CG-Verfahren (Conjugate gradient method)

Seien $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine **symmetrische** und **positiv definite** Matrix und $\underline{f} \in \mathbb{R}^n$ eine gegebene rechte Seite des linearen Gleichungssystems

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

Algorithm 1 CG-Verfahren berechnet Näherungslösung $\underline{x}^{\mathrm{CG}} \in \mathbb{R}^n$ für eine gegebene Startnäherung $\underline{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ und eine gegebene Fehlergenauigkeit $\varepsilon > 0$.

1: Setze $\underline{p}^0 := \underline{r}^0 := \underline{f} - A\underline{x}^0$ und $\rho_0 := (\underline{r}^0, \underline{r}^0)$.

2: Überprüfe, ob Startnäherung bereits gut genug ist:

  if $\rho_0 < \varepsilon^2$ **then**
    Setze $\underline{x}^{\mathrm{CG}} := \underline{x}^0$ und stoppe.
  end if

3: Berechne:

  for $k = 0, \ldots, n-1$ **do**
    $\underline{s}^k := A\underline{p}^k$
    $\sigma_k := (\underline{s}^k, \underline{p}^k)$
    $\alpha_k := \frac{\rho_k}{\sigma_k}$
    $\underline{x}^{k+1} := \underline{x}^k + \alpha_k \underline{p}^k$
    $\underline{r}^{k+1} := \underline{r}^k - \alpha_k \underline{s}^k$
    $\rho_{k+1} := (\underline{r}^{k+1}, \underline{r}^{k+1})$
    if $\rho_{k+1} < \varepsilon^2 \rho_0$ **then**
      Setze $\underline{x}^{\mathrm{CG}} := \underline{x}^{k+1}$ und stoppe.
    else
      $\underline{p}^{k+1} := \underline{r}^{k+1} + \frac{\rho_{k+1}}{\rho_k} \underline{p}^k$
    end if
  end for

Konvergenz: Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch und positiv definit. Dann gilt

$$\left\| \underline{x}^k - \underline{x} \right\|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa_2(A)} - 1}{\sqrt{\kappa_2(A)} + 1} \right)^k \left\| \underline{x}^0 - \underline{x} \right\|_A,$$

wobei $\underline{x}^k$ die Näherungslösung des CG-Verfahrens nach k Iterationen ist.

GMRES-Verfahren (Generalized minimal residual method)

Seien $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine **reguläre** Matrix und $\underline{f} \in \mathbb{R}^n$ eine gegebene rechte Seite des linearen Gleichungssystems

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

Algorithm 2 GMRES-Verfahren berechnet Näherungslösung $\underline{x}^{\mathrm{GMRES}} \in \mathbb{R}^n$ für eine gegebene Startnäherung $\underline{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ und eine gegebene Fehlergenauigkeit $\varepsilon > 0$.

1: Berechne $\underline{r}^0 := \underline{f} - A\underline{x}^0$ und $\rho_0 := \|\underline{r}^0\|_2$.
2: Überprüfe, ob Startnäherung bereits gut genug ist:
  if $\rho_0 < \varepsilon$ **then**
    Setze $\underline{x}^{\mathrm{GMRES}} := \underline{x}^0$ und stoppe.
  end if
3: Setze $\underline{v}^1 := \frac{1}{\rho_0}\underline{r}^0$ und $p_1 := \rho_0$.
4: Berechne:
  for $j = 1, \ldots, n$ **do**
    $\underline{w} := A\underline{v}^j$
    for $i = 1, \ldots, j$ **do**
      $\beta_{ij} := (\underline{v}^i, \underline{w})$
    end for
    $\underline{\widetilde{v}}^j := \underline{w} - \sum_{i=1}^{j} \beta_{ij}\underline{v}^i$
    $\beta_{j+1,j} := \|\underline{\widetilde{v}}^j\|_2$
    for $i = 1, \ldots, j-1$ **do**
      $\begin{pmatrix} \beta_{ij} \\ \beta_{i+1,j} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} c_{i+1} & s_{i+1} \\ -s_{i+1} & c_{i+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_{ij} \\ \beta_{i+1,j} \end{pmatrix}$
    end for
    $\beta := \sqrt{\beta_{jj}^2 + \beta_{j+1,j}^2}$
    $s_{j+1} := \frac{\beta_{j+1,j}}{\beta}$
    $c_{j+1} := \frac{\beta_{jj}}{\beta}$
    $\beta_{jj} := \beta$
    $p_{j+1} := -s_{j+1}p_j$
    $p_j := c_{j+1}p_j$
    if $|p_{j+1}| \geq \varepsilon$ **then**
      $\underline{v}^{j+1} := \frac{1}{\beta_{j+1,j}}\underline{\widetilde{v}}^j$
    else
      Berechne:
      for $i = j, \ldots, 1$ **do**
        $y_i := \frac{1}{\beta_{ii}}\left(p_i - \sum_{k=i+1}^{j} \beta_{ik}y_k\right)$
      end for
      $\underline{x}^{\mathrm{GMRES}} := \underline{x}^0 + \sum_{i=1}^{j} y_i\underline{v}^i$ und stoppe. (Erst bei Abbruch wird $\underline{x}^{\mathrm{GMRES}}$ berechnet.)
    end if
  end for

Konvergenz: Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ positiv definit ($\forall \underline{y} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\underline{0}\} : (A\underline{y}, \underline{y}) > 0$). Dann konvergiert das GMRES-Verfahren und es gilt

$$\left\|\underline{r}^k\right\|_2 \leq \left(1 - \frac{\left[\lambda_{\min}\left(\frac{A^\top + A}{2}\right)\right]^2}{\lambda_{\max}(A^\top A)}\right)^{k/2} \left\|\underline{r}^0\right\|_2$$

mit $\underline{r}^k = \underline{f} - A\underline{x}^k$, wobei $\underline{x}^k$ die Näherungslösung des GMRES-Verfahrens nach k Iterationen ist.