Nichtsymmetrische Gleichungssysteme
Das GMRES Verfahren

Lineares Gleichungssystem

$$A\underline{x} = \underline{f}, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad \text{regulär}$$

Krylov Raum

$$S_k(A, \underline{r}^0) = \text{span}\{\underline{r}^0, A\underline{r}^0, \ldots, A^k\underline{r}^0\}$$

Orthonormale Basis

$$S_k(A, \underline{r}^0) = \text{span}\{\underline{v}^0, \ldots, \underline{v}^k\}, \quad (\underline{v}^\ell, \underline{v}^j)_2 = \begin{cases} 1 & \text{für } \ell = j, \\ 0 & \text{für } \ell \neq j \end{cases}$$

Methode von Arnoldi

Sei mit $\underline{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ eine beliebige Startnäherung gegeben.
Berechne $\underline{r}^0 := A\underline{x}^0 - \underline{f}$ und setze

$$\underline{v}^0 = \frac{\underline{r}^0}{\|\underline{r}^0\|_2}.$$

Berechne für $k = 0, 1, \ldots, n-2$:

$$\hat{\underline{v}}^{k+1} = A\underline{v}^k - \sum_{\ell=0}^{k} \beta_{k\ell}\underline{v}^\ell$$

mit

$$\beta_{k\ell} = (A\underline{v}^k, \underline{v}^\ell).$$

Abbruch für $\|\hat{\underline{v}}^{k+1}\|_2 = 0$, setze andernfalls

$$\underline{v}^{k+1} = \frac{\hat{\underline{v}}^{k+1}}{\|\hat{\underline{v}}^{k+1}\|_2}.$$

Ansatz für Näherungslösung

$$\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^0 - \sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell \underline{v}^\ell$$

Residuum

$$\underline{r}^{k+1} \, = \, A\underline{x}^{k+1} - \underline{f} \, = \, \underline{r}^0 - \sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell A \underline{v}^\ell, \quad \underline{r}^0 = A\underline{x}^0 - \underline{f}$$

Minimierungsaufgabe

$$\|\underline{r}^{k+1}\|_2 \, = \, \|\underline{r}^0 - \sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell A \underline{v}^\ell\|_2 \to \min_{\alpha_0,\ldots,\alpha_k}$$

Methode von Arnoldi

$$A\underline{v}^\ell = \underline{\hat{v}}^{\ell+1} + \sum_{j=0}^{\ell} \beta_{\ell,j}\underline{v}^j = \|\underline{\hat{v}}^{\ell+1}\|_2 \underline{v}^{\ell+1} + \sum_{j=0}^{\ell} \beta_{\ell,j}\underline{v}^j = \sum_{j=0}^{\ell+1} \beta_{\ell,j}\underline{v}^j$$

mit

$$\beta_{\ell,j} = \begin{cases} (A\underline{v}^\ell, \underline{v}^j) & \text{für } j = 0, \ldots, \ell, \\ \|\underline{\hat{v}}^{\ell+1}\|_2 & \text{für } j = \ell + 1. \end{cases}$$

Dann ist

$$\underline{r}^{k+1} = \underline{r}^0 - \sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell A\underline{v}^\ell = \underline{r}^0 - \sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell \sum_{j=0}^{\ell+1} \beta_{\ell,j}\underline{v}^j = \underline{r}^0 - V_{k+1} H_k \underline{\alpha}$$

mit der durch die orthonormalen Vektoren $\underline{v}^j$ gebildeten Matrix

$$V_{k+1} = \left(\underline{v}^0, \underline{v}^1, \ldots, \underline{v}^{k+1}\right) \in \mathbb{R}^{n\times(k+2)}$$

Obere Hessenbergmatrix

$$H_k[j, \ell] = \begin{cases} \beta_{\ell,j} & \text{für } j \leq \ell + 1, \\ 0 & \text{für } j > \ell + 1 \end{cases}$$

Mit

$$\underline{r}^0 = \|\underline{r}^0\|_2 \underline{v}^0 = \|\underline{r}^0\|_2 \, V_{k+1}\underline{e}^0$$

folgt

$$\|\underline{r}^{k+1}\|_2 = \|\underline{r}^0 - V_{k+1}H_k\underline{\alpha}\|_2 = \|V_{k+1}\left(\|\underline{r}^0\|_2\underline{e}^0 - H_k\underline{\alpha}\right)\|_2 = \|\|\underline{r}^0\|_2\underline{e}^0 - H_k\underline{\alpha}\|_2$$

Orthogonale Matrix $Q_k \in \mathbb{R}^{(k+2)\times(k+2)}$:

$$Q_k H_k = R_k \in \mathbb{R}^{(k+2)\times(k+1)} \quad \text{obere Dreiecksgestalt}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}
\|\underline{r}^{k+1}\|_2^2 &= \|\|\underline{r}^0\|_2\underline{e}^0 - H_k\underline{\alpha}\|_2^2 = \|\|\underline{r}^0\|_2 Q_k\underline{e}^0 - Q_k H_k\underline{\alpha}\|_2^2 \\
&= \|\|\underline{r}^0\|_2 Q_k\underline{e}^0 - R_k\underline{\alpha}\|_2^2 = \sum_{\ell=0}^{k+1}(\|\underline{r}^0\|_2 Q_k\underline{e}^0 - R_k\underline{\alpha})_\ell^2 \\
&= \sum_{\ell=0}^{k}(\|\underline{r}^0\|_2 Q_k\underline{e}^0 - R_k\underline{\alpha})_\ell^2 + (\|\underline{r}^0\|_2 Q_k\underline{e}^0)_{k+1}^2
\end{aligned}$$

Minimales Residuum

$$\|\underline{r}^{k+1}\|_2^2 = \|\underline{r}^0\|_2^2 \, |(Q_k \underline{e}^0)_{k+1}|^2,$$

falls

$$(R_k \underline{\alpha})_\ell \; = \; \|\underline{r}^0\|_2 \, (Q_k \underline{e}^0)_\ell \quad \text{für } \ell = 0, \ldots, k$$

Transformation

$$H_k \; = \begin{pmatrix} \beta_{0,0} & \beta_{1,0} & \cdots & \beta_{k,0} \\ \beta_{0,1} & \beta_{1,1} & & \vdots \\ 0 & \beta_{1,2} & \ddots & \vdots \\ & 0 & \ddots & \beta_{k,k} \\ & & & \beta_{k,k+1} \end{pmatrix}, \quad R_k \; = \; Q_k H_k \; = \begin{pmatrix} r_{0,0} & r_{0,1} & \cdots & r_{0,k} \\ 0 & r_{1,1} & & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & r_{k,k} \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

Transformation $\widetilde{G}_j \in \mathbb{R}^{2\times 2}$

$$\widetilde{G}_j \begin{pmatrix} \beta_{j,j} \\ \beta_{j,j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{\beta}_{j,j} \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit

$$\widetilde{G}_j = \begin{pmatrix} a_j & b_j \\ -b_j & a_j \end{pmatrix}, \quad a_j^2 + b_j^2 = 1, \quad - b_j\beta_{j,j} + a_j\beta_{j,j+1} = 0$$

Koeffizienten

$$a_j = \frac{\beta_{j,j}}{\sqrt{\beta_{j,j}^2 + \beta_{j,j+1}^2}}, \quad b_j = \frac{\beta_{j,j+1}}{\sqrt{\beta_{j,j}^2 + \beta_{j,j+1}^2}}$$

sowie

$$\widetilde{\beta}_{j,j} = a_j\beta_{j,j} + b_j\beta_{j,j+1} = \sqrt{\beta_{j,j}^2 + \beta_{j,j+1}^2} > 0$$

Givens Rotation

$$G_j = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & a_j & b_j & & & \\ & & & -b_j & a_j & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(k+2)\times(k+2)}$$

rekursive Anwendung

$$G_k G_{k-1} \ldots G_2 G_1 G_0 H_k \quad = \quad G_k G_{k-1} \ldots G_2 G_1 G_0 \begin{pmatrix} \beta_{0,0} & \beta_{1,0} & \cdots & \beta_{k,0} \\ \beta_{0,1} & \beta_{1,1} & \cdots & \beta_{k,1} \\ 0 & \beta_{1,2} & \ddots & \vdots \\ & 0 & \ddots & \beta_{k,k} \\ & & & \beta_{k,k+1} \end{pmatrix}$$

$$= G_k G_{k-1} \ldots G_2 G_1 \begin{pmatrix} \widetilde{\beta}_{0,0} & \widetilde{\beta}_{1,0} & \cdots & \widetilde{\beta}_{k,0} \\ 0 & \bar{\beta}_{1,1} & \cdots & \bar{\beta}_{k,1} \\ & \beta_{1,2} & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \beta_{k,k} \\ & & & \beta_{k,k+1} \end{pmatrix}$$

$$= G_k G_{k-1} \ldots G_2 \begin{pmatrix} \widetilde{\beta}_{0,0} & \widetilde{\beta}_{1,0} & \cdots & \widetilde{\beta}_{k,0} \\ 0 & \widetilde{\beta}_{1,1} & \cdots & \widetilde{\beta}_{k,1} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \beta_{k,k} \\ & & & \beta_{k,k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{\beta}_{0,0} & \widetilde{\beta}_{1,0} & \cdots & \widetilde{\beta}_{k,0} \\ 0 & \widetilde{\beta}_{1,1} & \cdots & \widetilde{\beta}_{k,1} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \widetilde{\beta}_{k,k} \\ & & & 0 \end{pmatrix} = R_k$$

Transformation der rechten Seite

$$Q_k \underline{e}^0 = G_k \dots G_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = G_k \dots G_1 \begin{pmatrix} a_0 \\ -b_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = G_k \dots G_2 \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1(-b_0) \\ (-b_0)(-b_1) \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1(-b_0) \\ a_2(-b_0)(-b_1) \\ \vdots \\ a_k(-b_0)\cdots(-b_{k-1}) \\ (-b_0)\cdots(-b_k) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k+2}$$

Definition

$$p_{k+1} = (-b_0)\cdots(-b_k) = -b_k\, p_k .$$

Residuum

$$\varrho_{k+1} = \|\underline{r}^0\|_2 \, |(Q_k \underline{e}^0)_{k+1}| = \|\underline{r}^0\|_2 \prod_{j=0}^{k} b_j \, .$$

Residuum

$$\varrho_{k+1} \;=\; \|\underline{r}^0\|_2 \, |(Q_k \underline{e}^0)_{k+1}| \;=\; \|\underline{r}^0\|_2 \prod_{j=0}^{k} b_j \,.$$

Für $(A\underline{v}^j, \underline{v}^j) \neq 0$ folgt

$$b_j \;=\; \frac{\beta_{j,j+1}}{\sqrt{\beta_{j,j+1}^2 + \beta_{j,j}^2}} \;=\; \frac{\|\hat{\underline{v}}^j\|_2}{\sqrt{\|\hat{\underline{v}}^j\|_2^2 + (A\underline{v}^j, \underline{v}^j)^2}} < 1$$

- monotone Fehlerreduktion
- Für

  $$\beta_{k,k+1} = \|\hat{\underline{v}}^k\|_2 = 0$$

  ist

  $$b_k = 0, \quad \varrho_{k+1} = \|\underline{r}^{k+1}\|_2 = 0, \quad \underline{x}^{k+1} = \underline{x}$$

- Abbruch der Methode von Arnoldi ergibt exakte Lösung

Für eine beliebig gegebene Startnäherung $\underline{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ sei $\underline{r}^0 = A\underline{x}^0 - \underline{f}$.
Berechne $\varrho_0 = \|\underline{r}^0\|_2$. Stoppe, falls $\varrho_0 < \varepsilon$ mit einer vorgegebenen Fehlergenauigkeit ε erreicht ist. Setze andernfalls $\underline{v}^0 = \dfrac{1}{\varrho_0}\underline{r}^0$, $p_0 = \varrho_0$.

Berechne für $k = 0, 1, \ldots, n-2$

$$\underline{w}^k = A\underline{v}^k, \quad \underline{\widetilde{v}}^{k+1} = \underline{w}^k - \sum_{\ell=0}^{k} \beta_{k\ell}\underline{v}^\ell, \quad \beta_{k\ell} = (\underline{w}^k, \underline{v}^\ell), \quad \beta_{kk+1} = \|\underline{\widetilde{v}}^{k+1}\|_2.$$

Falls $\beta_{kk+1} = 0$, stoppe und berechne Näherungslösung $\underline{x}^{k+1}$.

$$\underline{v}^{k+1} = \frac{1}{\beta_{kk+1}}\underline{\widetilde{v}}^{k+1}$$

Berechne für $\ell = 0, \ldots, k-1$:

$$\widetilde{\beta}_{k\ell} = a_\ell\beta_{k\ell} + b_\ell\beta_{k\ell+1}, \quad \widetilde{\beta}_{k\ell+1} = -b_\ell\beta_{k\ell} + a_\ell\beta_{k\ell+1}$$

$$a_k = \frac{\beta_{kk}}{\sqrt{\beta_{kk}^2 + \beta_{kk+1}^2}}, \quad b_k = \frac{\beta_{kk+1}}{\sqrt{\beta_{kk}^2 + \beta_{kk+1}^2}}, \quad \widetilde{\beta}_{kk} = \sqrt{\beta_{kk}^2 + \beta_{kk+1}^2}$$

$$p_{k+1} = -b_k p_k, \quad p_k = a_k p_k, \quad \varrho_{k+1} = |p_{k+1}|$$

Stoppe, falls $\varrho_{k+1} < \varepsilon\varrho_0$ mit einer vorgegebenen Fehlergenauigkeit ε erreicht ist und berechne die Näherungslösung:

Berechne für $\ell = k, k-1, \ldots, 0$

$$\alpha_\ell = \frac{1}{\beta_{\ell\ell}}\left[p_\ell - \sum_{j=\ell+1}^{k}\beta_{\ell j}\alpha_j\right] \quad \text{sowie} \quad \underline{x}^{k+1} = \underline{x}^0 - \sum_{\ell=0}^{k}\alpha_\ell\underline{v}^\ell .$$

Verfahren des verallgemeinerten minimalen Residuums

- GMRES [Saad, Schultz 1986]
- Abbruch der Methode von Arnoldi ergibt exakte Lösung
- Robustheit
- vorkonditioniertes GMRES Verfahren
- Speicherung aller vorherigen Suchrichtungen
- wachsender Speicherbedarf
- GMRES mit Restart: GMRES(k)