Karlsruher Institut für Technologie (KIT) WS2012/13
Institut für Angewandte und Numerische Mathematik 4

Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL)
Prof. Dr. Vincent Heuveline
Dipl.-Math. Leonid Chaichenets

# Finite Elemente Methoden (FEM)

## Lösungsvorschlag für das

## 11. Übungsblatt

**Aufgabe 25:**
Sei $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$ eine symmetrische, positiv definite Matrix und $b \in \mathbb{R}^d$. Ferner sei durch

$$Q(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle - \langle b, x\rangle \qquad (x \in \mathbb{R}^d)$$

eine quadratische Form $Q$ definiert. Dabei bezeichnet $\langle\cdot,\cdot\rangle$ das Euklidische Skalarprodukt in $\mathbb{R}^d$. Schließlich sei $x \in \mathbb{R}^d$. Zeigen Sie die Äquivalenz der folgenden Aussagen:

(i) $Ax = b$

(ii) $Q(x) = \min_{y\in\mathbb{R}^d} Q(y)$

*Lösung:* Sei $x \in \mathbb{R}^d$ mit $Q(x) = \min_{y\in\mathbb{R}^d} Q(y)$. Dann gilt

$$\begin{aligned}
\nabla Q(x) &= \nabla\left[\frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle - \langle b, x\rangle\right] \\
&= \sum_{i=1}^d e_i \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^d x_j a_{jk} x_k - \sum_{j=1}^d x_j b_j\right] \\
&\overset{\text{Kettenregel}}{=} \frac{1}{2}\sum_{i,j,k=1}^d a_{jk}\left[x_k \underbrace{\frac{\partial x_j}{\partial x_i}}_{=\delta ji} + x_j \underbrace{\frac{\partial x_k}{\partial x_i}}_{=\delta ki}\right] e_i - \sum_{i,j=1}^d b_j \underbrace{\frac{\partial x_j}{\partial x_i}}_{=\delta ji} e_i \\
&= \frac{1}{2}\left[\sum_{i,k=1}^d a_{ik} x_k e_i + \sum_{i,j=1}^d a_{ji} x_j e_i\right] - \sum_{j=1} b_i e_i \\
&= \frac{1}{2}\left[A + A^T\right] x - b \overset{A\text{ symmetrisch}}{=} Ax - b = 0,
\end{aligned}$$

da $x$ Extremalstelle von $Q$ ist. Also tatsächlich $Ax = b$.

Sei nun umgekehrt $Ax = b$ und $y \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}$ beliebig. Es gilt:

$$\begin{aligned}
Q(x+y) &= \frac{1}{2}\langle A(x+y),(x+y)\rangle - \langle b, x+y\rangle \\
&= \underbrace{\frac{1}{2}\langle Ax,x\rangle - \langle b,x\rangle}_{=Q(x)} + \frac{1}{2}\left[\langle Ax,y\rangle + \langle Ay,x\rangle\right] - \langle b,y\rangle + \frac{1}{2}\langle Ay,y\rangle \\
&\overset{A \text{ symmetrisch}}{=} Q(x) + \frac{1}{2}\left[\langle Ax,y\rangle + \langle y,Ax\rangle\right] - \langle b,y\rangle + \frac{1}{2}\langle Ay,y\rangle \\
&= Q(x) + \langle Ax-b,y\rangle + \frac{1}{2}\langle Ay,y\rangle \\
&\overset{Ax=b}{=} Q(x) + \underbrace{\langle Ay,y\rangle}_{>0} \\
&> Q(x)
\end{aligned}$$

Also tatsächlich $Q(x) = \min_{y\in\mathbb{R}^d} Q(y)$.
□

**Aufgabe 26:** Punkte
Sei $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$ eine symmetrische, positiv definite Matrix mit den Eigenwerten $0 < \lambda_{\min} = \lambda_1 \leq \ldots \leq \lambda_d = \lambda_{\max}$ und der spektralen Konditionszahl $\kappa = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$. Durch

$$\langle x,y\rangle_A = x^T Ay \quad \text{bzw.} \quad \|x\|_A = \sqrt{\langle x,x\rangle_A} \quad \text{für alle } x,y \in \mathbb{R}^2$$

wird das zu $A$ gehörende *Energie*-Skalarprodukt bzw. Norm definiert.

(a) Zeigen Sie, dass für alle $x, y \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}$ mit $\langle x,y\rangle = 0$ die folgende Ungleichung gilt:

$$\frac{\langle x,y\rangle_A}{\|x\|_A \|y\|_A} \leq \frac{\kappa-1}{\kappa+1} \tag{1}$$

(b) Zeigen Sie (durch Beispiel), dass die Abschätzung (1) scharf ist.

(c) Interpretieren Sie die Ungleichung (1) geometrisch.

(d) Bestimmen Sie die Taylorapproximation erster Ordnung der rechten Seite von (1) in $\kappa$ bei 1 („kleine" Konditionszahl) sowie in $\frac{1}{\kappa}$ bei 0 („große" Konditionszahl).

*Lösung:*

(a) Betrachte die Funktion $f : [1,\infty) \to \mathbb{R}$, die durch

$$f(\kappa) = \frac{\kappa-1}{\kappa+1} \qquad (\forall \kappa \in [1,\infty))$$

definiert ist. Es ist

$$f'(\kappa) = \frac{1}{\kappa+1} - \frac{\kappa-1}{(\kappa+1)^2} = \frac{2}{(\kappa+1)^2} > 0 \qquad (\forall \kappa \in [1,\infty))\,,$$

also ist $f$ streng monoton wachsend auf $[1,\infty)$. Seien nun $x, y \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ mit $\langle x, y\rangle = 0$. Definiere die Indexmengen

$$I = \{i \in \{1,\dots,d\}\,|x_i y_i > 0\} \quad \text{und} \quad J = \{j \in \{1,\dots,d\}\,|x_j y_j \le 0\}\,.$$

Ist $I = \emptyset$, so ist nichts zu zeigen. Ferner gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x, y\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{d} x_i y_i \\ &= \sum_{i\in I} x_i y_i + \sum_{j\in J} x_j y_j \\ &= \sum_{i\in I} |x_i y_i| - \sum_{j\in J} |x_j y_j|\,, \end{aligned}$$

also

$$\sum_{i\in I} |x_i y_i| = \sum_{j\in J} |x_j y_j| > 0. \tag{2}$$

Da $A$ symmetrisch und positiv definit ist, gibt es eine orthonormale Basis von $\mathbb{R}^d$ aus Eigenvektoren von $A$ und ihre Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_d$ sind positiv. Da orthogonale Basiswechsel die linke Seite von (1) nicht ändern, sei o.B.d.A. $e_1, \dots, e_d$ bereits eine orthonormale Basis des $\mathbb{R}^d$.

Ist $\langle x, y\rangle_A < 0$, so ist nichts zu zeigen. Sei also o.B.d.A. $\langle x, y\rangle_A \ge 0$. Es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\langle x, y\rangle_A}{\|x\|_A \|y\|_A} &= \frac{\sum_{i=1}^d x_i y_i \lambda_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2 \lambda_i \sum_{j=1}^d y_j^2 \lambda_j}} \\ &\overset{\text{Cauchy-Schwarz}}{\le} \frac{\sum_{i=1}^d x_i y_i \lambda_i}{\sum_{i=1}^d |x_i y_i| \lambda_i} \\ &= \frac{\sum_{i\in I} |x_i y_i| \lambda_i - \sum_{j\in J} |x_j y_j| \lambda_j}{\sum_{i\in I} |x_i y_i| \lambda_i + \sum_{j\in J} |x_j y_j| \lambda_j} \\ &= \frac{\frac{\sum_{i\in I} |x_i y_i| \lambda_i}{\sum_{j\in J} |x_j y_j| \lambda_j} - 1}{\underbrace{\frac{\sum_{i\in I} |x_i y_i| \lambda_i}{\sum_{j\in J} |x_j y_j| \lambda_j}}_{=:\kappa'} + 1} = f(\kappa') \end{aligned}$$

Wegen

$$\kappa' = \frac{\sum_{i\in I} |x_i y_i| \lambda_i}{\sum_{j\in J} |x_j y_j| \lambda_j} \leq \frac{\lambda_{\max} \sum_{i\in I} |x_i y_i|}{\lambda_{\min} \sum_{j\in J} |x_j y_j|} \stackrel{(2)}{=} \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} = \kappa$$

und der Monotonie von $f$ folgt die Aussage.

(b) Sei $d \geq 2$, $0 < \lambda_{\min} \leq \lambda_{\max}$ und $v_{\min}, v_{\max} \in \mathbb{R}^d$ orthogonale, normierte Eigenvektoren zu $\lambda_{\min}$ bzw. $\lambda_{\max}$. Dann sind die Vektoren

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{\sqrt{2}} (v_{\max} - v_{\min}) \\ y &= \frac{1}{\sqrt{2}} (v_{\max} + v_{\min}) \end{aligned}$$

ebenfalls orthogonal und normiert. Ferner gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\langle x, y\rangle_A}{\|x\|_A \|y\|_A} &= \frac{\langle x, Ay\rangle}{\sqrt{\langle x, Ax\rangle \langle y, Ay\rangle}} \\ &= \frac{\langle v_{\max} - v_{\min}, A(v_{\max} + v_{\min})\rangle}{\sqrt{\langle v_{\max} - v_{\min}, A(v_{\max} - v_{\min})\rangle \langle v_{\max} + v_{\min}, A(v_{\max} + v_{\min})\rangle}} \\ &= \frac{\langle v_{\max} - v_{\min}, \lambda_{\max} v_{\max} + \lambda_{\min} v_{\min}\rangle}{\sqrt{\langle v_{\max} - v_{\min}, \lambda_{\max} v_{\max} - \lambda_{\min} v_{\min}\rangle \langle v_{\max} + v_{\min}, \lambda_{\max} v_{\max} + \lambda_{\min} v_{\min}\rangle}} \\ &\stackrel{\perp}{=} \frac{\lambda_{\max} \|v_{\max}\|^2 - \lambda_{\min} \|v_{\min}\|^2}{\sqrt{\left(\lambda_{\max} \|v_{\max}\|^2 + \lambda_{\min} \|v_{\min}\|^2\right) \left(\lambda_{\max} \|v_{\max}\|^2 + \lambda_{\min} \|v_{\min}\|^2\right)}} \\ &= \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}} = \frac{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} - 1}{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} + 1} \\ &= \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1} \end{aligned}$$

(c) Die linke Seite der Ungleichung (1) ist der Cosinus des Winkels bezüglich des Energieskalarproduktes, der von den Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^d$ eingeschlossen wird.

Die Ungleichung besagt also, dass bei großen spektralen Konditionszahlen, Vektoren, die bezüglich des Euklidischen Skalarproduktes orthogonal sind, es bezüglich des Energieskalarproduktes nicht mal annähernd sein müssen.

(d) Definiere durch

$$g(\nu) = \begin{cases} f\left(\frac{1}{\nu}\right) = \frac{\frac{1}{\nu} - 1}{\frac{1}{\nu} + 1} = \frac{1-\nu}{1+\nu} & \text{für } \nu \neq 0 \\ 1 & \text{für } \nu = 0 \end{cases}$$

für $\nu \in [0,1]$ die Funktion $g : [0,1] \to \mathbb{R}$. Offenbar ist $g$ differenzierbar und es gilt:

$$\begin{aligned} g(0) &= 1 \\ g'(0) &= \left.\left(\frac{-1}{(1+\nu)^2} - \frac{1}{1+\nu}\right)\right|_{\nu=0} = -2 \end{aligned}$$

Die Taylorapproximation erster Ordnung von $f$ in $\frac{1}{\kappa}$ bei 0 lautet also

$$f(\kappa) \approx 1 - \frac{2}{\kappa} \qquad \text{für } \kappa \gg 1.$$

Die Taylorapproximation erster Ordnung von $f$ in $\kappa$ bei 1 lautet dann

$$f(\kappa) \approx \frac{\kappa}{2} \qquad \text{für } \kappa \approx 1.$$

**Aufgabe 27:**
Sei $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$ eine symmetrische, positiv definite Matrix und $b \in \mathbb{R}^d$. Das allgemeine *Abstiegsverfahren* zur iterativen Lösung des Gleichungssystems $Ax = b$ lautet:

(i) Wähle einen *Startwert* $x^{(0)} \in \mathbb{R}^d$ und berechne das *Residuum* $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$.

(ii) Für $k \in \mathbb{N}_0$ wähle eine *Abstiegsrichtung* $d^{(k)}$, berechne die *Schrittweite*

$$\alpha_k = \frac{\left\langle r^{(k)}, d^{(k)}\right\rangle}{\left\langle Ad^{(k)}, d^{(k)}\right\rangle},$$

aktualisiere die Lösungsapproximation sowie das Residuum

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)} \qquad r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d^{(k)}.$$

(iii) Breche die Schleife (ii) ab, sobald das Residuum hinreichend klein ist, also $\left\|r^{(k)}\right\| < \varepsilon$.

Die s.g. *Koordinatenrelaxation* erhält man durch zyklische Wahl der Abstiegsrichtungen $d^{(k)}$ aus den kartesischen Einheitsvektoren $\{e_1, \dots, e_d\}$. Zeigen Sie, dass jeder $d$-Zyklus der Koordinatenrelaxation äquivalent ist zum üblichen *Gauß-Seidel-Verfahren*.

*Lösung:*
Das Gauß-Seidel-Verfahren ist durch die folgende Iteration definiert:

(i) Wähle einen Startwert $y^{(0)} \in \mathbb{R}^d$.

(ii) Für $k \in \mathbb{N}$ aktualisiere die Lösungsapproximation gemäß

$$y_i^{(k)} = \frac{b_k - \sum_{j<i} a_{ij} y_j^{(k)} - \sum_{j>i} a_{ij} y_j^{(k-1)}}{a_{kk}} \qquad i \in \{1, \ldots d\}\,.$$

(Beachte, dass die obige Formel keine mathematische Gleichung, sondern *Pseudocode* ist. D.h. die Werte $y_i^{(k)}$ werden *überschrieben*.)

(iii) Breche die Schleife (ii) ab, sobald das Abbruchskriterium erreicht ist (z.B. die Norm des Residuums hinreichend klein ist, die maximale Anzahl der Iterationen erreicht wurde, …).

Wir zeigen induktiv die folgende Aussage: Falls die Koordinatenrelaxation und das Gauß-Seidel-Verfahren mit dem gleichen Startwert $x^{(0)} \in \mathbb{R}^d$ beginnen, so gilt für die $k$-te Lösungsapproximation $x^{(k)}$ der Koordinatenrelaxation und die 1-te Lösungsapproximation $y^{(1)}$ des Gauß-Seidel-Verfahrens:

$$x_i^{(k)} = y_i^{(1)} \qquad (k \in \{1, \ldots, d\}\,, i \in \{1, \ldots, k\})$$

Insbesondere ist $x^{(d)} = y^{(1)}$.

(i) Induktionsanfang ($k = 1$):

$$\begin{aligned}
x_1^{(1)} &= \left(x^{(0)} + \alpha_0 e_1\right)_1 \\
&= x_1^{(0)} + \frac{\langle r^{(0)}, e_1 \rangle}{\langle A e_1, e_1 \rangle} \\
&= x_1^{(0)} + \frac{r_1^{(0)}}{a_{11}} \\
&= x_1^{(0)} + \frac{b_1 - \left(A x^{(0)}\right)_1}{a_{11}} \\
&= x_1^{(0)} + \frac{b_1 - \sum_{j=1}^d a_{1j} x_j^{(0)}}{a_{11}} \\
&= \frac{b_1 - \sum_{j>1} a_{1j} x_j^{(0)}}{a_{11}} \\
&= y_1^{(1)}
\end{aligned}$$

(ii) Induktionsschritt ($k \curvearrowright k+1$): Da die Koordinatenrelaxation im $k+1$-ten Schritt nur die $k+1$-te Komponente verändert (siehe Definition), reicht es aus, die $k+1$-te Komponente von $x^{(k+1)}$ zu betrachten.

$$
\begin{aligned}
x_{k+1}^{(k+1)} &= \left(x^{(k)} + \alpha_k e_{k+1}\right)_{k+1} \\
&= x_{k+1}^{(k)} + \frac{\left\langle r^{(k)}, e_{k+1}\right\rangle}{\langle Ae_{k+1}, e_{k+1}\rangle} \\
&= x_{k+1}^{(k)} + \frac{r_{k+1}^{(k)}}{a_{(k+1)(k+1)}} \\
&= x_{k+1}^{(k)} + \frac{b_{k+1} - \left(Ax^{(k)}\right)_{k+1}}{a_{(k+1)(k+1)}} \\
&= x_{k+1}^{(k)} + \frac{b_{k+1} - \sum_{j=1}^{d} a_{(k+1)j} x_j^{(k)}}{a_{(k+1)(k+1)}} \\
&= \frac{b_{k+1} - \sum_{j>k+1} a_{(k+1)j} x_j^{(k)} - \sum_{j<k+1} a_{(k+1)j} x_j^{(k)}}{a_{(k+1)(k+1)}} \\
&\overset{\text{I.H.}}{=} \frac{b_{k+1} - \sum_{j>k+1} a_{(k+1)j} x_j^{(k)} - \sum_{j<k+1} a_{(k+1)j} y_j^{(1)}}{a_{(k+1)(k+1)}} \\
&\overset{\text{Beobachtung}}{=} \frac{b_{k+1} - \sum_{j>k+1} a_{(k+1)j} x_j^{(0)} - \sum_{j<k+1} a_{(k+1)j} y_j^{(1)}}{a_{(k+1)(k+1)}} \\
&= y_{k+1}^{(1)}
\end{aligned}
$$

□

http://numhpc.math.kit.edu/1375.php