithmus 3: Gauss-Seidel / Einzelschritt Verfahren

Gegeben sei das Lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit $a_{ii} \neq 0$.

Initialisierung: Wähle beliebigen Startvektor $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$

```

1 for  $k = 0, 1, \dots$ 
2   for  $i = 1, \dots, n$ 
3      $x_i^{(k+1)} \leftarrow \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j < i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j > i} a_{ij} x_j^{(k)} \right)$ 
4   end
5 until stop
```

Auch hier ergibt sich eine Matrixschreibweise: Durch umstellen erhalten wir:

$$a_{ii}x^{(k+1)} + \sum_{j < i} a_{ij}x_j^{(k+1)} = b_i - \sum_{j > i} a_{ij}x_j^{(k)}$$

und damit (da L und R jeweils die negativen Parts von A sind)

$$(D - L)x^{(k+1)} = b + Rx^{(k)}$$

Die hier erhaltene Iterationsmatrix nennen wir Einzelschrittoperator $\mathcal{L} = (D - L)^{-1}R$

Mittels der Zeilensummennorm erhalten wir nun ein leicht prüfbares Konvergenzkriterium:

Satz 2.6. Ist $A \in \text{GL}_n(\mathbb{K})$ strikt diagonaldominant, d.h. $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$, dann konvergieren Gesamtschritt- und Einzelschrittverfahren für alle Startwerte $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ gegen die eindeutige Lösung von $Ax = b$.

Beweis.

Da A strikt diagonaldominant ist, muss $a_{ii} \neq 0$ und damit sind beide Verfahren wohldefiniert.

Für die Konvergenz wird Satz 2.2 mit der Zeilensummennorm $\|\cdot\|_\infty$ verwendet:

a) Gesamtschrittverfahren: Für die Iterationsmatrix gilt

$$\|\mathcal{J}\|_\infty = \|D^{-1}(L + R)\|_\infty = \max_{i \in [n]} \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{j \neq i} |a_{ij}| =: q < 1$$

Nach Satz 2.2 folgt damit die Konvergenz des Gesamtschrittverfahren.

b) Einzelschrittverfahren: Um $\|\mathcal{L}\|_\infty < 1$ zu zeigen, nutzen wir, dass die Zeilensummennorm eine durch die Maximumsnorm induzierte Operatornorm induziert ist, d.h.

$$\|\mathcal{L}\|_\infty = \max_{\|x\|_\infty = 1} \|\mathcal{L}x\|_\infty$$

Sei $y = \mathcal{L}x$ für ein $x \in \mathbb{K}^n$ mit $\|x\|_\infty = 1$.

Induktiv folgt nun $y_i \leq q < 1$, wobei der Induktionsanfang aus dem Beweisteil a) folgt.

2.3 Gradientenverfahren

Unter der Induktionsvoraussetzung gilt für $j < i$, dass $|y_j| \leq q < 1$ und damit ergibt sich aus Zeile 3 von Algorithmus 3 mit $b = 0$, $x^{(k)} = x$ und $x^{(k+1)} = y$:

$$\begin{aligned} \|y_i\| &= \left\| \frac{1}{a_{ii}} \left(0 - \sum_{j<i} a_{ij} y_j - \sum_{j>i} a_{ij} x_j \right) \right\| \\ &\leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{j<i} |a_{ij}| \cdot \underbrace{|y_j|}_{\leq q < 1} + \sum_{j>i} |a_{ij}| \cdot \underbrace{|x_j|}_{\leq \|x\|_\infty = 1} \right) \\ &< \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{j<i} |a_{ij}| + \sum_{j>i} |a_{ij}| \right) \\ &= \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \\ &= q \end{aligned}$$

Da dies für alle Einträge von y gilt, folgt $\|y\|_\infty = \|\mathcal{L}x\|_\infty \leq q$ für alle x mit $\|x\|_\infty = 1$ und damit $\|\mathcal{L}\|_\infty \leq q < 1$ \square

Beispiel 2.7. Gegeben sei das LGS $Ax = b$ mit

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Dieses System hat die eindeutige Lösung $\hat{x} = (1, -1, -1)^T$.

Durch die Wahl $x^{(0)} = (1, 1, 1)^T$ erhalten wir beim Gesamtschritt- bzw. Einzelschrittverfahren:

$$\begin{aligned} x_{\mathcal{J}}^{(1)} &= D^{-1}(b - (L + R)x^{(0)}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \\ x_{\mathcal{L}}^{(1)} &= (D - L)^{-1}(b + Rx^{(0)}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 0 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{3}{4} \\ -\frac{7}{8} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

2.3 Gradientenverfahren

2.3.1 Gradientenverfahren für Optimierung

Eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ soll minimiert werden. Von einem Startpunkt $x^{(0)}$ ausgehen bewegen wir uns Stück für Stück in Richtung des steilsten Abstiegs, intuitiv sollten wir so ein Minimum finden.

Als Iterationsvorschrift ergibt sich daher

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} \cdot d^{(k)}, \quad \text{für } k = 0, 1, \dots$$

dabei ist $\alpha^{(k)} > 0$ die Schrittweite und $d^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ die Abstiegsrichtung. Eine typische Wahl der Abstiegsrichtung ist $d^{(k)} = -\frac{\partial f}{\partial x}(x^{(k)}) = -\nabla f(x^{(k)})$, eine Verfeinerung würde man noch mit $d^{(k)} = -D^{(k)} \cdot \nabla f(x^{(k)})$ erhalten, wobei $D^{(k)} \in \mathbb{R}^n$.

Das Ziel des Verfahrens ist es, dass sich der Wert von f in jedem Schritt verbessert, d.h. $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$.

2.3 Gradientenverfahren

Es ergibt sich somit ein eindimensionales Optimierungsproblem um die optimale Schrittweite $\alpha^{(k)}$ zu erhalten:

$$\alpha^{(k+1)} = \min_{\alpha \neq 0} \{f(x^{(k)} + \alpha \cdot d^{(k)})\}$$

Ein Nachteil des Verfahrens ist die mögliche Entstehung oszillierender Pfade („Zick-Zack-Verhalten“) aufgrund unvorteilhafter Richtungen (**Richtungen noch nicht orthogonal zu Niveaulinien, überarbeiten!**):



2.3.2 Das Verfahren der konjugierten Gradienten

Die obige Idee kann zur effizienten Lösung linearer Gleichungssysteme genutzt werden. Gegeben sei das LGS $Ax = b$ mit $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ hermitisch ($a_{ij} = \overline{a_{ji}}$). Das impliziert insbesondere, dass die Hauptdiagonale reell ist, und dass $x^H Ay = y^H Ax$ für $x, y \in \mathbb{K}^n$ gilt.

Zur Lösung wird dieses Mal die Minimierung folgendes quadratischen Funktionals betrachtet

$$\phi(x) = \frac{1}{2}x^H Ax - x^H b \quad (1)$$

Denn sollte eine Lösung $\hat{x} = A^{-1}b$ des LGS $Ax = b$ existieren, so gilt für alle $x \in \mathbb{K}^{n \times n}$:

$$\begin{aligned} & \phi(x) - \phi(\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2}x^H Ax - x^H b - \left(\frac{1}{2}\hat{x}^H A\hat{x} - \hat{x}^H b \right) \\ &= \frac{1}{2}x^H Ax - x^H b - \left(\frac{1}{2}\hat{x}^H A\hat{x} - \hat{x}^H b \right) + \overbrace{\frac{1}{2}(x - \hat{x})^H A(x - \hat{x}) - \frac{1}{2}x^H Ax + \frac{1}{2}x^H A\hat{x} + \frac{1}{2}\hat{x}^H Ax - \frac{1}{2}\hat{x}^H A\hat{x}}^{=0} \\ &= -x^H b + \hat{x}^H b + \frac{1}{2}(x - \hat{x})^H A(x - \hat{x}) - \hat{x}^H A\hat{x} + x^H A\hat{x} \\ &= -x^H b + \hat{x}^H b + \frac{1}{2}(x - \hat{x})^H A(x - \hat{x}) - \hat{x}^H b + x^H b \\ &= \frac{1}{2}(x - \hat{x})^H A(x - \hat{x}) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

Die Funktion hat demnach ein eindeutiges Minimum bei \hat{x} .

Definition 2.8. Ist $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ hermitisch und pos. definit, dann wird durch $\|x\|_A = \sqrt{x^H Ax}$, $x \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine Norm in \mathbb{K}^n definiert, die sogenannte Energienorm. Zur Energienorm gehört ein inneres Produkt $\langle x, y \rangle_A = x^H Ay$, $x, y \in \mathbb{K}^n$. Es ergibt sich die Abweichung des Funktionals von seinem Minimum als:

$$\phi(x) - \phi(\hat{x}) = \frac{1}{2}\|x - \hat{x}\|_A^2 \quad (2)$$

geometrische Interpretation: Der Graph von ϕ bezüglich der Energienorm ist ein kreisförmiger Paraboloid, welcher über dem Mittelpunkt \hat{x} liegt.

Idee: Konstruktion eines Verfahrens, welches die Lösung \hat{x} von $Ax = b$ iterativ approximiert, indem das Funktional ϕ sukzessiv minimiert wird:

2.3 Gradientenverfahren

Zur aktuellen Iteration $x^{(k)}$ wird die Suchrichtung $d^{(k)} \neq 0$ bestimmt, und die neue Iterierte $x^{(k+1)}$ über den Ansatz

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha \cdot d^{(k)} \quad (3)$$

bestimmt (gleiche Ansatz wie zuvor). Es gilt dann

$$\phi(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) = \phi(x^{(k)}) + \alpha d^{(k)H} A x^{(k)} + \frac{1}{2} \alpha^2 d^{(k)H} A d^{(k)} - \alpha d^{(k)H} \cdot b \quad (4)$$

Durch Differentiation nach α und Null setzen der Ableitung ergibt sich unsere Schrittweite $\alpha^{(k)}$:

$$\alpha^{(k)} = \frac{r^{(k)H} d^{(k)}}{d^{(k)H} A d^{(k)}}, \quad \text{mit } r^{(k)} = b - A x^{(k)} \quad (5)$$

zusätzlich erhalten wir die Suchrichtung $d^{(k)}$ indem wir die Richtungsableitung von ϕ betrachten, dabei gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial d^{(k)}} \phi(x^{(k)}) &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\phi(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) - \phi(x^{(k)})}{\alpha} \\ &\stackrel{(4)}{=} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\alpha d^{(k)H} A x^{(k)} + \frac{1}{2} \alpha^2 d^{(k)H} A d^{(k)} - \alpha d^{(k)H} \cdot b}{\alpha} \\ &= d^{(k)H} (A x^{(k)} - b) + \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{2} \alpha d^{(k)H} A d^{(k)} \\ &= -d^{(k)H} r^{(k)} \end{aligned}$$

Ziel ist es nun die Idee des Verfahren des steilsten Abstiegs zu verbessern, indem wir nicht nur in Richtung $r^{(k)}$ wandern (was zwar der größtmögliche Abstieg wäre, aber unvorteilhaftes „Zick-Zack-Verhalten“ mit sich bringt), sondern stattdessen

$$d^{(k)} = r^{(k)} + \beta^{(k-1)} d^{(k-1)} \quad (6)$$

Dabei sollte $\beta^{(k-1)}$ gerade so gewählt sein, dass $d^{(k)}$ und $d^{(k-1)}$ konjugiert bezüglich A sind, d.h. $\langle d^{(k-1)}, d^{(k)} \rangle = 0$. Aus dieser Bedingung ergibt sich dann

$$\beta^{(k-1)} = -\frac{r^{(k)H} A d^{(k-1)}}{d^{(k-1)H} A d^{(k-1)}} \quad (7)$$

Die Gleichungen (5) und (7) sind wohldefiniert, wenn $d^{(k)*} A d^{(k)} \neq 0$, aufgrund der positiv Definitheit von A ist dies genau dann der Fall wenn $d^{(k)} \neq 0$.

Nach (6) ist $d^{(k)} = 0$ jedoch nur dann möglich, wenn $r^{(k)}$ und $d^{(k-1)}$ linear abhängig sind, doch nach Konstruktion verläuft die Suchrichtung $d^{(k-1)}$ tangential zur Niveauläche von ϕ , also orthogonal zum Gradienten $r^{(k)}$.

Somit folgt $d^{(k)} = 0$ nur wenn $r^{(k)} = 0$, was $x^{(k)} = \hat{x}$ implizieren würde.

2.3.3 Eigenschaften des CG-Verfahrens

Wegen der Orthogonalitätsbedingung $\langle d^{(k+1)}, d^{(k)} \rangle_A = 0$ nennt man die Suchrichtungen zueinander A -konjugiert und das Verfahren, Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren). Zusätzlich zur Konjugiertheit von sukzessiven Suchrichtungen ergeben sich folgende weitere Eigenschaften:

Lemma 2.9. Sei $x^{(0)}$ ein beliebiger Startvektor und $d^{(0)} = r^{(0)} = b - A x^{(0)}$. Wenn $x^{(k)} \neq \hat{x}$ für $k = 0, 1, \dots, m$, mit $A \hat{x} = b$, so gilt:

- a) $r^{(m)H} d^{(j)} = 0$ für $0 \leq j < m$
- b) $r^{(m)H} r^{(j)} = 0$ für $0 \leq j < m$
- b) $\langle d^{(m)}, d^{(j)} \rangle_A = 0$ für $0 \leq j < m$ (10)

2.3 Gradientenverfahren

Beweis.

Für $k \geq 0$ gilt mit (3), dass $Ax^{(k+1)} = Ax^{(k)} + \alpha^{(k)}Ad^{(k)}$ und somit

$$\begin{aligned} r^{(k+1)} &= b - Ax^{(k+1)} \\ &= b - Ax^{(k)} - \alpha^{(k)}Ad^{(k)} \\ &= r^{(k)} - \alpha^{(k)}Ad^{(k)} \end{aligned} \tag{8}$$

die nach (5) definierte optimale Wahl für α bewirkt dann, dass

$$\begin{aligned} r^{(k+1)H}d^{(k)} &= (r^{(k)} - \alpha^{(k)}Ad^{(k)})^H d^{(k)} \\ &= r^{(k)H}d^{(k)} - \alpha^{(k)}d^{(k)H}Ad^{(k)} \\ &= r^{(k)H}d^{(k)} - \frac{r^{(k)H}d^{(k)}}{d^{(k)H}Ad^{(k)}}d^{(k)H}Ad^{(k)} \\ &\stackrel{(5)}{=} 0 \end{aligned} \tag{9}$$

Weiter gilt nach Induktion über m :

Induktionsanfang: $m = 1$.

Durch die Wahl $k = 0$ in (9) erhalten wir die Behauptung (a) und nach Setzung $d^{(0)} = r^{(0)}$ auch die Behauptung (b). (c) folgt im Fall $m = 1$ direkt aus der Orthogonalitätsbedingung.

Induktionsschritt: $m \rightarrow m + 1$.

Wir nehmen an, dass die Aussagen (a), (b) und (c) für $m \leq \bar{m}$ richtig sind und zeigen damit die Gültigkeit für $m = \bar{m} + 1$.

Zunächst folgt aus (9) mit $k = \bar{m}$, dass $r^{(\bar{m}+1)H}d^{(\bar{m})} = 0$, sowie aus der Darstellungen $r^{(m+1)}$ von (8) mit der Induktionsannahme (a und c):

$$r^{(\bar{m}+1)H}d^{(j)} = r^{(\bar{m})H}d^{(j)} - \alpha^{(\bar{m})}\langle d^{(\bar{m})}, d^{(j)} \rangle_A = 0 \text{ für } 0 \leq j < \bar{m}$$

Damit gilt (a) auch für $m = \bar{m} + 1$.

Weiter ergibt (6) umgestellt $r^{(j)} = d^{(j)} - \beta^{(j-1)}d^{(j-1)}$ und mit $r^{(0)} = d^{(0)}$ folgt daher (b) rekursiv aus (a):

$$r^{(\bar{m}+1)H}r^{(j)} = r^{(\bar{m}+1)H}d^{(j)} - \beta^{(j-1)} \cdot r^{(\bar{m}+1)H}d^{(j-1)} = 0 - \beta^{(j-1)} \cdot 0 = 0$$

Damit (c) gilt muss noch $\alpha^{(j)} \neq 0$ für $j < \bar{m}$ sein (der Fall $j = \bar{m}$ ergibt sich direkt aus der Orthogonalitätsbedingung), denn dann ergibt (8):

$$Ad^{(j)} = \frac{1}{\alpha^{(j)}} \left(r^{(j+1)} - r^{(j)} \right)$$

und somit folgt durch (6):

$$\begin{aligned} \langle d^{(\bar{m}+1)}, d^{(j)} \rangle_A &= \langle r^{(\bar{m}+1)}, d^{(j)} \rangle_A + \beta^{(\bar{m})} \underbrace{\langle d^{(\bar{m})}, d^{(j)} \rangle_A}_{=0} \\ &= r^{(\bar{m}+1)H}Ad^{(j)} \\ &= r^{(\bar{m}+1)H} \cdot \frac{1}{\alpha^{(j)}} \left(r^{(j+1)} - r^{(j)} \right) \\ &= \frac{1}{\alpha^{(j)}} \left(\underbrace{r^{(\bar{m}+1)H}r^{(j+1)}}_{=0} - \underbrace{r^{(\bar{m}+1)H}r^{(j)}}_{=0} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Angenommen $\alpha^{(j)} = 0$, dann folgt aus der Definition von $\alpha^{(j)}$ (5), dass auch $r^{(j)*}d^{(j)} = 0$ und mit (6)

$$0 = r^{(j)H}d^{(j)} = r^{(j)H} \left(r^{(j)} + \beta^{j-1}d^{(j-1)} \right) = r^{(j)H}r^{(j)} + \beta^{(j-1)} \underbrace{r^{(j)H}d^{(j-1)}}_{=0} = \|r^{(j)}\|_2^2$$

2.3 Gradientenverfahren

Das impliziert $r^{(j)} = 0$, doch dann wäre aber $x^{(j)} = \hat{x}$ (Widerspruch). \square

Das Lemma sagt insbesondere aus, dass alle Suchrichtungen paarweise A -konjugiert. Außerdem bilden die Residuen ein Orthogonalsystem und sind damit linear unabhängig. Es muss sich daher nach spätestens n Schritten $r^{(n)} = 0$, also $x^{(n)} = \hat{x}$ ergeben.

Korollar 2.10. Für $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ hermitisch und positiv definit findet das CG-Verfahren nach höchstens n Schritten die exakte Lösung $x^{(n)} = \hat{x}$.

In der Praxis ist dieses Korollar nicht relevant, da häufig wesentlich weniger Schritte benötigt werden oder die Orthogonalitätsbedingung aufgrund von Rundungsfehlern verloren gehen.

Eine alternative Interpretation als iteratives Verfahren (neben der geometrischen Idee) bietet die Theorie über Krylov-Räume:

Definition 2.11. Sei $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $y \in \mathbb{K}^n$. Dann heißt der Unterraum

$$\mathcal{K}_k(A, y) := \text{span}\{y, Ay, \dots, A^{k-1}y\} \leq \mathbb{K}^n$$

Krylov-Raum der Dimension k von A bezüglich y .

Satz 2.12. Sei $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ hermitisch und positiv definit, $d^{(0)} = r^{(0)}$, und $x^{(k)} \neq \hat{x}$ die k -te Iterierte des CG-Verfahrens. Dann gilt

$$x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$$

und $x^{(k)}$ ist in diesem affinen Raum die eindeutige Minimalstelle der Zielfunktion ϕ . (Optimalitätseigenschaft)

Beweis.

a) Wir beginnen damit induktiv zu zeigen, dass

$$d^{(j)} \in \text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(j)}\} \quad \text{für } j = 0, \dots, k+1 \quad (11)$$

Induktionsanfang: $j = 0$.

Wegen $d^{(0)} = r^{(0)}$ offensichtlich erfüllt.

Induktionsschritt: $j \rightarrow j+1$. Folgt direkt aus der Rekursionsvorschrift für d (6):

$$d^{(j+1)} = r^{(j+1)} + \beta^{(j)} \cdot d^{(j)} = r^{(j+1)} + \beta^{(j)} \sum_{i=0}^j \delta_i r^{(i)} \in \text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(j+1)}\}$$

Es folgt damit $\text{span}\{d^{(0)}, \dots, r^{(k-1)}\} \subset \text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(k-1)}\}$. Zusammen mit dem Lemma 2.9 folgt dass beide Systeme jeweils linear unabhängig sind, also jeweils Dimension $k-1$ haben, wodurch Gleichheit gilt.

$$\text{span}\{d^{(0)}, \dots, r^{(k-1)}\} = \text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(k-1)}\}$$

Aus der Rekursionsformel von x (3) ergibt sich der explizit Ausdruck:

$$x^{(k)} = x^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} \in x^{(0)} + \text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(k-1)}\}, \quad \text{für } j = 0, \dots, k-1$$

Im nächsten Schritt wird induktiv gezeigt, dass $r^{(j)} \in \mathcal{K}_j(A, r^{(0)})$:

2.3 Gradientenverfahren

Induktionsanfang: $j = 0$.

Offensichtlich gilt $r^{(0)} \in \text{span}\{r^{(0)}\}$. Induktionsschritt: $j - 1 \rightarrow j$.

Aus Teil (a) und der Induktionsannahme folgt

$$\begin{aligned} d^{(j-1)} &\in \text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(j-1)}\} \subset \text{span}\{r^{(0)}, \dots, A^{j-1}r^{(0)}\} \\ \stackrel{(8)}{\implies} r^{(j)} &= r^{(j-1)} - \alpha^{(j-1)} A d^{(j-1)} \in \text{span}\{r^{(0)}, \dots, A^j r^{(0)}\} \end{aligned}$$

Damit folgt $\text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(k-1)}\} \subset \mathcal{K}_j(A, r^{(0)})$. Die Menge $\{r^{(j)}\}_{j=0}^{k-1}$ ist linear unabhängig und daher hat der linke Unterraum die Dimension k , es folgt Gleichheit

$$\text{span}\{d^{(0)}, \dots, r^{(k-1)}\} = \text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(k-1)}\} = \mathcal{K}_j(A, r^{(0)})$$

und damit auch $x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$.

c) Aus Korollar 2.10 folgt die Existenz eines Iterationsindex $m \leq n$ mit

$$\hat{x} = x^{(0)} + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)}$$

Für ein $0 \leq k \leq m$ gilt dann:

$$\hat{x} = x^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} + \sum_{j=k}^{m-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} = x^{(k)} + \sum_{j=k}^{m-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)}$$

Und für ein beliebiges $x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)}) = x^{(0)} + \text{span}\{d^{(0)}, \dots, d^{(k-1)}\}$ demnach

$$\begin{aligned} \hat{x} - x &= \hat{x} - x^{(k)} + x^{(k)} - x \\ &= x^{(0)} + \sum_{j=1}^{m-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} - x^{(0)} - \sum_{j=0}^{k-1} \delta_j \cdot d^{(j)} \\ &= \sum_{j=k}^{m-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} + \sum_{j=0}^{k-1} (-\alpha^{(j)} - \delta_j) \cdot d^{(j)} \\ &= \hat{x} - x^{(k)} + \sum_{j=0}^{k-1} (-\alpha^{(j)} - \delta_j) \cdot d^{(j)} \end{aligned}$$

für $\delta_j \in \mathbb{K}$. Da die Suchrichtungen nach Lemma 2.9 A -konjugiert sind folgt:

$$\begin{aligned} \phi(x) - \phi(\hat{x}) &= \frac{1}{2} \|\hat{x} - x\|_A^2 \\ &= \frac{1}{2} \left\| \sum_{j=k}^{m-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} + \sum_{j=0}^{k-1} (-\alpha^{(j)} - \delta_j) \cdot d^{(j)} \right\|_A^2 \\ &= \frac{1}{2} \left\| \sum_{j=k}^{m-1} \alpha^{(j)} \cdot d^{(j)} \right\|_A^2 + \frac{1}{2} \left\| \sum_{j=0}^{k-1} (-\alpha^{(j)} - \delta_j) \cdot d^{(j)} \right\|_A^2 \\ &= \frac{1}{2} \|\hat{x} - x^{(k)}\|_A^2 + \frac{1}{2} \left\| \sum_{j=0}^{k-1} (-\alpha^{(j)} - \delta_j) \cdot d^{(j)} \right\|_A^2 \\ &= \phi(\hat{x}) - \phi(x^{(k)}) + \frac{1}{2} \left\| \sum_{j=0}^{k-1} (-\alpha^{(j)} - \delta_j) \cdot d^{(j)} \right\|_A^2 \\ &\geq \phi(\hat{x}) - \phi(x^{(k)}) \end{aligned}$$

Insbesondere gilt Gleichheit bei $x = x^{(k)}$. □

2.3.4 Praktische Aspekte der Implementierung

Bemerkung 2.13. Für eine Implementierung des CG-Verfahren sollte man nicht die Gleichungen (5) und (7) für $\alpha^{(k)}$ und $\beta^{(k)}$ verwenden, sondern lieber folgende Darstellungen, welche numerisch stabiler sind:

$$\alpha^{(k)} = \frac{\|r^{(k)}\|_2^2}{d^{(k)H} A d^{(k)}} \quad (5')$$

$$\beta^{(k)} = \frac{\|r^{(k+1)}\|_2^2}{\|r^{(k)}\|_2^2} \quad (7')$$

Die Gleichung (5') folgt aus (3) und Lemma 2.9 (a), nach welchen

$$r^{(k)H} d^{(k)} = r^{(k)H} r^{(k)} + \beta^{(k)} \cdot \underbrace{r^{(k)H} d^{(k-1)}} = 0 = \|r^{(k)}\|_2^2$$

Die Gleichung (7') folgt dann aus (8), (5') und dem Lemma 2.9 (b):

$$r^{(k+1)H} A d^{(k)} = \frac{1}{\alpha^{(k)}} \left(r^{(k+1)H} r^{(k)} - r^{(k+1)H} r^{(k+1)} \right) = \frac{-\|r^{(k+1)}\|_2^2}{\alpha^{(k)}} = -\frac{\|r^{(k+1)}\|_2^2}{\|r^{(k)}\|_2^2} d^{(k)H} A d^{(k)}$$

Es ergibt sich damit folgender Algorithmus:

Algorithmus 4: CG-Verfahren

Initialisierung: $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ sei hermitisch und positiv definit.

Ergebnis: $x^{(k)}$ als Approximation für $A^{-1}b$,
 $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ als zugehöriges Residuum.

- 1 Wähle $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ beliebig
- 2 $r^{(0)} \leftarrow b - Ax^{(0)}$
- 3 $d^{(0)} \leftarrow r^{(0)}$
- 4 **for** $k = 0, 1, \dots$,
 - 5 $\alpha^{(k)} \leftarrow \frac{\|r^{(k)}\|_2^2}{d^{(k)*H} A d^{(k)}}$
 - 6 $x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)}$
 - 7 $r^{(k+1)} \leftarrow r^{(k)} - \alpha^{(k)} A d^{(k)}$
 - 8 $\beta^{(k)} \leftarrow \frac{\|r^{(k+1)}\|_2^2}{\|r^{(k)}\|_2^2}$
 - 9 $d^{(k+1)} \leftarrow r^{(k+1)} + \beta^{(k)} d^{(k)}$
- 10 **until stop**

Der Aufwand des CG-Verfahrens ergibt sich aus einer Matrix-Vektor Multiplikation in jedem Iterationsschritt und ist damit vergleichbar mit dem Gesamt- und Einzelschritt.

Bemerkung 2.14. Das CG-Verfahren ist typischerweise wesentlich schneller als das Gesamt- bzw. Einzelschrittverfahren, **aber** verlangt, dass die vorausgesetzte Matrix hermitisch ist. Ein schnelles und einfaches Verfahren für allgemeine Matrizen ist derzeit nicht bekannt, ein komplizierteres Verfahren mit ähnlicher Konvergenzgeschwindigkeit ist das GMRES-Verfahren (Vgl. Hanku-Bourgeois, Kapitel 3, Abschnitt 16).

2.4 Präkonditionierung des CG-Verfahren

Definition 2.15. $\kappa_M(A) = \text{cond}_M(A) = \|A^{-1}\|_M \cdot \|A\|_M$ wird als Kondition der Matrix A bezüglich der Norm $\|\cdot\|_M$ bezeichnet. Sie beschreibt die schlimmstmögliche Fortpflanzung des Eingangsfehlers beim Lösen eines LGS.

Gegeben sei $Az = b$ mit der Lösung $z = A^{-1}b$. Der Einfluss vom Eingangsfehlers sei Δb :

$$z + \Delta z = A^{-1}(b + \Delta b) = A^{-1}b + A^{-1}\Delta b$$

Die berechnete Lösung erhält dabei den Fortpflanzungsfehler $\Delta z = A^{-1}\Delta b$.

Sei $\|\cdot\|$ die zu $\|\cdot\|_M$ verträgliche Matrixnorm (d.h. $\|Ax\| \leq \|A\|_M \cdot \|x\|$), so ergibt sich als relativer Fehler:

$$\begin{aligned} \frac{\|\Delta z\|}{\|z\|} &= \frac{\|\Delta z\|}{\|b\|} \cdot \frac{\|b\|}{\|z\|} \\ &= \frac{\|A^{-1}\Delta b\|}{\|b\|} \cdot \frac{\|Az\|}{\|z\|} \\ &\leq \|A^{-1}\|_M \cdot \|A\|_M \cdot \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \cdot \frac{\|z\|}{\|z\|} \\ &= \text{cond}_M A \cdot \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \end{aligned}$$

Typischerweise ist die Konvergenz eines numerischen Verfahrens umso langsamer, je schlechter die Matrix A konditioniert ist, d.h. je größer die Konditionszahl A ist.

2.4.1 Präkonditionierung mittels Cholesky

Idee: Gleichungssystem $Ax = b$ in ein äquivalentes LGS umwandeln, sodass die Kondition sich verbessert:

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad (\Delta)$$

wobei M hermitisch und positiv definit ist.

Problem: Die Matrix $M^{-1}A$ muss nicht notwendig hermitisch sein, daher nutzen wir die Cholesky-Zerlegung $M = LL^H$ und erhalten¹:

$$L^{-H}L^{-1}Ax = L^{-H}L^{-1}b \implies L^{-1}AL^{-*}z = L^{-1}b \quad \text{mit } x = L^{-*}z$$

Hierbei ist die Koeffizientenmatrix $L^{-1}AL^{-H}$ sicher hermitisch und positiv definit, denn $(L^{-1}AL^{-H})^H = (L^{-H})^H A^H (L^{-1})^H = L^{-1}AL^{-H}$ und für beliebiges $z \in \mathbb{K}^n$ und $x = L^{-H}z$ gilt:

$$z^H L^{-1}AL^{-H}z = x^H L^{-H}z = x^H Ax \geq 0$$

Wir können also CG-Verfahren zum Lösen von $L^{-1}AL^{-*}z = L^{-1}b$ nutzen und aus dieser Lösung dann x bestimmen. In der Praxis werden wir stattdessen durch geschickte Modifikation des klassischen CG-Verfahren direkt x berechnen.

Ziel: Die Konditionszahl von $L^{-1}AL^{-*}$ soll kleiner werden als die Konditionszahl von A , dies liefert schnellere Konvergenz der Iterierten $z^{(k)}$ und der Lösung $x^{(k)} = L^{-*}z$

¹ $L^{-H} = (L^H)^{-1} = (L^{-1})^H$

Bemerkung 2.16. Die Faktorisierung $M = LL^*$ muss nicht explizit berechnet werden, da die Variable z wieder durch x substituiert werden kann.

Für die Berechnung der Koeffizienten $\beta^{(k)}$ und die dafür benötigte Norm $\|L^{-1}b - L^{-1}AL^{-H}z^{(k)}\|_2^2$ wird neben $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ noch ein Hilfsvektor

$$s^{(k)} = M^{-1}r^{(k)} = M^{-1}b - M^{-1}Ax^{(k)}$$

benötigt ($s^{(k)}$ beschreibt das Residuum von (Δ)).

Für die Norm gilt

$$\|L^{-1}b - L^{-1}AL^{-H}z^{(k)}\|_2^2 = \|L^{-1}\underbrace{(b - Ax^{(k)})}_{=r^{(k)}}\|_2^2 = (r^{(k)H} \underbrace{L^{-H}(L^{-1}r^{(k)})}_{=s^{(k)}}) = r^{(k)H}s^{(k)}$$

2.4.2 Algorithmus: PCG-Verfahren

Algorithmus 5: Präkonditioniertes CG-Verfahren (PCGV)

Initialisierung: $A, M \in \mathbb{K}^{n \times n}$ seien hermitisch und positiv definit.

Ergebnis: $x^{(k)}$ als Approximation für $A^{-1}b$,
 $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ Residuum im Schritt k ,
 $s^{(k)}$ das Residuum von (Δ) .

- 1 Wähle $x^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ beliebig
- 2 $r^{(0)} \leftarrow b - Ax^{(0)}$
- 3 Löse $Ms^{(0)} = r^{(0)}$
- 4 $d^{(0)} \leftarrow s^{(0)}$
- 5 **for** $k = 0, 1, \dots$,
 - 6 $\alpha^{(k)} \leftarrow \frac{r^{(k)H}s^{(k)}}{d^{(k)H}Ad^{(k)}}$
 - 7 $x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} + \alpha^{(k)}d^{(k)}$
 - 8 $r^{(k+1)} \leftarrow r^{(k)} - \alpha^{(k)}Ad^{(k)}$
 - 9 Löse $Ms^{(k+1)} = r^{(k+1)}$
 - 10 $\beta^{(k)} \leftarrow \frac{r^{(k+1)H}s^{(k+1)}}{r^{(k)H}s^{(k)}}$
 - 11 $d^{(k+1)} \leftarrow s^{(k+1)} + \beta^{(k)}d^{(k)}$
- 12 **until stop**

Der Aufwand im Vergleich zum CGV erhöht sich beim PCGV um das Lösen eines LGS $Ms = r$. Die erhoffte schnellere Konvergenz des Iterationsverfahren macht sich also nur bezahlt, wenn das LGS $Ms = r$ entsprechend billig gelöst werden kann.

Da A bei Anwendung des CGV typischerweise dünn besetzt ist, dominieren die Kosten für die Lösung des LGS $Ms = r$ bei dem Gesamtkosten des PCGV.

Satz 2.17. Die k -te Iterierte $x^{(k)}$ vom Algorithmus des PCGV liegt in dem affin verschobene Krylov-Raum $x^{(0)} + \mathcal{K}_k(M^{-1}A, M^{-1}r^{(0)})$ und ist in dieser Menge die eindeutig bestimmte Minimalstelle des Funktional $\phi(x) = \frac{1}{2}x^H Ax - x^H b$.

Beweis.

Nach Satz 2.12 liegt die entsprechende Iterierte $z^{(k)} = L^H x^{(k)}$ in dem affin verschobenen Krylov-

2.5 Anwendung und Konvergenzgeschwindigkeit des CG-Verfahren

Raum $z^{(0)} + \mathcal{K}_k(L^{-1}AL^{-H}, L^{-1}b - L^{-1}AL^{-1}z^{(0)})$ mit $z^{(0)} = L^H x^{(0)}$ und minimiert in dieser Menge das Fehlerfunktional $\psi(z) = \frac{1}{2}L^{-1}AL^{-H}z - z^H L^{-1}b$.

Durch die Transformation $x = L^{-H}z$ werden die Iterierten und die genannten Krylov-Räume aufeinander abgebildet und es gilt $\psi(z) = \phi(x)$. \square

Bemerkung 2.18. Die Konstruktion geeigneter Prädikationsmatrizen M ist eine schwierige Sache.

2.5 Anwendung und Konvergenzgeschwindigkeit des CG-Verfahren

2.5.1 Lösen von Randwertproblemen mittels CG-Verfahren

Bevor wir zu einer Anwendung derartiger iterierten Verfahren starten, wiederholen wir kurz einen wichtigen Satz der Analysis:

Satz 2.19 (Satz von Taylor). Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ eine $(n+1)$ -mal stetig differenzierbare Funktion und $x, x_0 \in [a, b]$. Dann existiert ein ξ zwischen x und x_0 , so dass

$$f(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k + \underbrace{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot (x - x_0)^{n+1}}_{R_n(x, x_0)}$$

Beweis. Analysis II.

Beispiel 2.20. Wir betrachten das Randwertproblem des Laplace Operators^a:

$$-\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = f(x, y) \quad \text{für } (x, y) \in Q$$

gemeinsam mit der Dirichlet-Randbedingung $u(x, y) = 0$ für $(x, y) \in \partial Q$ auf dem Einheitsquadrat $Q = (0, 1) \times (0, 1) \subset \mathbb{R}^2$.

Die Lösung $u = u(x, y)$ beschreibt z.B. die Auslenkung einer (idealisierten) Membran, die über dem Gebiet Q horizontal gespannt ist und mit einer Kraftdichte f vertikal belastet wird.

Eine Lösung ist im Allgemeinen nicht analytisch angebar, sodass man auf numerische Näherungslösungen zurückgreifen muss.

Betrachte Q als Quadratgitter:



mit m Knoten und Gitterabstand $h = \frac{1}{m-1}$. Die gesamte Knotenzahl ist $n = m^2$.

Für die Nachbarpunkte um einen Punkte $(x, y) \in Q$ gilt nach Taylorformel:

$$u(x+h, y) \approx u(x, y) + h \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{1}{6} h^3 \frac{\partial^3 u(x, y)}{\partial x^3} + \mathcal{O}(h^4) \quad (1)$$

$$u(x-h, y) \approx u(x, y) - h \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} - \frac{1}{6} h^3 \frac{\partial^3 u(x, y)}{\partial x^3} + \mathcal{O}(h^4) \quad (2)$$

$$u(x, y+h) \approx u(x, y) + h \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + \frac{1}{6} h^3 \frac{\partial^3 u(x, y)}{\partial y^3} + \mathcal{O}(h^4) \quad (3)$$

$$u(x, y-h) \approx u(x, y) - h \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} - \frac{1}{6} h^3 \frac{\partial^3 u(x, y)}{\partial y^3} + \mathcal{O}(h^4) \quad (4)$$

Das Summieren von (1) und (2), sowie (3) und (4) liefert

$$\begin{aligned} u(x+h, y) + u(x-h, y) &= 2u(x, y) + h^2 \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \mathcal{O}(h^4) \\ \implies \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} &= h^{-2} \cdot (u(x+h, y) - 2u(x, y) + u(x-h, y)) + \mathcal{O}(h^2) \\ u(x, y+h) + u(x, y-h) &= 2u(x, y) + h^2 \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + \mathcal{O}(h^4) \\ \implies \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} &= h^{-2} \cdot (u(x, y+h) - 2u(x, y) + u(x, y-h)) + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

Damit erhalten wir die sogenannte „5-Punktregel“:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= -\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} \\ &= -h^{-2} \cdot (u(x+h, y) + u(x-h, y) + u(x, y+h) + u(x, y-h) - 4u(x, y)) \end{aligned}$$

Durch Berücksichtigung der Randbedingung $u(x, y) = 0$ für $(x, y) \in \partial Q$ ist dies äquivalent zu einem linearen Gleichungssystem $Ax = b$ für den Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ der unbekannten Knotenwerte $x_i = u(P_i)$

Die Matrix A hat die Gestalt

$$A = \left(\begin{array}{cccc} B & -I & 0 & \dots \\ -I & B & -I & \\ 0 & -I & B & \ddots \\ \vdots & & \ddots & \ddots \end{array} \right) \Bigg\}^n \quad \text{mit } B = \left(\begin{array}{cccc} 4 & -1 & 0 & \dots \\ -1 & 4 & -1 & \\ 0 & -1 & 4 & \ddots \\ \vdots & & \ddots & \ddots \end{array} \right) \Bigg\}^m$$

und der Einheitsmatrix I , d.h. $B, I \in \mathbb{R}^{m \times m}$. Die rechte Seite ist $b = h^2(f(P_1), \dots, f(P_n))^T$.

Wir erhalten ein sehr großes LGS mit dünn besetzter Bandmatrix mit Bandbreite $2m+1$, symmetrisch, schwach diagonaldominant, positiv definit. Es bietet sich also an unsere iterativen Verfahren zum Lösen anzuwenden.

^aSei f eine Funktion in kartesischen Koordinaten (x, y) , so ist der Laplace Operator definiert durch

$$\Delta f = \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2}$$

2.5.2 Konvergenzgeschwindigkeit des CG-Verfahren

Satz 2.21 (CG-Konvergenz). Sei x die Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$. Für das CG-Verfahren gilt die Fehlerabschätzung

$$\|x^{(k)} - x\|_A \leq 2 \left(\frac{1 - 1/\sqrt{\kappa}}{1 + 1/\sqrt{\kappa}} \right)^k \cdot \|x^{(0)} - x\|$$

wobei $\kappa := \kappa(A) = \text{cond}(A)$ die Konditionszahl von A ist.

Zur Reduktion des Anfangsfehlers um den Faktor ε sind circa

$$k(\varepsilon) \approx \frac{1}{2} \sqrt{\kappa(A)} \cdot \ln\left(\frac{2}{\varepsilon}\right)$$

Iterationsschritte erforderlich.

Für den Beweis des Satzes benötigen wir noch einen Hilfssatz:

Hilfssatz 2.22 (polynomiale Normschranke). Sei p ein reelles Polynom k -ten Grades (d.h. $p \in P_k := \mathbb{R}_k[X]$) mit $p(0) = 1$. Wenn p auf einer Menge, die alle Eigenwerte von A enthält beschränkt ist, d.h. $\sup_{\mu \in S} |p(\mu)| \leq M$, dann gilt

$$\|x^{(k)} - x\|_A \leq M \cdot \|x^{(0)} - x\|_A$$

Beweis des Hilfssatz.

Durch $\mathcal{K}_k(A, r^{(0)}) = \{p(A)r^{(0)} : p \in P_{k-1}\}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \|x^{(k)} - x\|_A &= \min\{\|y - x\|_A : y \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})\} \\ &= \min_{p \in P_{k-1}} \|x^{(0)} - x + p(A)r^{(0)}\|_A \end{aligned}$$

Wegen $r^{(0)} = Ax^{(0)} - b = A \cdot (x^{(0)} - x)$ folgt dann

$$\begin{aligned} \|x^{(k)} - x\|_A &= \min_{p \in P_{k-1}} \|x^{(0)} - x + p(A) \cdot A \cdot (x^{(0)} - x)\| \\ &\leq \min_{p \in P_{k-1}} \|I + A \cdot p(A)\|_A \cdot \|x^{(0)} - x\|_A \end{aligned}$$

Da $(1 + x \cdot P(x))$ selbst wieder ein Polynom von Grad k mit $p(0) = 1$ ist, lässt sich dies weiter abschätzen zu

$$\|x^{(k)} - x\|_A \leq \min_{p \in P_k, p(0)=1} \|p(A)\|_A \cdot \|x^{(0)} - x\|_A$$

mit der von A -Norm (Energienorm) $\|\cdot\|_A$ erzeugten natürlichen Matrixnorm $\|\cdot\|_A$.

Für beliebiges $y \in \mathbb{R}^n$ gilt mit einer Orthonormalbasis $\{w_1, \dots, w_n\}$ aus Eigenvektoren von A (d.h. $Aw_j = \lambda_j w_j$) die Darstellung:

$$y = \sum_{j=1}^n \gamma_j w_j, \quad \gamma_j = \langle y, w_j \rangle$$

und folglich für ein $p(x) = \sum_{i=0}^k c_i x^i$:

$$\begin{aligned} p(A)y &= p(A) \left(\sum_{j=1}^n \gamma_j w_j \right) = \left(\sum_{j=1}^n \gamma_j p(A) w_j \right) \\ &= \left(\sum_{j=1}^n \gamma_j \sum_{i=0}^k c_i A^i w_j \right) = \left(\sum_{j=1}^n \gamma_j \sum_{i=0}^k c_i \lambda_j^i w_j \right) = \left(\sum_{j=1}^n \gamma_j p(\lambda_j) w_j \right) \end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned}\|p(A)y\|_A^2 &= \left\| \left(\sum_{j=1}^n \gamma_j p(\lambda_j) w_j \right) \right\|_A^2 = \left\langle \sum_{j=1}^n \gamma_j p(\lambda_j) w_j, A \sum_{l=1}^n \gamma_l p(\lambda_l) w_l \right\rangle_2 \\ &= \sum_{j,l=1}^n \gamma_j \gamma_l p(\lambda_j) p(\lambda_l) \cdot \langle w_j, A w_l \rangle_2 = \sum_{j=1}^n \gamma_j^2 p(\lambda_j)^2 \lambda_j \leq M^2 \sum_{j=1}^n \gamma_j^2 \lambda_j = M^2 \|y\|_A^2\end{aligned}$$

Dies impliziert

$$\|p(A)\|_A = \sup_{y \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}} \frac{\|p(A)y\|_A}{\|y\|_A} \leq M$$

und damit die Behauptung. \square

Beweis zur CG-Konvergenz (Satz 2.21)

Durch Verwendung des Hilfssatz mit $S := [\lambda, \Lambda]$, wobei λ den kleinsten und Λ den größten Eigenwert von A beschreibt, folgt:

$$\|x^{(k)} - x\|_A \leq \min_{p \in P_k, p(0)=1} \left(\sup_{\lambda \leq \mu \leq \Lambda} |p(\mu)| \right) \cdot \|x^{(0)} - x\|_A$$

Dies ergibt die Behauptung wenn wir noch zeigen können, dass

$$\min_{p \in P_k, p(0)=1} \sup_{\lambda \leq \mu \leq \Lambda} |p(\mu)| \leq 2 \cdot \frac{(1 - \sqrt{\frac{\lambda}{\Lambda}})^k}{(1 + \sqrt{\frac{\lambda}{\Lambda}})^k}$$

Hierbei handelt es sich um ein Problem der Bestapproximation von Polynomen bzgl. der Maximumnorm (Chebyshev-Approximation).

Die beste Lösung \bar{p} ist gegeben durch

$$\bar{p}(\mu) = \frac{T_k\left(\frac{\Lambda + \lambda - 2\mu}{\Lambda - \lambda}\right)}{T_k\left(\frac{\Lambda + \lambda}{\Lambda - \lambda}\right)}$$

wobei T_k das k -te Chebyshev-Polynom auf $[-1, 1]$ ist, für dieses gilt

$$\sup_{\lambda \leq \mu \leq \Lambda} |\bar{p}(\mu)| = T_k\left(\frac{\Lambda + \lambda}{\Lambda - \lambda}\right)^{-1}$$

Aus der Darstellungen für die Chebyshev-Polynome

$$T_k(\mu) = \frac{1}{2} \left((\mu + \sqrt{\mu^2 - 1})^k + (\mu - \sqrt{\mu^2 - 1})^k \right), \quad \text{für } \mu \in [-1, 1]$$

folgt mittels der Identität

$$\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1} + \sqrt{\left(\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1}\right)^2 - 1} = \frac{\kappa + 1}{\kappa - 1} + \frac{2\sqrt{\kappa}}{\kappa - 1} = \frac{(\sqrt{\kappa} + 1)^2}{\kappa - 1} = \frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1}$$

die folgende Abschätzung nach unten:

$$T_k\left(\frac{\Lambda + \lambda}{\Lambda - \lambda}\right) = T_k\left(\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1}\right) = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1}\right)^k + \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}\right)^k \right) \geq \left(\frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1}\right)^k$$

Also ist $\bar{p}(\mu)$ auf $[\lambda, \Lambda]$ durch $2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1}\right)^k$ beschränkt, was die erste Ungleichung des Satzes zeigt.

2.5 Anwendung und Konvergenzgeschwindigkeit des CG-Verfahren

Für den zweiten Teil betrachten wir die Anzahl der Schritte, so dass

$$2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^{k(\varepsilon)} < \varepsilon \quad \Longleftrightarrow \quad k(\varepsilon) > \ln\left(\frac{2}{\varepsilon}\right) \cdot \left(\ln \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right) \right)^{-1}$$

Durch die Reihendarstellung $\ln \frac{x+1}{x-1} = 2\left(\frac{1}{x} + \frac{1}{3}\frac{1}{x^3} + \frac{1}{5}\frac{1}{x^5} + \dots\right)$ ist die zweite Ungleichung erfüllt wenn

$$k(\varepsilon) > \frac{1}{2} \sqrt{\kappa} \ln\left(\frac{2}{\varepsilon}\right)$$

□

3 Eigenwertprobleme

3.1 Einleitung

Aus der linearen Algebra ist bereits das klassische Eigenwertproblem bekannt:

Gegeben sei eine Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und gesucht sind $\lambda \in \mathbb{K}$ und $v \in \mathbb{K}^n$, $v \neq 0$ sodass

$$Av = \lambda v$$

Das Umstellen des Eigenwertproblems ergibt das System

$$(A - \lambda I)v = 0 \quad (*)$$

Hierbei muss $A - \lambda I$ singulär sein, sonst ist die eindeutige Lösung des Systems gegeben durch $v = 0$.

Per Hand würden wir hier nun das charakteristische Polynom $\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$ aufstellen und dessen Nullstellen bestimmen, da dies genau die Werte für λ sind, für welche das System (*) nicht-triviale Lösungen hat.

Für die numerische Berechnung der Eigenwerte ist dies nicht ratsam, da Nullstellenbestimmung bei Polynomen hochgradig schlecht konditioniert ist.

Wir stellen folgende Zusammenhänge der Berechnung von Eigenwerten und Eigenvektoren fest:

a) Eigenwert bekannt \implies Eigenvektor als Lösung eines LGS (*).

b) Eigenvektor bekannt \implies Eigenwert über Rayleigh-Quotient $\lambda = \frac{\langle Av, v \rangle}{\|v\|_2^2}$

3.2 Einschließungssätze und Stabilität

Hilfssatz 3.1. Seien $A, B \in \mathbb{K}^{n \times n}$ beliebige Matrizen und $\|\cdot\|_{\text{op}}$ eine durch $\|\cdot\|$ induzierte Operatornorm. Dann gilt für jeden Eigenwert λ von A , welcher nicht zugleich auch Eigenwert von B ist, die Beziehung

$$\|(\lambda I - B)^{-1}(A - B)\|_{\text{op}} \geq 1$$

Beweis.

Ist w ein Eigenvektor vom Eigenwert λ von A , so folgt aus der Identität $(A - B)w = (\lambda I - B)w$, wenn λ kein Eigenwert von B ist, d.h. $\lambda I - B$ invertierbar, dass:

$$(\lambda I - B)^{-1}(A - B)w = w$$

Demnach ist also

$$1 \leq \sup_{x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}} \frac{\|(\lambda I - B)^{-1}(A - B)x\|}{\|x\|} = \|(\lambda I - B)^{-1}(A - B)\|_{\text{op}}$$

3.2.1 Gerschgorin-Kreise

Satz 3.2 (Satz von Gerschgorin). Alle Eigenwerte einer Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ liegen in der Vereinigung der sogenannten Gerschgorin-Kreise

$$K_j := \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{jj}| \leq \sum_{k \neq j} |a_{jk}| \right\}, \quad \text{für } j = 1, \dots, n$$

Für eine Teilmenge $I \subset \{1, \dots, n\}$ gilt, sind die Mengen $U = \bigcup_{j \in I} K_j$ und $V = \bigcup_{j \notin I} K_j$ disjunkt, so liegen in U genau $m := |I|$ und in V genau $n - m$ Eigenwerte von A (mehrfache Eigenwerte werden entsprechend ihrer algebraischen Vielfachheit gezählt).

Beweis.

Zur ersten Behauptung:

Wir setzen $B = D := \text{diag}(a_{jj})$ in dem Hilfssatz 3.1 und nehmen $\|\cdot\|_\infty$ als natürliche Matrixnorm.

Für $\lambda \neq a_{jj}$ folgt dann

$$\|(\lambda I - D)^{-1}(A - D)\|_\infty = \max_{j=1, \dots, n} \frac{1}{|\lambda - a_{jj}|} \sum_{k \neq j} |a_{jk}| \geq 1,$$

d.h. λ liegt in einem der Gerschgorin-Kreise.

Für den zweiten Teil setzen wir $A_t = D + t(A - D)$, dann hat $A_0 = D$ als Eigenwerte a_{11}, \dots, a_{nn} die Mittelpunkte von K_1, \dots, K_n und damit liegen genau m dieser Eigenwerte in U und die restlichen $n - m$ in V .

Die Abbildung $t \mapsto D + t(A - D)$ ist stetig in t und da Eigenwerte einer Matrix selbst stetig sind (d.h. ändert sich die Matrix leicht ab, dann ändern sich auch die Eigenwerte nur leicht ab), folgt, dass beim Wandern von $t = 0$ zu $t = 1$ und damit von $A_0 = D$ zu $A_1 = A$ sich die Eigenwerte stetig durch den Raum \mathbb{K} bewegen. Da die Mengen U und V abgeschlossen und disjunkt sind haben sie einen positiven Abstand, welcher durch die stetige Bewegung der Eigenwerte nicht überschritten werden kann. \square

Ein Alternativer Beweis zur ersten Behauptung liefert eine Betrachtung des Eigenwertproblems $Ax = \lambda x$ mit Eigenvektor $x \neq 0$. Offensichtlich existiert ein x_i mit $|x_j| \leq |x_i|$ für alle $j \neq i$.

Die i -te Komponente von Ax ist dann gegeben durch

$$\lambda x_i = (Ax)_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = a_{ii} x_i + \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j$$

Somit folgt

$$|\lambda - a_{ii}| = \left| \frac{1}{x_i} \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j \right| = \left| \sum_{j \neq i} a_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$$

Demnach liegt $\lambda \in K_i$. \square

Korollar 3.3. Aus Satz 3.2 folgt insbesondere für $m = 1$, dass wenn ein Gerschgorin-Kreis keinen anderen schneidet, dass dieser genau einen Eigenwert enthält. Und wenn alle Gerschgorin-Kreise disjunkt sind, dann ist die Matrix diagonalisierbar.

Weiter ist eine Matrix genau dann invertierbar, wenn keiner der Gerschgorin-Kreise die 0 enthält.

Beispiel 3.4. Gegeben sei die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0.1 & -0.2 \\ 0 & 2 & 0.4 \\ -0.2 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Es ergeben sich die folgenden Gerschgorin-Kreise:

$$K_1 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 1| \leq 0.3\}$$

$$K_2 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 2| \leq 0.4\}$$

$$K_3 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 3| \leq 0.2\}$$



3.2.2 Stabilität von Eigenwerten

Satz 3.5 (Stabilitätssatz). Sei $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine diagonalisierbare Matrix, d.h. es gibt eine invertierbare Matrix $W = (W^{(1)} | \dots | W^{(n)})$ aus Eigenvektoren mit $A = W\Lambda W^{-1}$ und $\Lambda = \text{diag}(\lambda_i(A))$.

Für eine zweite Matrix $B \in \mathbb{K}^{n \times n}$ gibt es zu jedem Eigenwert $\lambda(B)$ von B einen Eigenwert $\lambda(A)$ von A , sodass

$$|\lambda(A) - \lambda(B)| \leq \text{cond}_2(W) \cdot \|A - B\|_2$$

Beweis.

Sei $\lambda = \lambda(B)$ kein Eigenwert von A , so gilt

$$\begin{aligned} \|(\lambda I - A)^{-1}\|_2 &= \|(\lambda I - W\Lambda W^{-1})^{-1}\|_2 \\ &= \|W(\lambda I - \Lambda)^{-1}W^{-1}\|_2 \\ &\leq \|W\|_2 \cdot \|W^{-1}\|_2 \cdot \|(\lambda I - \Lambda)^{-1}\|_2 \\ &= \text{cond}_2(W) \cdot \max_{i=1, \dots, n} |\lambda - \lambda_i(A)|^{-1} \end{aligned}$$

Mit dem Hilfssatz 3.1 folgt dann die Behauptung. \square

Für hermitesche Matrizen $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ existiert bekannterweise eine Orthonormalbasis des $\mathbb{K}^{n \times n}$ aus Eigenvektoren, sodass die Matrix W als unitär angenommen werden kann, d.h. $W^{-1} = W^H$. In diesem

3.3 Iterative Verfahren

Fall gilt $\|W\| = \sqrt{\lambda_{\max}(W^H W)} = \sqrt{\lambda_{\max}(I)} = 1$ und analog $\|W^H\| = 1$, also

$$\text{cond}_2(W) = \|W^{-1}\|_2 \cdot \|W\|_2 = 1$$

Regel: Allgemein kann man sagen, dass das Eigenwertproblem für hermitesche Matrizen gut konditioniert ist, während das allgemeine Eigenwertproblem je nach Größe von $\text{cond}_2(W)$ beliebig schlecht konditioniert sein kann.

3.3 Iterative Verfahren

Im folgenden wollen wir ein iteratives Verfahren zu Lösung des partiellen Eigenwertproblems einer Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ betrachten.

3.3.1 Potenz-Methode

Definition 3.6. Die Potenzmethode (Von-Mises-Iteration) erzeugt ausgehend von einem Startvektor $z^{(0)} \in \mathbb{C}^n$ mit $\|z^{(0)}\| = 1$ eine Folge von Iterationen $z^{(t)} \in \mathbb{C}^n, t = 1, 2, \dots$ durch

$$\tilde{z}^{(t)} = Az^{(t-1)} \quad \text{und} \quad z^{(t)} = \frac{\tilde{z}^{(t)}}{\|\tilde{z}^{(t)}\|}$$

Für einen beliebigen Index $k \in \{1, \dots, n\}$, (z.B. maximale Komponente von $z^{(k)}$) setzen wir:

$$\lambda^{(t)} = \frac{(Az^{(t)})_k}{(z^{(t)})_k}$$

Zur Normierung wird üblicherweise $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ oder $\|\cdot\|_\infty$ verwendet.

Zur Analyse des Verfahrens nehmen wir an, dass die Matrix A diagonalisierbar ist. Dies ist äquivalent zu der Tatsache, dass A eine Basis von normierten Eigenvektoren $\{w^{(1)}, \dots, w^{(n)}\}$ besitzt.

zusätzlich nehmen wir an, dass $z^{(0)}$ eine nicht-triviale Komponente bezüglich $w^{(n)}$ besitzt. (*Dies ist keine wesentliche Einschränkung, da aufgrund des unvermeidbaren Rundungsfehlers dieser Fall der Iteration sicher einmal auftritt*)

Satz 3.7 (Potenz-Methode). Die Matrix A sei diagonalisierbar und ihr betragsgrößer Eigenwert sei separiert von den anderen Eigenwerten, also oBdA $|\lambda_n| > |\lambda_{n-1}| \geq |\lambda_{n-2}| \geq \dots \geq |\lambda_1|$.

Der Startvektor $z^{(0)}$ habe eine nicht-triviale Komponente bezüglich des zugehörigen Eigenvektors $w^{(n)}$, dann gibt es Zahlen $\delta_t \in \mathbb{C}, |\delta_t| = 1$, sodass

$$\|z^{(t)} - \delta_t \cdot w^{(n)}\| \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad \lambda^{(t)} - \lambda_n = \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^t\right) \quad \text{für } t \rightarrow \infty$$

Beweis.

Sei $z^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \cdot w^{(i)}$ die Basisdarstellung des Startvektors (mit $\alpha_n \neq 0$). Für die Iterierten gilt:

$$z^{(t)} = \frac{\tilde{z}^{(t)}}{\|\tilde{z}^{(t)}\|} = \frac{Az^{(t-1)}}{\|Az^{(t-1)}\|} = \dots = \frac{A^t z^{(0)}}{\|A^t z^{(0)}\|} \quad (1)$$

Dabei gilt:

$$A^t z^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^t w^{(i)} = \lambda_n^t \alpha_n \cdot \left(w^{(n)} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\alpha_n} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n} \right)^t w^{(i)} \right) \quad (2)$$

3.3 Iterative Verfahren

Wegen $|\frac{\lambda_i}{\lambda_n}| \leq \rho := |\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}| < 1$ für $i = 1, \dots, n-1$ folgt

$$A^t z^{(0)} = \lambda_n^t \alpha_n (w^{(n)} + \mathcal{O}(\rho^t)) \quad \text{für } t \rightarrow \infty$$

Dies ergibt nach (1):

$$z^{(t)} = \frac{A^t z^{(0)}}{\|A^t z^{(0)}\|} = \frac{\lambda_n^t \alpha_n (w^{(n)} + \mathcal{O}(\rho^t))}{|\lambda_n^t \alpha_n| \cdot \|w^{(n)} + \mathcal{O}(\rho)\|} = \underbrace{\frac{\lambda_n^t \alpha_n}{|\lambda_n^t \alpha_n|}}_{=: \delta_k} \cdot w^{(n)} + \mathcal{O}(\rho)$$

Dabei ist $\delta_t \in \mathbb{C}$ und $|\delta_t| = 1$, daher folgt die erste Aussage.

Weiter gilt

$$\begin{aligned} \lambda^{(t)} &= \frac{(Az^{(t)})_k}{(z^{(t)})_k} \\ &\stackrel{(1)}{=} \frac{(A^{t+1}z^{(0)})_k}{\|(A^{t+1}z^{(0)})_k\|} \cdot \frac{\|(A^{t+1}z^{(0)})_k\|}{(A^t z^{(0)})_k} \\ &\stackrel{(2)}{=} \frac{\lambda_n^{t+1} \left(\alpha_n w_{n,k} + \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n} \right)^{t+1} w_{i,k} \right)}{\lambda_n^t \left(\alpha_n w_{n,k} + \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n} \right)^t w_{i,k} \right)} \\ &= \lambda_n + \mathcal{O} \left(\left| \frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n} \right|^t \right) \quad \text{für } t \rightarrow \infty \end{aligned}$$

□

Die Konvergenz der Potenzmethode ist umso besser, je mehr der betragsgrößte Eigenwert λ_n von den übrigen separiert ist. Der Beweis ist verallgemeinerbar für betragsgrößte Eigenwerte, welche mehrfach auftreten, sofern die Matrix diagonalisierbar ist.

3.3.2 Inverse Iteration

Als nächstes wollen wir uns die „Inverse Iteration“ nach Wielandt anschauen.

Wir nehmen an, wir haben bereits eine Näherung $\tilde{\lambda}$ für einen Eigenwert λ_k der regulären Matrix A (z.B. durch Einschließungssätze). Die Näherung sei gut in dem Sinne, dass $|\lambda_k - \tilde{\lambda}| \ll |\lambda_i - \tilde{\lambda}|$ für $i \neq k$.

Wir betrachten das Eigenwertproblem, welches sich für die Matrix $A - \tilde{\lambda}I$ ergibt:

$$(A - \tilde{\lambda}I)v = \xi v \iff (A - \tilde{\lambda}I - \xi I)v = 0 \iff (A - (\tilde{\lambda} + \xi)I)v = 0$$

Wegen $(A - \lambda_k I) = 0$, ist $\xi = \lambda_k - \tilde{\lambda}$ ein Eigenwert von $A - \tilde{\lambda}I$ und damit $\mu = \frac{1}{\xi} = (\lambda_k - \tilde{\lambda})^{-1}$ ein Eigenwert von $(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}$.²

Allgemeiner hat im Falle $\tilde{\lambda} \neq \lambda_k$ die Matrix $(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}$ die Eigenwerte $\mu_i = (\lambda_i - \tilde{\lambda})^{-1}$ für $i = 1, \dots, n$ und es gilt

$$\left| \frac{1}{\lambda_k - \tilde{\lambda}} \right| \gg \left| \frac{1}{\lambda_i - \tilde{\lambda}} \right| \quad \text{für } i \neq k$$

² $Av = \lambda v \implies v = A^{-1}\lambda v \implies \lambda^{-1}v = A^{-1}v$

Definition 3.8. Die inverse Iteration beruht auf der Anwendung der Potenzmethode auf die Matrix $(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}$ mit einer a priori Schätzung $\tilde{\lambda}$ zum gesuchten Eigenwert λ_k .

Ausgehend von einem Startwert $z^{(0)}$ werden Iterierte $z^{(t)}$ als Lösung der Gleichungssysteme

$$(A - \tilde{\lambda}I)\tilde{z}^{(t)} = \tilde{z}^{(t-1)}, \quad z^{(t)} = \frac{\tilde{z}^{(t)}}{\|\tilde{z}^{(t)}\|}$$

bestimmt.

Die zugehörige Eigenwertnäherung wird bestimmt durch

$$\mu^{(t)} = \frac{(z^{(t)})_k}{((A - \tilde{\lambda}I)z^{(t)})_k}$$

mit Nenner $\neq 0$ (oder im symmetrischen Fall einfach mit Hilfe der Rayleigh-Quotienten).

Aufgrund der Aussagen über Potenzmethoden liefert die inverse Iteration also für eine diagonalisierbare Matrix jeden Eigenwert, zu dem bereits eine hinreichend gute Näherung bekannt ist.

3.4 Page-Rank-Algorithmus

Das Ziel des Page-Rank-Algorithmus ist die Bestimmung der Ausgabereihenfolge bei Suchergebnissen. Dabei berufen wir uns auf folgende Regeln:

- (1) Eine Website erhält eine umso höhere Bewertung, je mehr Links auf sie zeigen.
- (2) Links von höher bewerteten Websites soll relevanter sein, als solche von unbedeutenden Websites
- (3) Ein Link von einer Website, die wenig Links nach außen hat, soll höher gewichtet werden als der von einer Website mit vielen Links nach außen.

Wir beschreiben unser Model als ein Netz mit n Websites, wobei ein Index k immer für eine Website steht und suchen die Bewertung $x_k \in \mathbb{R}$ der Website k .

Weiter sei L_k die Menge der Websites, welche auf k verlinken, Links auf Websites von sich selbst werden dabei nicht berücksichtigt und n_k sei die Anzahl Websites, auf welche k verlinkt.

Wir modellieren mittels folgendem LGS

$$x_k = \sum_{j \in L_k} \frac{1}{n_j} \cdot x_j$$

Die Gleichung $x = Ax$ mit

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad A_{ij} = a_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{n_j}, & \text{falls die Seite } j \text{ auf die Seite } i \text{ verlinkt} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

entspricht hierbei der Eigenwertgleichung für den Eigenwert $\lambda = 1$.

Der historische Ansatz von Google ist die Potenzmethode:

3.4.1 Stochastische Vektoren/Matrizen

Definition 3.9. Ein Vektor $p \in \mathbb{R}^n$ heißt stochastischer Vektor, wenn alle Elemente p_i nicht-negativ sind und die Summe der Elemente des Vektors gleich 1 ist, d.h. $\sum_i p_i = 1$.

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt stochastische Matrix, wenn alle Spalten der Matrix stochastische Vektoren sind, d.h.

$$a_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^n a_{ij} = 1 \quad \forall j$$

Lemma 3.10. Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine stochastische Matrix und $p \in \mathbb{R}^n$ ein stochastischer Vektor, dann ist das Produkt $Ap \in \mathbb{R}^{n \times n}$ wieder ein stochastischer Vektor.

Beweis.

Offensichtlich $(Ap)_{ij} \geq 0$, weiter es sei a_i die i -te Spalte der Matrix A , d.h. a_i ist ein stochastischer Vektor

$$\begin{aligned} A \cdot p &= A \cdot \begin{pmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix} = p_1 \cdot a_1 + \cdots + p_n \cdot a_n \\ &= \sum_{i=1}^n (p_i a_{i1} + \cdots + p_i a_{in}) \\ &= p_1 \sum_{i=1}^n a_{i1} + \cdots + p_n \sum_{i=1}^n a_{in} \\ &= p_1 \cdot 1 + \cdots + p_n \cdot 1 = 1 \end{aligned}$$

□

Korollar 3.11. Seien $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ stoch. Matrizen, dann ist das Produkt $A \cdot B$ wieder eine stoch. Matrix.

Beweis. Folgt direkt aus Lemma 3.9.

Satz 3.12. Eine stochastische Matrix A hat immer den Eigenwert 1. Der Betrag aller anderen Eigenwerte ist kleiner oder gleich 1.

Beweis.

Für den ersten Teil nutzen wir aus, dass A und A^T die gleichen Eigenwerte, da A und A^T die gleiche Determinante besitzen und damit die charakteristischen Polynome $\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \det(A^T - \lambda I) = \chi_{A^T}(\lambda)$ übereinstimmen.

Weiter ist nach Definition einer stochastischen Matrix die Summe jedes Zeilenvektors von A^T ist gleich 1, also ist $e = (1, \dots, 1)^T$ ein Eigenvektor von A^T mit Eigenwert 1, also besitzt auch die Matrix A den Eigenwert $\lambda = 1$.

Für den zweiten Teil nehmen wir an es existiert ein Eigenvektor v zum Eigenwert λ mit $|\lambda| > 1$, denn dann gilt

$$A^n v = A^{n-1}(Av) = A^{n-1} \lambda v = \lambda A^{n-1} v = \cdots = \lambda^n v$$

Für die Länge dieses Vektors gilt $\|\lambda^n v\| = |\lambda|^n \cdot \|v\|$ ein exponentielles Wachstum in n , da $|\lambda| > 1$.

Daraus folgt, dass für große n ein Element $(A^n)_{ij}$ existiert, welches größer als 1 ist.

Da nach Korollar 3.11 die Matrix A^n stochastisch ist bildet dies einen Widerspruch.

□

Lemma 3.13. Die Bewertungsmatrix A des Page-Rank-Algorithmus ist eine stochastische Matrix.

Beweis. Offensichtlich gilt $a_{ij} \geq 0$, weiter gilt

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} = n_j \cdot \frac{1}{n_j} + (n - n_j) \cdot 0 = 1$$

□

Beispiel 3.14. Wir betrachten folgendes einfaches Netz mit 4 Knoten:



Es ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/3 & 1/2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$$

Lösen dieses linearen Gleichungssystems liefert:

$$x \in \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} 0.72 \\ 0.24 \\ 0.54 \\ 0.36 \end{pmatrix} \right\}$$

Demnach hat die erste Website die höchste Bewertung.

3.4.2 Vorgehensweise für weitere Eigenwerte/Eigenvektoren

Wir betrachten die Diagonalmatrix

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

mit den Eigenwerten $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 2$ zu den Eigenvektoren

$$w^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad w^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wir führen folgende Transformation durch:

$$B = \underbrace{\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}}_{=A} - \underbrace{\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=(1,0)^T(3,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

3.4 Page-Rank-Algorithmus

Idee: Umwandlung der betrachteten Matrix in eine andere Matrix, wobei der betragsgrößte Eigenwert entfernt wird, d.h. durch 0 ersetzt wird. Eine Iterative Anwendung liefert dann alle Eigenwerte.

Herleitung: Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gegeben mit betragsmäßig absteigenden Eigenwerten, d.h.

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > 0$$

Der Eigenvektor zu λ_1 sei gegeben durch $u^{(1)}$.

Wir wählen eine von Null verschiedene Komponente $u_p^{(1)}$ von $u^{(1)}$ und schreiben A_p für die p -te Zeile von A , d.h. $A_p = (A_{p1}, A_{p2}, \dots, A_{pn})^T$. Betrachte nun die Matrix

$$B = A - \frac{1}{w_p^{(1)}} w^{(1)} \cdot A_p^T \quad \text{mit} \quad B_{ij} = A_{ij} - \frac{1}{w_p^{(1)}} w_i^{(1)} \underbrace{A_{pj}}_{A_{pj}}$$

Aus dem Eigenwertproblem $Aw^{(k)} = \lambda_k w^{(k)}$ ergibt sich

$$\lambda^{(k)} w_p^{(k)} = (Aw^{(k)})_p = \langle A_p, w^{(k)} \rangle$$

Für $k = 1$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} Bw^{(1)} &= Aw^{(1)} - \frac{1}{w_p^{(1)}} \cdot w^{(1)} \cdot \langle A_p, w^{(1)} \rangle \\ &= Aw^{(1)} - \frac{1}{w_p^{(1)}} \cdot w^{(1)} \cdot \lambda_1 w_p^{(1)} \\ &= \lambda_1 w^{(1)} - \lambda_1 w^{(1)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

d.h. 0 ist ein Eigenwert von B (statt vorher $\lambda^{(1)}$ von A).

Analoge Überlegung für $k = 2, \dots, n$ liefert:

$$\begin{aligned} Bw^{(k)} &= \lambda_k w^{(k)} - \frac{1}{w_p^{(1)}} \cdot w^{(1)} \cdot \lambda_k w_p^{(k)} \\ &= \lambda_k \cdot \left(w^{(k)} - \frac{w_p^{(k)}}{w_p^{(1)}} \cdot w^{(1)} \right) \end{aligned} \tag{1}$$

Die Eigenwerte bleiben beim Wechsel von A zu B erhalten, da

$$\begin{aligned} Bw^{(k)} + 0 &= Bw^{(k)} + \underbrace{Bw^{(1)}}_{=0} \\ &= Bw^{(k)} + Bw^{(1)} \cdot \frac{-w_p^{(k)}}{w_p^{(1)}} \\ &= B \cdot \left(w^{(k)} - \frac{w_p^{(k)}}{w_p^{(1)}} \cdot w^{(1)} \right) \end{aligned} \tag{2}$$

Und damit

$$B \cdot \left(w^{(k)} - \frac{w_p^{(k)}}{w_p^{(1)}} \cdot w^{(1)} \right) \stackrel{(2)}{=} Bw^{(k)} \stackrel{(1)}{=} \lambda_k \cdot \left(w^{(k)} - \frac{w_p^{(k)}}{w_p^{(1)}} \cdot w^{(1)} \right)$$

Dies zeigt für $k = 2, 3, \dots, n$, dass λ_k auch ein Eigenwert zu B ist, wenn auch mit anderem Eigenvektor.

Satz 3.15 (Deflation nach Wielandt). Seien die Eigenwerte von A , betragsmäßig absteigend, d.h. $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$, mit zugehörigen Eigenvektoren $w^{(1)}, \dots, w^{(n)}$. Dann besitzt die Matrix

$$B = A - \frac{1}{w_p^{(1)}} w^{(1)} \cdot A_p^T \quad \text{mit} \quad w_p^{(1)} \neq 0 \text{ und } A_p = (A_{p1}, A_{p2}, \dots, A_{pn})^T$$

die Eigenwerte $0, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ mit den zugehörigen Eigenvektoren $w^{(1)}, \tilde{w}^{(2)}, \dots, \tilde{w}^{(n)}$, wobei

$$\tilde{w}^{(k)} = w^{(k)} - \frac{w_p^{(k)}}{w_p^{(1)}} \cdot w^{(1)} \quad (*)$$

Den zum Eigenwert λ_2 zugehörigen Eigenvektor $\tilde{w}^{(2)}$ erhält man somit mit der Potenzmethode für die Matrix B nach ihrer Definition.

Der Eigenvektor $w^{(2)}$ zum Eigenwert λ_2 der Matrix A kann dann wie folgt rekonstruiert werden:

- a) Lösen des linearen Gleichungssystems $(*)$ bezüglich $w^{(2)}$
- b) Lösen des LGS der EW-Gleichung
- c) Inverse Iteration nach Wielandt anwenden, um Eigenvektor von A zum zugehörigen Eigenwert λ_2 zu erhalten

Beispiel 3.16. Gesucht seien die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} -4 & 14 & 0 \\ -5 & 13 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Im ersten Schritt verwenden wir die Potenzmethode um den betragsmäßig größten Eigenwert und den zugehörigen Eigenvektor zu bestimmen, wir erhalten:

$$\lambda_1 = 6, w^{(1)} = \begin{pmatrix} -4 \\ -20/7 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Für die Deflation wählen wir nun $p = 1$ mit $w_p^{(1)} \neq 0$ und $A_p = (-4, 14, 0)^T$, die resultierende Matrix B ergibt sich dann durch:

$$B = \begin{pmatrix} -4 & 14 & 0 \\ -5 & 13 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix} - \frac{1}{-4} \cdot \begin{pmatrix} -4 \\ -20 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (-4, 14, 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -15/7 & 3 & 0 \\ -2 & 7/2 & 2 \end{pmatrix}$$

Erneutes Anwenden der Potenzmethode auf die neue Matrix B liefert den zweitgrößten Eigenwert und den zugehörigen Eigenvektor von B :

$$\lambda_2 = 3, \tilde{w}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2/7 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eine weitere Deflation mit dem neu gewonnen Eigenvektor und $p = 3$ ergibt

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -15/7 & 3 & 0 \\ -2 & 7/2 & 2 \end{pmatrix} - \frac{1}{1} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 2/7 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (-2, 7/2, 2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -11/7 & 2 & -4/7 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Hierbei ergibt sich der letzte Eigenwert und der zu C zugehörige Eigenvektor

$$\lambda_3 = 2, \tilde{w}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Nach beliebiger Methodik aus Satz 3.15 lassen sich nun aus $\tilde{w}^{(2)}$ und $\tilde{w}^{(3)}$ die Eigenvektoren $w^{(2)}$ und $w^{(3)}$ von A konstruieren.

4 Krylov-Raum-Methoden für EW-Probleme

Wir verfolgen die gleiche Idee, wie auch schon bei linearen Gleichungssystemen, d.h. die ursprünglich hochdimensionalen Probleme, werden durch geeignete Unterräume (Krylov-Räume) in kleinere Probleme umgewandelt.

Wir erhalten dabei ein iteratives Vorgehen, zu betrachtende Beispiele sind die Arnoldi-Methode und die Lanczos-Methode.

Wir betrachten also die Eigenwertgleichung $Az = \lambda z$ mit $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ (ab jetzt erlauben wir auch komplexe Matrizen), wobei A eine sehr große Matrix ist, typischerweise $n \geq 10^4$.

4.1 Galerkin-Approximation

Eigenwertprobleme können äquivalent in Variationsform (schwache Formulierung) geschrieben werden, diese besagt:

$z \in \mathbb{C}^n$ ist genau dann ein Eigenvektor von A zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$, wenn

$$\langle Az, y \rangle_2 = \lambda \langle z, y \rangle_2 \quad \forall y \in \mathbb{C}^n \quad (1)$$

Diese Äquivalenz gilt, da aus $\langle r, y \rangle_2 = 0$ für alle $y \in \mathbb{C}^n$ folgt, dass $r = 0$ sein muss, in unserem Fall ist $r = Az - \lambda z$ das Residuum des Eigenwertproblems.

Sei $K_m = \text{span}\{q^{(1)}, \dots, q^{(m)}\}$ ein geeignet gewählter Unterraum von \mathbb{C}^n kleiner Dimension, d.h. $\dim K_m = m \ll n$, dann wird das n -dimensionale Eigenwertproblem (1) mit folgendem m -dimensionalem Eigenwertproblem approximiert:

$$\text{suche } z \in K_m, \lambda \in \mathbb{C} : \quad \text{mit} \quad \langle Az, y \rangle_2 = \lambda \langle z, y \rangle_2 \quad \forall y \in K_m$$

Aufgrund der Bilinearität des Skalarproduktes reicht es auch, wenn wir nur die erzeugenden $q^{(i)}$ betrachten, statt alle $y \in K_m$.

Wir entwickeln die Eigenvektoren $z \in K_m$ bzgl. der gegebenen Basis:

$$z = \sum_{j=1}^m \alpha_j q^{(j)}$$

und erhalten somit das Galerkin-System

$$\sum_{j=1}^k \alpha_j \langle Aq^{(j)}, q^{(i)} \rangle_2 = \lambda \cdot \sum_{j=1}^k \alpha_j \langle q^{(j)}, q^{(i)} \rangle_2 \quad \forall i = 1, \dots, m$$

Dabei charakterisieren die α_i unser gesuchtes z , wir schreiben dieses System daher typischerweise in kompakter Form als Eigenwertproblem

$$\mathcal{A}\alpha = \lambda \mathcal{M}\alpha$$

mit Vektoren $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ und Matrizen $\mathcal{A} = (\langle Aq^{(j)}, q^{(i)} \rangle_2)_{i,j=1}^m$, $\mathcal{M} = (\langle q^{(j)}, q^{(i)} \rangle_2)_{i,j=1}^m$.

Im Folgenden betrachten wir immer die *kartesische Repräsentation* der Basisvektoren $q^{(i)} = (q_j^{(i)})_{j=1}^n$ und somit schreibt man das Galerkin-EW-Problem in der Form³

$$\sum_{j=1}^m \alpha_j \cdot \sum_{k,l=1}^n a_{k,l} \cdot q_k^{(j)} \cdot \bar{q}_l^{(i)} = \lambda \cdot \sum_{j=1}^m \alpha_j \cdot \sum_{k,l=1}^n q_k^{(j)} \cdot \bar{q}_l^{(i)} \quad \forall i = 1, \dots, m$$

³Als Erinnerung: Im Komplexen ist das Standardskalarprodukt definiert durch $\langle x, y \rangle_2 = \sum_i x_i \cdot \bar{y}_i$

4.2 Arnoldi-Methode

Mit $\mathcal{Q}^{(m)} = [q^{(1)}, \dots, q^{(m)}] \in \mathbb{C}^{n \times m}$ kann dies in kompakter Form

$$\mathcal{Q}^{(m)H} A \mathcal{Q}^{(m)} \alpha = \lambda \mathcal{Q}^{(m)H} \mathcal{Q}^{(m)} \alpha$$

formuliert werden.

Wenn $\{q^{(1)}, \dots, q^{(m)}\}$ eine Orthonormalbasis von K_m ist, reduziert sich dies zum normalen EW-Problem:

$$\underbrace{\mathcal{Q}^{(m)H} A \mathcal{Q}^{(m)}}_{=: H^{(m)} \in \mathbb{C}^{m \times m}} \alpha = \lambda \alpha \quad (2)$$

Falls $H^{(m)}$ eine spezielle Struktur hat (z. B. Hessenberg-Matrix oder symmetrische Tridiagonalgestalt), dann kann das EW-Problem mit niedriger Dimension (2) mit z.B. QR-Methode gelöst werden.

Seine Eigenwerte, genannt *Ritz-Eigenwerte*, können als Approximationen der dominanten Eigenwerte der ursprünglichen Matrix A betrachtet werden.

Bemerkung 4.1 (Krylov-Methode).

1. Wähle geeignete Unterräume $K_m \in \mathbb{C}^{m \times m}$, $m \ll n$ (Krylov-Räume) durch Verwendung der Matrix A und deren Potenz.
2. Konstruiere eine Orthonormalbasis $\{q^{(1)}, \dots, q^{(m)}\}$ von K_m mit der stabilisierten Version des Gram-Schmidt-Algorithmus und setze $\mathcal{Q}^{(m)} := [q^{(1)}, \dots, q^{(m)}]$.
3. Berechne die Matrix $H^{(m)} := \mathcal{Q}^{(m)H} A \mathcal{Q}^{(m)}$, welche konstruktionsbedingt eine Hessenberg-Matrix oder im hermiteschen Fall eine hermitesche Tridiagonalmatrix ist.
4. Löse das Eigenwertproblem der reduzierten Matrix $H^{(m)} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ durch die QR-Methode.
5. Die Eigenwerte von $H^{(m)}$ als Näherung der dominanten (betragsgrößten) Eigenwerte von A . Im Falle des betragskleinsten Eigenwert, muss die Matrix A^{-1} betrachtet werden (Konstruktion der Unterräume K_m kann sehr aufwendig sein).

4.2 Arnoldi-Methode

Idee:

Die Potenzmethode verwendet nur die aktuelle Iterierte $A^m q$ mit $m \ll n$ für den normierten Startvektor $q \in \mathbb{C}^n$ mit $\|q\|_2 = 1$, ignoriert aber die bereits berechneten Iterierten $\{q, Aq, A^2q, \dots, A^{m-1}q\}$.

Wir wollen diese bereits bestimmten Informationen nun nutzen und erstellen eine sogenannte *Krylov-Matrix*:

$$K_m = [q, Aq, A^2q, \dots, A^{m-1}q] \quad \text{mit } 1 \leq m \leq n$$

Die Spalten dieser Matrix sind jedoch nicht orthogonal zueinander, außerdem konvergiert $A^t q$ gegen den Eigenvektor zum betragsgrößten Eigenwert, d.h. K_m ist schlecht konditioniert⁴, da sich die letzten Spalten kaum ändern.

Wie wir sehen werden, ist die Konstruktion in eine orthogonale Basis mit dem Gram-Schmidt-Algorithmus instabil, wir wählen daher als Alternative in der Arnoldi-Methode die Verwendung einer stabilisierten Variante des Gram-Schmidt-Verfahrens um eine Folge orthonormaler Vektoren $\{q^{(1)}, q^{(2)}, \dots\}$ (bezeichnet als Arnoldi-Vektoren) zu erzeugen, sodass für jedes m die Vektoren $\{q^{(1)}, \dots, q^{(m)}\}$ den Krylov-Unterraum K_m aufspannen.

⁴Für nicht-invertierbare Matrizen $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$ ist die Konditionszahl über das Pseudoinverse definiert

Definition 4.2. Für das Folgende definieren wir den orthogonalen Projektionsoperator:

$$\text{proj}_u(v) := \frac{\langle v, u \rangle_2}{\|u\|_2^2} \cdot u$$

Dieser projiziert den Vektor v auf $\text{span}\{u\}$.

Mit diesem Operator ergibt sich das *klassische Gram-Schmidt-Orthogonalisierungs-Verfahren* als

$$\begin{aligned} q^{(1)} &= \frac{q}{\|q\|_2}, \\ \text{und für } t &= 2, \dots, m : \\ \tilde{q}^{(t)} &= A^{t-1}q - \sum_{j=1}^{t-1} \text{proj}_{q^{(j)}}(A^{t-1}q), \\ q^{(t)} &= \frac{\tilde{q}^{(t)}}{\|\tilde{q}^{(t)}\|_2} \end{aligned}$$

Der t -te Schritt projiziert dabei die Komponente von $A^{t-1}q$ in Richtung der bereits bestimmten orthogonalen Vektoren $\{q^{(1)}, \dots, q^{(t-1)}\}$.

Wir betrachten jetzt das *modifizierte Gram-Schmidt-Verfahren* (**Nochmal überarbeiten**), wobei der t -te Schritt die Komponente von $Aq^{(t)}$ in Richtung $\{q^{(1)}, \dots, q^{(t-1)}\}$ projiziert:

$$\begin{aligned} q^{(1)} &= \frac{q}{\|q\|_2}, \\ \text{und für } t &= 2, \dots, m : \\ \tilde{q}^{(t)} &= Aq^{(t-1)} - \sum_{j=1}^{t-1} \text{proj}_{q^{(j)}}(Aq^{(t-1)}), \\ q^{(t)} &= \frac{\tilde{q}^{(t)}}{\|\tilde{q}^{(t)}\|_2} \end{aligned}$$

Nach Konstruktion ist $q^{(t)}$ senkrecht zu $\{q^{(j)}\}_{j=1}^{t-1}$ und damit auch zu $\{\text{proj}_{q^{(j)}}(Aq^{(t-1)})\}_{j=1}^{t-1}$, es folgt also

$$\langle q^{(t)}, \tilde{q}^{(j)} \rangle_2 = \left\langle q^{(t)}, Aq^{(j-1)} - \sum_{i=1}^{j-1} \text{proj}_{q^{(i)}}(Aq^{(j-1)}) \right\rangle_2 = \langle q^{(t)}, Aq^{(j-1)} \rangle_2$$

Durch die Setzung $h_{j,t-1} := \langle q^{(j)}, Aq^{(t-1)} \rangle_2$ und $h_{t,t-1} := \|\tilde{q}^{(t)}\|$ ergibt sich mit dem modifizierte Gram-Schmidt-Algorithmus dann

$$Aq^{(t-1)} = \sum_{j=1}^t h_{j,t-1} q^{(j)}, \quad t = 2, \dots, m+1 \quad (1)$$

In der Praxis wird der modifizierte Gram-Schmidt-Algorithmus in der folgenden iterierten Form implementiert:

$$\begin{aligned} q^{(1)} &= \|q\|_2^{-1} q, \\ q^{(t,1)} &= Aq^{(t-1)}, \\ q^{(t,j+1)} &= q^{(t,j)} - \text{proj}_{q^{(j)}}(q^{(t,j)}), \\ q^{(t)} &= \|q^{(t,t)}\|_2^{-1} q^{(t,t)} \end{aligned} \quad (2)$$

4.2 Arnoldi-Methode

Wir erhalten dabei das gleiche Resultat, wie beim klassischen Gram-Schmidt-Verfahren, aber mit kleinerem numerischen Fehler. Um dies zu verdeutlichen hilft es das klassische und modifizierte Gram-Schmidt-Verfahren im Allgemeinen zu vergleichen (also nicht auf unsere spezielle Basis bezogen sondern für beliebige linear unabhängige Vektoren $\{v^{(t)}\}_{t=1}^n$):

Algorithmus 6 + 7: Gram-Schmidt (klassisch vs. modifiziert)

klassisch:	modifiziert:
<pre> 1 for $t = 1, \dots, n$ 2 $q^{(t)} = v^{(t)}$ 3 for $j = 1, \dots, t-1$ 4 $h_{j,t-1} \leftarrow \langle q^{(j)}, q^{(t)} \rangle$ 5 end 6 for $j = 1, \dots, t-1$ 7 $q^{(t)} \leftarrow q^{(t)} - h_{j,t-1} \cdot q^{(j)}$ 8 end 9 $h_{t,t-1} \leftarrow \ q^{(t)}\$ $q^{(t)} \leftarrow q^{(t)} / h_{t,t-1}$ 10 end </pre>	<pre> 1 for $t = 1, \dots, n$ 2 $q^{(t)} = v^{(t)}$ 3 for $j = 1, \dots, t-1$ 4 $h_{j,t-1} \leftarrow \langle q^{(j)}, q^{(t)} \rangle$ 5 $q^{(t)} \leftarrow q^{(t)} - h_{j,t-1} \cdot q^{(j)}$ 6 end 7 $h_{t,t-1} \leftarrow \ q^{(t)}\$ $q^{(t)} \leftarrow q^{(t)} / h_{t,t-1}$ 8 end </pre>

Einfaches Nachrechnen zeigt, dass beide Algorithmen bei exakter Arithmetik das gleiche Ergebnis liefern (vgl. Aufgabe 9.2).

Weiter sorgt das verzögerte Berechnen der Koeffizienten $h_{j,t-1}$ dafür, dass sich in $q^{(t)}$ weniger Fehler fortpflanzen. Im j -ten Schritt wurden bereits die Koeffizienten der Basisvektoren $q^{(1)}, \dots, q^{(j-1)}$ von $q^{(t)}$ eliminiert, wohingegen bei der Verwendung von $v^{(t)}$ noch große derartige Koeffizienten vorkommen könnten, welche zu stärkeren Fehlern in $h_{j,t-1}$ sorgen.

Definition 4.3 (Arnoldi-Algorithmus). Für eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ bestimmt die Arnoldi-Methode eine Folge orthonormaler Vektoren $q^{(t)} \in \mathbb{C}^n$ für $1 \leq t \leq m \ll n$ (Arnoldi-Basis), durch Anwendung der modifizierten Gram-Schmidt-Methode (2) auf die Basis $\{q, Aq, A^2q, \dots, A^{m-1}q\}$ des Krylov-Unterraums K_m .

Speziell für diese Basis ergibt sich dann folgender Algorithmus:

Algorithmus 8: MGS für Krylov-Räume

Initialisierung: $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ beliebig und $q^{(1)} := q \in \mathbb{C}^n$ mit $\|q\|_2 = 1$

Ergebnis: $\{q^{(t)}\}_{t=1}^m$ als Orthonormalbasis des Krylov-Raum K_m .

```

1 for  $t = 2, \dots, m$ 
2    $q^{(t)} = Aq^{(t-1)}$ 
3   for  $j = 1, \dots, t-1$ 
4      $h_{j,t-1} \leftarrow \langle q^{(j)}, q^{(t)} \rangle$ 
5      $q^{(t)} \leftarrow q^{(t)} - h_{j,t-1} \cdot q^{(j)}$ 
6   end
7    $h_{t,t-1} \leftarrow \|q^{(t)}\|$   $q^{(t)} \leftarrow q^{(t)} / h_{t,t-1}$ 
8 end

```

Sei $Q^{(m)} := [q^{(1)}, q^{(2)}, \dots, q^{(m)}]$ die $n \times m$ -Matrix aus den ersten Arnoldi-Vektoren und sei $H^{(m)}$ die

4.2 Arnoldi-Methode

obere Hessenberg Matrix ($m \times m$):

$$H^{(m)} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & \vdots \\ 0 & h_{32} & h_{33} & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & h_{m-1,m} \\ 0 & \dots & 0 & h_{m,m-1} & h_{m,m} \end{pmatrix}$$

Die Matrizen $Q^{(m)}$ sind orthonormal und mit (1) ergibt sich die Arnoldi-Beziehung

$$AQ^{(m)} = Q^{(m)}H^{(m)} + h_{m,m+1}[0, \dots, 0, q^{(m+1)}] \quad (3)$$

Multiplikation mit $Q^{(m)H}$ und Verwendung von

$$Q^{(m)H}Q^{(m)} = I \quad \text{und} \quad Q^{(m)H}q^{(m+1)} = 0$$

ergibt die für die Galerkin-Approximation benötigte Darstellung von $H^{(m)}$:

$$H^{(m)} = Q^{(m)H}AQ^{(m)}$$

Im Grenzfall $m = n$ ist die Matrix $H^{(n)}$ ähnlich zu A und hat die gleichen Eigenwerte.

Dies legt nahe, dass auch für $m \ll n$ die Eigenwerte der reduzierten Matrix $H^{(m)}$ eine gute Approximation einiger Eigenwerte von A sind. Wenn der Algorithmus endet (in exakter Arithmetik) für $m < n$ mit $h_{m,m+1} = 0$ dann ist der Krylov-Raum K_m ein invarianter Unterraum der Matrix A und die reduzierte Matrix $H^{(m)} = Q^{(m)H}AQ^{(m)}$ hat m gemeinsame Eigenwerte mit A , d.h. $\sigma(H^{(m)}) \subset \sigma(A)$ (vgl. Aufgabe 9.3)

Das folgende Lemma liefert a-posteriori Abschätzungen der Genauigkeit für die Approximation der Eigenwerte von A durch $H^{(m)}$.

Lemma 4.4. Sei $\{\mu, w\}$ ein Eigenpaar der Hessenberg-Matrix $H^{(m)}$ und sei $v = Q^{(m)}w$, sodass $\{\mu, v\}$ ein approximiertes Eigenpaar von A ist, dann gilt

$$\|Av - \mu v\|_2 = |h_{m+1,m}| \cdot |w_m|$$

wobei w_m die letzte Komponente des Eigenvektors w ist.

Beweis. Die Arnoldi-Beziehung (3) liefert

$$\begin{aligned} Av &= AQ^{(m)}w \\ &= Q^{(m)}H^{(m)}w + h_{m+1,m} \cdot [0, \dots, 0, q^{(m+1)}]w \\ &= \mu Q^{(m)}w + h_{m+1,m} \cdot [0, \dots, 0, q^{(m+1)}]w \\ &= \mu v + h_{m+1,m} \cdot [0, \dots, 0, q^{(m+1)}]w \\ &= \mu v + h_{m+1,m} \cdot w_m \cdot q^{(m+1)} \end{aligned}$$

Daraus folgt mit $\|q^{(m+1)}\|_2 = 1$, dass

$$\|Av - \mu v\|_2 = |h_{m+1,m}| \cdot |w_m|$$

□

Dies liefert keine a-priori-Information der Konvergenz der Eigenwerte von $H^{(m)}$ gegen die von A für $m \rightarrow n$, aber liefert eine a-posteriori-Prüfung, ob das erhaltene Paar $\{\mu, w\}$ eine gute Approximation ist, basierend auf den berechneten Größen $h_{m+q,m}$ und w_m .

Bemerkung 4.5. Die Ritz-Eigenwerte konvergieren zu den betragsgrößten Eigenwerten von A . Falls die betragskleinsten Eigenwerte bestimmt werden sollen, muss das diskutierte Verfahren auf die inverse Matrix angewendet werden (Vgl. Inverse Iteration nach Wielandt). In diesem Fall hat man einen großen Aufwand die Krylov-Räume $K_m = \text{span } q, A^{-1}q, \dots, A^{-m+1}q$ zu bestimmen, da hierfür die linearen Systeme $v^0 := q, Av^1 = v^0, \dots, Av^m = v^{m-1}$ sukzessiv gelöst werden müssen.

Bemerkung 4.6. Typische Implementierungen der Arnoldi-Methode werden nach einer bestimmten Anzahl von Iterationen neu begonnen. Es kann untersucht werden, dass die Konvergenz sich mit einer größeren Krylov-Unterraum-Dimension m verbessert. Die Größe m , für die eine optimale Konvergenz erhalten wird, ist leider nicht im Voraus bekannt.

Stattdessen verwendet man sogenannte „Switching“ Strategien zum testen, ob ein Neustart sinnvoll ist, um die Konvergenz zu beschleunigen.

Bemerkung 4.7. Die in Algorithmus 7 vorgestellte Methode des modifizierten Gram-Schmidt-Verfahrens für allgemeine Basen $\{v^{(t)}\}_{t=1}^n$ ergibt folgende Fehlerabschätzung^a:

$$\|\mathcal{Q}^H \mathcal{Q} - I\|_2 \leq \frac{c_1 \cdot \text{cond}_2(A)}{1 - c_2 \cdot \text{cond}_2(A)}$$

wobei $\mathcal{Q} = [q^{(1)}, \dots, q^{(n)}]$ und $A = [v^{(1)}, \dots, v^{(n)}]$. Die Konstanten c_1, c_2 kommen aus $\mathcal{O}(n\varepsilon)$ wobei ε die Maschinengenauigkeit beschreibt.

^aÅke Björck, Christopher C. Paige, Loss and recapture of orthogonality in the modified Gram-Schmidt algorithm, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, Vol. 13, No. 1, 1992, pp. 176-190, DOI: [10.1137/0613013](https://doi.org/10.1137/0613013)

Bemerkung 4.8. Andere Methoden zu Orthogonalisierung (wie z.B. Householder Transformation oder Givens-Rotation) sind zum Teil stabiler, als die stabilisierte Gram-Schmidt-Methode, aber aufgrund der iterativen Anwendungsmöglichkeit ist Gram-Schmidt beim Arnoldi-Verfahren vorteilhafter.

4.3 Lanczos-Methode

Für eine hermitesche Matrix A erhalten wir bei der Rekursions-Formel der Arnoldi-Methode:

$$\tilde{q}^{(t)} = Aq^{(t-1)} - \sum_{j=1}^{t-1} \langle Aq^{(t-1)}, q^{(j)} \rangle_2 q^{(j)}, \quad \text{für } t = 2, \dots, m+1$$

Dabei ist wegen $A^H = A$ aber $\langle Aq^{(t-1)}, q^{(j)} \rangle_2 = \langle q^{(t-1)}, Aq^{(j)} \rangle_2$ und mit $Aq^{(j)} \in \text{span}\{q^{(1)}, \dots, q^{(j+1)}\}$ ergibt sich für $j = 1, \dots, t-3$:

$$\begin{aligned} \langle Aq^{(t-1)}, q^{(j)} \rangle_2 &= q^{(j)H} Aq^{(t-1)} = q^{(j)H} A^H q^{(t-1)} = (Aq^{(j)})^H q^{(t-1)} \\ &= \langle q^{(t-1)}, Aq^{(j)} \rangle_2 = \left\langle q^{(t-1)}, \sum_{i=1}^{j+1} c_i q^{(i)} \right\rangle_2 = \sum_{i=1}^{j+1} \underbrace{\bar{c}_i \langle q^{(t-1)}, q^{(i)} \rangle_2}_{=0} = 0 \end{aligned}$$

Dies vereinfacht unseren Ausdruck für $\tilde{q}^{(t)}$ zu

$$\begin{aligned} \tilde{q}^{(t)} &= Aq^{(t-1)} - \underbrace{\langle Aq^{(t-1)}, q^{(t-1)} \rangle_2}_{=: \alpha_{t-1}} q^{(t-1)} - \underbrace{\langle Aq^{(t-1)}, q^{(t-2)} \rangle_2}_{=: \beta_{t-2}} q^{(t-2)} \\ &= Aq^{(t-1)} - \alpha_{t-1} q^{(t-1)} - \beta_{t-2} q^{(t-2)} \end{aligned} \tag{1}$$

4.3 Lanczos-Methode

Da A hermitesch ist, folgt $\alpha_{t-1} \in \mathbb{R}$:

$$\alpha_{t-1} = \langle Aq^{(t-1)}, q^{(t-1)} \rangle_2 = \langle q^{(t-1)}, Aq^{(t-1)} \rangle_2 = \overline{\langle Aq^{(t-1)}, q^{(t-1)} \rangle_2} = \overline{\alpha_{t-1}}$$

Weiter gilt für β_{t-1} :

$$\begin{aligned} \|\tilde{q}^{(t)}\|_2 &= \langle q^{(t)}, \tilde{q}^{(t)} \rangle_2 \\ &\stackrel{(1)}{=} \langle q^{(t)}, Aq^{(t-1)} - \alpha_{t-1}q^{(t-1)} - \beta_{t-2}q^{(t-2)} \rangle_2 \\ &= \langle q^{(t)}, Aq^{(t-1)} \rangle_2 \\ &= \langle Aq^{(t)}, q^{(t-1)} \rangle_2 \\ &= \beta_{t-1} \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass auch $\beta_{t-1} \in \mathbb{R}$ und $\beta_{t-1}q^{(t)} = \tilde{q}^{(t)}$. Also erhalten wir

$$Aq^{(t-1)} = \beta_{t-1}q^{(t)} + \alpha_{t-1}q^{(t-1)} + \beta_{t-2}q^{(t-2)}, \quad \text{für } t = 2, \dots, m+1$$

oder in Matrix-Form:

$$A \cdot \mathcal{Q}^{(m)} = \mathcal{Q}^{(m)} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \beta_3 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{m-1} \\ & & & \beta_{m-1} & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & & \beta_m & \alpha_m \end{pmatrix}}_{=:T^{(m)}} + \beta_m \cdot [0, \dots, 0, q^{(m+1)}]$$

wobei die Matrix $T^{(m)} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ist reell und symmetrisch. Von dieser sogenannten Lanczos-Beziehung ergibt sich

$$\mathcal{Q}^{(m)H} A \mathcal{Q}^{(m)} = T^{(m)}$$

Definition 4.1 (Lanczos-Algorithmus). Für eine hermitesche Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ bestimmt die Lanczos-Methode eine Menge von orthogonalen Vektoren $\{q^{(1)}, \dots, q^{(m)}\}$, $m \ll n$ durch Anwendung der Gram-Schmidt-Methode auf die Basis $\{q, Aq, \dots, A^{m-1}q\}$ des Krylov-Raumes K_m .

Algorithmus 9: Lanczos-Algorithmus

Initialisierung: Sei $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitesch und $q^{(1)} := q \in \mathbb{C}^n$ mit $\|q\|_2 = 1$

```

1  $q^{(0)} = 0$ 
2  $\beta_1 = 0$ 
3 for  $t = 1, \dots, m-1$ 
4    $r^{(t)} = Aq^{(t)}$ 
5    $\alpha_t = \langle r^{(t)}, q^{(t)} \rangle_2$ 
6    $s^{(t)} = r^{(t)} - \alpha_t q^{(t)} - \beta_{t-1} q^{(t-1)}$ 
7    $\beta_{t+1} = \|s^{(t)}\|$ 
8    $q^{(t+1)} = s^{(t)} / \beta_{t+1}$ 
9 end
10  $r^{(m)} = Aq^{(m)}$ 
11  $\alpha_m = \langle r^{(m)}, q^{(m)} \rangle_2$ 
```

4.4 Pseudospektren

Nachdem die Matrix $T^{(m)}$ berechnet ist, kann ihr Eigenwert λ_i und der zugehörige Eigenvektor w^i bestimmt werden, z.B. mit QR-Algorithmus.

Die Eigenwert und Eigenvektoren von $T^{(m)}$ werden mit dem Aufwand $\mathcal{O}(m^2)$ berechnet. Die Eigenwerte approximieren die der ursprünglichen Matrix.

Die Ritz Eigenvektoren v^i von A können mit $v^i = Q^{(m)} \cdot w^i$ berechnet werden.

4.4 Pseudospektren

Motivation: Mit Fußball spielen: **Bild einfügen**

Bei dem einen stabil, weil Ball bleibt in Kuhle. Bei dem anderen instabil, da Ball wegrollt.

Sauber: Fehler verschwinden / werden schlimmer.

Spezialfall: **Bild einfügen**

Kleine Auslenkung ist kein Problem, wenn zu groß, dann schon.

Frage ist, wie groß ist das Attraktorgebiet?

Begriff der Pseudospektren geht auf Landau zurück. Viele Resultate von Trefethen et al.

Konzept des Pseudo-Spektrums ist bei normalen Operatoren die Vereinigung der ε -Umgebungen seiner Eigenwerte

Definition 4.2. Für $\varepsilon \in \mathbb{R}_+$, ist das ε -Pseudospektrum $\sigma_\varepsilon(A) \subset \mathbb{C}$ einer Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ definiert als

$$\sigma_\varepsilon(A) := \{z \in \mathbb{C} \mid \|(A - zI)^{-1}\|_2 \geq \varepsilon^{-1}\} \cup \sigma(A)$$

Bemerkung 4.3. Das Konzept des Pseudo-Spektrums kann in viel allgemeineren Situationen eingeführt werden. (z.B. Dunford & Schwartz oder Kato)

Bemerkung 4.4. Krylov-Unterraum-Methoden, die bisher diskutiert wurden, lassen sich zur Berechnung des Pseudo-Spektrums einer Matrix verwenden. (z.B. bei Matrix von diskretisierten partiellen Differentialgleichungen)

Lemma 4.5.

1. Das ε -Pseudospektrum einer Matrix $T \in \mathbb{C}^{n \times n}$ kann definiert werden durch

$$\sigma_\varepsilon(T) := \{z \in \mathbb{C} \mid \sigma_{\min}(zI - T) \leq \varepsilon\}$$

wobei $\sigma_{\min}(B)$ den kleinsten Singulärwert der Matrix B bezeichnet, d.h.

$$\sigma_{\min}(B) := \min\{\lambda^{1/2} \mid \lambda \in \sigma(B^*)\}$$

mit der adjungierten B^* von B .

2. Das ε -Pseudospektrum $\sigma_\varepsilon(T)$ einer Matrix $T \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ist invariant unter Orthonormalen Transformationen, d.h. für eine unitäre Matrix $Q \in \mathbb{C}^{n \times n}$ gilt $\sigma_\varepsilon(Q^* T Q) = \sigma_\varepsilon(T)$

Beweis.

4.4 Pseudospektren

1. Es gilt

$$\begin{aligned}\|(zI - T)^{-1}\|_2 &= \max\{\mu 1/2 \mid \mu \text{ Singulärwert von } (zI - T)^{-1}\} \\ &= \min\{\mu 1/2 \mid \mu \text{ Singulärwert von } (zI - T)\}^{-1} \\ &= \sigma_{\min}(zI - T)^{-1}\end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}\sigma_\varepsilon(T) &= \{z \in \mathbb{C} \mid \|(zI - T)^{-1}\|_2 \geq \varepsilon^{-1}\} \\ &= \{z \in \mathbb{C} \mid \sigma_{\min}(zI - T)^{-1} \geq \varepsilon^{-1}\} \\ &= \{z \in \mathbb{C} \mid \sigma_{\min}(zI - T) \leq \varepsilon\}\end{aligned}$$

2. Übungsaufgabe

Betrachtung einer Folge von Gitterpunkten $z_i \in D \subset \mathbb{C}$ für $i = 1, 2, 3, \dots$ und in jedem Gitterpunkt wir das kleinste ε bestimmt, für das $z_i \in \sigma_\varepsilon(T)$.

Interpolation der erhaltenen Werte, bestimmt ob ein Punkte $z \in \mathbb{C}$ approximativ zu $\sigma_\varepsilon(T)$ gehört.