Warum ist Vorkonditionierung notwendig?

Konvergenzabschätzung des Verfahrens konjugierter Gradienten

$$\|\underline{x}^k - \underline{x}\|_A \leq \frac{2q^k}{1+q^{2k}} \|\underline{e}^0\|_A$$

mit

$$q = \frac{\sqrt{\kappa_2(A)}+1}{\sqrt{\kappa_2(A)}-1}, \quad \kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$$

Charakterisierung der extremalen Eigenwerte

$$\lambda_{\min}(A) = \min_{\underline{u}\in\mathbb{R}^n, \|\underline{u}\|_2>0} \frac{(A\underline{u},\underline{u})}{(\underline{u},\underline{u})} \leq \frac{(A\underline{u},\underline{u})}{(\underline{u},\underline{u})} \leq \max_{\underline{u}\in\mathbb{R}^n, \|\underline{u}\|_2>0} \frac{(A\underline{u},\underline{u})}{(\underline{u},\underline{u})} = \lambda_{\max}(A)$$

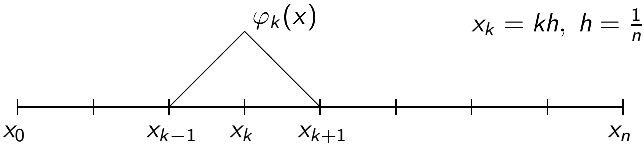
Aus den Spektraläquivalenzungleichungen

$$c_1^A\,(\underline{u},\underline{u}) \leq (A\underline{u},\underline{u}) \leq c_2^A(\underline{u},\underline{u}) \quad \text{für alle } \underline{u} \in \mathbb{R}^n$$

folgt dann

$$\kappa_2(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)} \leq \frac{c_2^A}{c_1^A}$$

Beispiel: Projektionsverfahren (gleichmäßige Unterteilung)



$$x_k = kh, \;\; h = \frac{1}{n}$$

$$\sum_{k=0}^{n} u_k \int_0^1 \varphi_k(x)\varphi_\ell(x)dx = \int_0^1 u(x)\varphi_\ell(x)dx \quad \text{für } \ell = 1, \ldots, n$$

Lineares Gleichungssystem

$$M_h \underline{u} = \underline{f}, \quad M_h[\ell, k] = \int_0^1 \varphi_k(x)\varphi_\ell(x)dx$$

Abschätzung der spektralen Konditionszahl?

Spektraläquivalenzungleichungen

$$c_1^M(\underline{v},\underline{v}) \le (M_h\underline{v},\underline{v}) \le c_2^M(\underline{v},\underline{v}) \quad \text{für alle } \underline{v} \in \mathbb{R}^{n+1}$$

Zunächst ist

$$(\underline{v},\underline{v}) = \sum_{k=0}^n v_k^2$$

Betrachten für beliebigen Vektor $\underline{v} \in \mathbb{R}^{n+1}$

$$\begin{aligned}
(M_h\underline{v},\underline{v}) &= \sum_{\ell=0}^n \sum_{k=0}^n M_h[\ell,k] v_k v_\ell = \sum_{\ell=0}^n \sum_{k=0}^n v_k v_\ell \int_0^1 \varphi_k(x)\varphi_\ell(x)dx \\
&= \int_0^1 \sum_{k=0}^n v_k\varphi_k(x) \sum_{\ell=0}^n v_\ell\varphi_\ell(x)dx \\
&= \int_0^1 [v_h(x)]^2 dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} [v_h(x)]^2 dx
\end{aligned}$$

Lokale Beiträge

$$
\begin{aligned}
\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} [v_h(x)]^2 dx &= \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \left[v_{i-1} + \frac{1}{h}(x - x_{i-1})(v_i - v_{i-1}) \right]^2 dx \\
&= \frac{1}{h^2} \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} [v_{i-1}(x_i - x) + v_i(x - x_{i-1})]^2 dx \\
&= \frac{1}{h^2} \int\limits_0^h [v_{i-1}(h - x) + v_i x]^2 dx \\
&= \frac{1}{h^2} \int\limits_0^h \left[v_{i-1}^2 (h-x)^2 + 2 v_{i-1} v_i (h-x) x + v_i^2 x^2 \right]^2 dx \\
&= \frac{1}{3} h \left[v_{i-1}^2 + v_{i-1} v_i + v_i^2 \right] \\
&= \frac{1}{6} h \left(\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{i-1} \\ v_i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} v_{i-1} \\ v_i \end{pmatrix} \right)
\end{aligned}
$$

Eigenwerte der lokalen Massematrix

$$\widetilde{M}_{h,i} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 3$$

lokale Spektraläquivalenzungleichungen

$$\frac{1}{6} h [v_{i-1}^2 + v_i^2] \leq \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} [v_h(x)]^2 dx \leq \frac{1}{2} h [v_{i-1}^2 + v_i^2]$$

Für

$$(M_h \underline{v}, \underline{v}) = \sum_{i=1}^{n} \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} [v_h(x)]^2 dx$$

ergibt sich dann

$$\frac{1}{6} h \sum_{i=0}^{n} v_i^2 \leq \frac{1}{6} h \sum_{i=1}^{n} [v_{i-1}^2 + v_i^2] \leq (M_h \underline{v}, \underline{v}) \leq \frac{1}{2} h \sum_{i=1}^{n} [v_{i-1}^2 + v_i^2] \leq h \sum_{i=0}^{n} v_i^2$$

Spektraläquivalenzungleichungen

$$\frac{1}{6} h \, (\underline{v}, \underline{v}) \;\leq\; (M_h \underline{v}, \underline{v}) \;\leq\; h \, (\underline{v}, \underline{v}) \quad \text{für alle } \underline{v} \in \mathbb{R}^{n+1}$$

Abschätzung der extremalen Eigenwerte

$$\frac{1}{6} \, h \;\leq\; \lambda_{\min}(M_h), \qquad \lambda_{\max}(M_h) \;\leq\; h$$

Abschätzung der spektralen Konditionszahl

$$\kappa_2(M_h) \;=\; \frac{\lambda_{\max}(M_h)}{\lambda_{\min}(M_h)} \;\leq\; \frac{h}{h/6} \;=\; 6$$

Konvergenzabschätzung des Verfahrens konjugierter Gradienten (relativ)

$$\frac{\|\underline{e}^k\|_A}{\|\underline{e}^0\|_A} \leq \frac{2q^k}{1+q^{2k}} \;\leq\; 2q^{-k} = 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa_2(M_h)} - 1}{\sqrt{\kappa_2(M_h)} + 1} \right)^k = 2 \left(\frac{\sqrt{6} - 1}{\sqrt{6} + 1} \right)^k$$

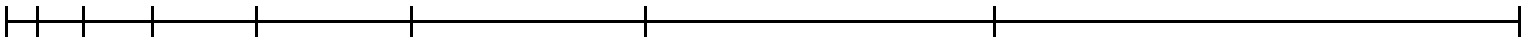
Konvergenzabschätzung

$$\frac{\|\underline{e}^k\|_A}{\|\underline{e}^0\|_A} \leq 2 \cdot 0.42^k \leq \varepsilon = 10^{-8}$$

- zum Erreichen der relativen Genauigkeit $\varepsilon = 10^{-8}$ sind 23 Iterationen ausreichend
- dies gilt unabhängig von der Dimension n
- analoge Ergebnisse gelten auch für höhere Raumdimensionen

Beispiel: Projektionsverfahren (adaptive Unterteilung)

$n = 8, q = 1.5$



$$h_{i+1} = q h_i = q^i h_1, \qquad \sum_{i=1}^{n} h_i \;=\; h_1 \sum_{i=0}^{n-1} q^i \;=\; h_1 \frac{q^n - 1}{q - 1} \;=\; 1 \Rightarrow h_1$$

Analog zum Fall einer gleichmässigen Unterteilung ergibt sich

$$\frac{1}{6} \sum_{i=1}^{n} h_i [v_{i-1}^2 + v_i^2] \le (M_h \underline{v}, \underline{v}) \le \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} h_i [v_{i-1}^2 + v_i^2]$$

und in der Folge

$$\frac{1}{6} \min_{i=1,\ldots,n} h_i \sum_{i=0}^{n} v_i^2 \le (M_h \underline{u}, \underline{u}) \le \max_{i=1,\ldots,n} h_i \sum_{i=0}^{n} v_i^2$$

Spektraläquivalenzungleichungen

$$\frac{1}{6} \min_{i=1,\ldots,n} h_i \, (\underline{v}, \underline{v}) \leq (M_h \underline{v}, \underline{v}) \leq \max_{i=1,\ldots,n} h_i \, (\underline{v}, \underline{v}) \quad \text{für alle } \underline{v} \in \mathbb{R}^{n+1}$$

Abschätzung der extremalen Eigenwerte

$$\frac{1}{6} h_1 = \frac{1}{6} \min_{i=1,\ldots,n} h_i \leq \lambda_{\min}(M_h), \qquad \lambda_{\max}(M_h) \leq \max_{i=1,\ldots,n} h_i = q^{n-1} h_1$$

Abschätzung der spektralen Konditionszahl

$$\kappa_2(M_h) \leq 6 \, \frac{\max\limits_{i=1,\ldots,n} h_i}{\min\limits_{i=1,\ldots,n} h_i} = 6 q^{n-1}$$

Verdoppelung der Freiheitsgrade ($n \to 2n$)

$$\kappa_2(M_{h/2}) \approx q^n \kappa_2(M_h)$$

Verbesserung des Konvergenzverhaltens: Vorkonditionierung

Lineares Gleichungssystem

$$A\underline{x} = \underline{f} \quad (A \text{ symmetrisch und positiv definit})$$

Transformiertes lineares Gleichungssystem

$$B^{-1}A\underline{x} \;=\; B^{-1}\underline{f} \quad (B \text{ symmetrisch und positiv definit})$$

Nachteil: transformierte Matrix $B^{-1}A$ nicht symmetrisch

Faktorisierung

$$B = B^{1/2}B^{1/2}, \quad B^{-1/2} = (B^{1/2})^{-1} \quad (B^{1/2} \text{ symmetrisch und positiv definit})$$

Transformiertes lineares Gleichungssystem

$$B^{-1/2}AB^{-1/2}B^{1/2}\underline{x} \;=\; B^{-1/2}\underline{f}$$

$$\widetilde{A}\underline{\widetilde{x}} = \underline{\widetilde{f}}$$

$\widetilde{A}$ symmetrisch und positiv definit $\rightarrow$ Anwendung CG Verfahren

Initialisierung

$$\widetilde{\underline{r}}^0 = \widetilde{A}\widetilde{\underline{x}}^0 - \widetilde{\underline{f}}, \quad \widetilde{\underline{p}}^0 = \widetilde{\underline{r}}^0, \quad \widetilde{\varrho}_0 = (\widetilde{\underline{r}}^0, \widetilde{\underline{r}}^0)$$

Transformationen

$$\widetilde{A} = B^{-1/2}AB^{-1/2}, \quad \widetilde{\underline{x}} = B^{1/2}\underline{x}, \quad \widetilde{\underline{f}} = B^{-1/2}\underline{f}, \quad \widetilde{\underline{p}} = B^{1/2}\underline{p}$$

Residuum

$$\widetilde{\underline{r}}^0 = \widetilde{A}\widetilde{\underline{x}}^0 - \widetilde{\underline{f}} = B^{-1/2}[A\underline{x}^0 - \underline{f}] = B^{-1/2}\underline{r}^0, \quad \underline{r}^0 = A\underline{x}^0 - \underline{f}$$

Norm

$$\widetilde{\varrho}_0 = (\widetilde{\underline{r}}^0, \widetilde{\underline{r}}^0) = (B^{-1/2}\underline{r}^0, B^{-1/2}\underline{r}^0) = (B^{-1}\underline{r}^0, \underline{r}^0) = (\underline{v}^0, \underline{r}^0), \quad \underline{v}^0 = B^{-1}\underline{r}^0$$

Suchrichtung

$$\begin{aligned}
\widetilde{\underline{p}}^{k+1} &= \widetilde{\underline{r}}^{k+1} + \widetilde{\beta}_k \widetilde{\underline{p}}^k \\
B^{1/2}\underline{p}^{k+1} &= B^{-1/2}\underline{r}^{k+1} + \widetilde{\beta}_k B^{1/2}\underline{p}^k \\
\underline{p}^{k+1} &= B^{-1}\underline{r}^{k+1} + \widetilde{\beta}_k \underline{p}^k = \underline{v}^{k+1} + \widetilde{\beta}_k \underline{p}^k, \quad \underline{v}^{k+1} = B^{-1}\underline{r}^{k+1}
\end{aligned}$$

Vorkonditioniertes Verfahren konjugierter Gradienten

Für eine beliebig gegebene Startnäherung $\underline{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ sei $\underline{r}^0 = A\underline{x}^0 - \underline{f}$. Berechne $\underline{v}^0 = B^{-1}\underline{r}^0$, $\underline{p}^0 := \underline{v}^0$, $\varrho_0 = (\underline{v}^0, \underline{r}^0)$. Stoppe, falls $\varrho_0 < \varepsilon^2$ mit einer vorgegebenen Fehlergenauigkeit ε erreicht ist.

Berechne für $k = 0, 1, \ldots, n-2$:

$$\underline{s}^k = A\underline{p}^k, \; \sigma_k = (\underline{s}^k, \underline{p}^k), \; \alpha_k = \frac{\varrho_k}{\sigma_k}$$

$$\underline{x}^{k+1} := \underline{x}^k - \alpha_k \underline{p}^k$$

$$\underline{r}^{k+1} := \underline{r}^k - \alpha_k \underline{s}^k$$

$$\underline{v}^{k+1} = B^{-1}\underline{r}^{k+1}$$

$$\varrho_{k+1} := (\underline{v}^{k+1}, \underline{r}^{k+1})$$

Stoppe, falls $\varrho_{k+1} < \varepsilon^2 \varrho_0$ mit einer vorgegebenen Fehlergenauigkeit ε erreicht ist. Berechne andernfalls die neue Suchrichtung

$$\underline{p}^{k+1} := \underline{v}^{k+1} + \beta_k \underline{p}^k, \; \beta_k := \frac{\varrho_{k+1}}{\varrho_k}$$

Satz

$$\|\underline{\widetilde{x}}^k - \underline{\widetilde{x}}\|_{\widetilde{A}} \le \frac{2q^k}{1+q^{2k}} \|\underline{\widetilde{x}}^0 - \underline{\widetilde{x}}\|_{\widetilde{A}}$$

mit

$$q = \frac{\sqrt{\kappa_2(\widetilde{A})}+1}{\sqrt{\kappa_2(\widetilde{A})}-1}, \quad \kappa_2(\widetilde{A}) = \frac{\lambda_{\max}(\widetilde{A})}{\lambda_{\min}(\widetilde{A})} \le \frac{c_2^{\widetilde{A}}}{c_1^{\widetilde{A}}}$$

mit

$$c_1^{\widetilde{A}}\,(\underline{\widetilde{u}},\underline{\widetilde{u}}) \le (\widetilde{A}\underline{\widetilde{u}},\underline{\widetilde{u}}) \le c_2^{\widetilde{A}}\,(\underline{\widetilde{u}},\underline{\widetilde{u}}) \quad \text{für alle } \underline{\widetilde{u}} \in \mathbb{R}^n$$

Rücktransformation

$$\widetilde{A} = B^{-1/2}AB^{-1/2}, \qquad \underline{\widetilde{u}} = B^{1/2}\underline{u}$$

$$c_1^{\widetilde{A}}\,(B\underline{u},\underline{u}) \le (A\underline{u},\underline{u}) \le c_2^{\widetilde{A}}\,(B\underline{u},\underline{u}) \quad \text{für alle } \underline{u} \in \mathbb{R}^n$$

Definition: Seien $A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrische und positiv definite Matrizen. B heißt Vorkonditionierung zu A, falls

- Spektraläquivalenzungleichungen

$$c_1^{\widetilde{A}}\,(B\underline{u},\underline{u}) \le (A\underline{u},\underline{u}) \le c_2^{\widetilde{A}}\,(B\underline{u},\underline{u}) \quad \text{für alle } \underline{u} \in \mathbb{R}^n$$

  mit

$$\frac{c_2^{\widetilde{A}}}{c_1^{\widetilde{A}}} = \text{constant} \qquad (\text{unabhängig von } n)$$

- effiziente Anwendung von $\underline{v} = B^{-1}\underline{r}$

Beispiel: Projektionsverfahren (adaptive Unterteilung)

$$\frac{1}{6}\sum_{i=1}^{n} h_i[v_{i-1}^2 + v_i^2] \le (M_h\underline{v},\underline{v}) \le \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} h_i[v_{i-1}^2 + v_i^2]$$

Durch

$$\sum_{i=1}^{n} h_i[v_{i-1}^2 + v_i^2] = h_1 v_0^2 + \sum_{i=1}^{n-1}(h_i + h_{i+1})v_i^2 + h_n v_n^2 = (D_h\underline{v},\underline{v})$$

wird Diagonalmatrix definiert:

$$D_h = \operatorname{diag}(h_1, h_1 + h_2, \ldots, h_{n-1} + h_n, h_n)$$

Spektraläquivalenzungleichungen

$$\frac{1}{6}(D_h\underline{v},\underline{v}) \le (M_h\underline{v},\underline{v}) \le \frac{1}{2}(D_h\underline{v},\underline{v}), \qquad \kappa_2(\widetilde{M}_h) \le 3$$

Beispiel: Poisson Gleichung ($d = 1$)

$$K_h \;=\; \frac{1}{h}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$$

Eigenwerte

$$\lambda_k(K_h) = \frac{4}{h}\sin^2\frac{k\pi}{2n}$$

Extremale Eigenwerte

$$\lambda_{\max} = \lambda_n = \frac{4}{h}\sin^2\frac{\pi}{2} = \frac{4}{h}, \quad \lambda_{\min} = \lambda_1 = \frac{4}{h}\sin^2\frac{\pi}{2n} \approx \frac{4}{h}\frac{\pi^2}{4n^2} = \pi^2 h$$

Spektrale Konditionszahl

$$\kappa_2(K_h) \le \frac{\lambda_{\max}(K_h)}{\lambda_{\min}(K_h)} \approx \frac{4/h}{\pi^2 h} = \frac{4}{\pi^2}\frac{1}{h^2} = \frac{4}{\pi^2}\,n^2$$

Wahl der Vorkonditionierung

- widerspiegelt partielle Differentialgleichung
- effiziente Realisierung von $\underline{v} = B^{-1}\underline{r}$
- Nachweis der Spektraläquivalenzungleichungen
  - unabhängig von Diskretisierung
  - problemabhängigen Parametern (Geometrie, Materialparameter)
- mögliche Vorkonditionierungen
  - Diagonalvorkonditionierung $\rightarrow$ adaptive Netze
  - algebraische Methoden (ILU)
  - strukurierte Matrizen (zirkulant, FFT)
  - basierend auf physikalischer Problemstellung
  - Mehrgitterverfahren (geometrisch, algebraisch)
  - Hierarchische Matrizen
  - ...