Das Verfahren der konjugierten Gradienten

Michael Bauer

11. November 2013

Inhaltsverzeichnis

Das Verfahren der konjugierten Gradienten

1.1 Motivation

Löse ein Gleichungssystem $Ax = b$, wobei $A \in \mathbb{R}^n$ s.p.d., $x, b \in \mathbb{R}^n$ und n sehr groß.

1.1.1 Bemerkung:

- Es definiert $\langle x, y \rangle_A = x^T A y$ ein Skalarprodukt auf dem $\mathbb{R}^n$ für A s.p.d.
- Wir nennen $\|x\|_A := \sqrt{\langle x, x \rangle_A}$ die Energie-Norm.

1.2 Definition (A-orthogonal)

Sei A eine symmetrische, nicht singuläre Matrix. Zwei Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^n$ heißen **konjugiert** oder **A-orthogonal**, wenn $x^T A y = 0$ ist.

1.3 Satz

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ s.p.d. und

$$f(x) := \frac{1}{2} x^T A x - b^T x, \tag{1}$$

wobei $b, x \in \mathbb{R}^n$. Dann gilt:

$$\text{f hat ein eindeutig bestimmtes Minimum und}$$
$$Ax^* = b \Longleftrightarrow f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{2}$$

1.3.1 Beweis:

1. Eindeutigkeit: per Widerspruch
   Sei $\hat{x}$ ein weiteres Minimum von f. Dann ist $\nabla f(\hat{x}) = A\hat{x} - b = 0 \Rightarrow A\hat{x} = b$.
   $\Rightarrow Ax = b$ hat zwei Lösungen x^* und $\hat{x}$. Widerspruch, da A eine quadratische Matrix und $det(A) \neq 0 \Rightarrow$ das GLS hat eine eindeutige Lösung.
2. $\Rightarrow$: Sei x^* die eind. Lsg. von $Ax = b$. Dann kann man $f(x)$ auch folgendermaßen schreiben:
   $$f(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T A (x - x^*) - c \ \ mit \ \ c = \frac{1}{2}(x^*)^T A x^*$$
   Da $y^T A y > 0 \ \forall_{y \neq 0}$ und c konstant ist, da es nicht von x abhängt, folgt
   $$f(x) = \underbrace{\frac{1}{2}(x - x^*)^T A (x - x^*)}_{\geq 0} - c$$
   ist genau dann minimal, wenn $x = x^*$.
3. $\Leftarrow$: Sei $f(x^*)$ das Minimum von $f(x)$, dann gilt
   $$\nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0 \Rightarrow Ax^* = b$$
   $\Rightarrow x^*$ löst $Ax = b \Rightarrow$ Beh.

1.4 Lemma

Sei U_k ein k-dimensionaler Teilraum des $\mathbb{R}^n$ $(k \leq n)$, und $p^0, p^1, ..., p^{k-1}$ eine *A-orthogonale Basis* dieses Teilraums, also $\langle p^i, p^j \rangle_A = 0 \;\; für \;\; i \neq j$. Sei $v \in \mathbb{R}^n$, dann gilt für $u^k \in U_k$:

$$\|u^k - v\|_A = \min_{u \in U_k} \|u - v\|_A \tag{3}$$

genau dann, wenn u^k die *A-orthogonale Projektion* von v auf $U_k = span\{p^0, ..., p^{k-1}\}$ ist. Außerdem hat $\mathbf{u}^k$ die Darstellung

$$P_{U_{k,\langle\cdot,\cdot\rangle}}(v) = \mathbf{u}^k = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\langle v, p^j \rangle_A}{\langle p^j, p^j \rangle_A} p^j \tag{4}$$

1.4.1 Beweis:

Folgt direkt aus dem Satz des Projektionssatzes (z.B. Numerik 1).

1.4.2 Bemerkungen:

- Wir wählen den Startvektor $x^0 = 0$.
- Wegen Lemma 1.3 ist die Richtung des steilsten Abstiegs gegeben durch $r^0 = b - Ax^0$, wobei wir den Vektor r Residuum nennen werden.
- Spezifisch für das CG-Verfahren ist die Nutzung des A-Skalarprodukts.

1.5 Algorithmus

Die folgenden Teilschritte definieren die Vorgehensweise zur Erzeugung der Lösung x^* durch Näherungen $x^1, x^2, ...$

$U_1 := span\{r^0\}$, wobei $r^0 = b - Ax^0$
dann gilt für $k = 1, 2, 3, ...$, falls $r^{k-1} = b - Ax^{k-1} \neq 0$:

CG_a**:** Bestimme A-orthogonale Basis

$$p^0, ..., p^{k-1} \quad \text{von} \quad U_k \tag{5}$$

CG_b**:** Bestimme $x^k \in U_k$, so dass

$$\|x^k - x^*\|_A = \min_{u \in U_k} \|x - x^*\|_A \tag{6}$$

CG_c**:** Erweitung des Teilraumes:

$$U_{k+1} := span\{p^0, ..., p^{k-1}, r^k\} \;\; \text{wobei} \;\; r^k := b - Ax^k \tag{7}$$

d.h.

$$x^k = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\langle x^*, p^j \rangle_A}{\langle p^j, p^j \rangle_A} p^j \tag{8}$$

1.6 Satz (Verallgemeinerung des Startvektors)

Das Verfahren der konjugierten Gradienten ist unabhängig von der Wahl des Startvektors x^0.

1.6.1 Beweis:

Zu lösen: $Ax^* = b$.
Sei $x^0 \neq 0$. Definiere für das transformierte System $A\tilde{x} = \tilde{b}$, $\tilde{x} := x^* - x^0$ und $\tilde{b} := b - Ax^0$
$\Longrightarrow A\tilde{x} = A(x^* - x^0) = b - Ax^0 = r^0$
Sei nun: $\tilde{x}^0 = 0$ Startvektor mit Residuum $\tilde{r}$.
$\Longrightarrow \tilde{x}^k = x^k - x^0 \Longrightarrow x^k = \tilde{x}^k + x^0$
$\Longrightarrow \tilde{r}^k = \tilde{b} - A\tilde{x}^k = b - Ax^0 - A\tilde{x}^k$
$= b - A(x^0 - \tilde{x}^k) = b - Ax^k = r^k$
$\Longrightarrow \tilde{r}^k = r^k$

1.7 Lemma

Sei x^* die Lösung in Gleichung (6). Dann gilt für $y \in U_k$:

$$\langle x^*, y\rangle_A = \langle b, y\rangle \tag{9}$$

1.7.1 Beweis:

Wir nutzen die Eigenschaften des (A-orthogonalen) Skalarproduktes aus:

$$\langle x^*, y\rangle_A \overset{Def.1.1}{=} {x^*}^T Ay \overset{Symmetrie}{=} y^T Ax^* = y^T b \overset{Symmetrie}{=} b^T y = \langle b, y\rangle$$

1.7.2 Anmerkung:

Um nun einen numerischen Algorithmus zu entwickeln, werden uns die folgenden Lemmata weiter helfen.

1.8 Lemma

Sei x^* die Lösung von Gleichung (6) und x^k die optimale Approximation von x^* in U_k. Dann kann x^k wie folgt berechnet werden:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_{k-1} p^{k-1}, \ \ mit \ \ \alpha_{k-1} := \frac{\langle r^0, p^{k-1}\rangle}{\langle p^{k-1}, Ap^{k-1}\rangle} \tag{10}$$

1.8.1 Beweis:

$$x^k \overset{(4)}{=} \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\langle x^*, p^j \rangle_A}{\langle p^j, p^j \rangle_A} p^j = \underbrace{\sum_{j=0}^{k-2} \frac{\langle x^*, p^j \rangle_A}{\langle p^j, p^j \rangle_A} p^j}_{=x^{k-1}} + \frac{\langle \overbrace{Ax^*}^{=b=b-Ax^0=r^0}, p^{k-1} \rangle}{\langle Ap^{k-1}, p^{k-1} \rangle} p^{k-1} =$$

$$x^{k-1} + \alpha_{k-1} p^{k-1}, \text{ mit } \alpha_{k-1} \overset{(8)}{=} \frac{\langle r^0, p^{k-1} \rangle}{\langle p^{k-1}, Ap^{k-1} \rangle}$$

1.8.2 Bemerkung:

x^k kann mit wenig Aufwand aus x^{k-1} und p^{k-1} berechnet werden.

1.9 Lemma

Um U_{k+1} zu erhalten, also den Teilraum zu erweitern, muss lediglich das neue Residuum $r^k = b - Ax^k$ berechnet werden. Dieses erhält man durch:

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_{k-1} A p^{k-1} \tag{11}$$

Wobei α_{k-1} wie in (10).

1.9.1 Beweis:

1. Zeige, dass nur das neue Residuum berechnet werden muss:
   Da $U_{k+1} = span\{p^0, ..., p^{k-1}, r^k\}$ und wir die A-orthogonalen Vektoren $p^0, ..., p^{k-1}$ bereits bestimmt haben, muss nur noch das Residuum gemäß (7) berechnet werden.
2. Zeige (11) durch Erweiterung von (10):

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_{k-1} p^{k-1} \Longleftrightarrow Ax^k = Ax^{k-1} + \alpha_{k-1} A p^{k-1}$$
$$\Longleftrightarrow b - Ax^k = b - Ax^{k-1} - \alpha_{k-1} A p^{k-1} \Longleftrightarrow r^k = r^{k-1} - \alpha_{k-1} A p^{k-1}$$

1.9.2 Bemerkung:

Das α_{k-1}, sowie die Matrix-Vektor-Multiplikation Ap^{k-1} wurden bereits berechnet.

1.10 Lemma (Zusammenhang zu Krylovräumen)

Man kann U_k auch in folgender Form schreiben:

$$U_k := span\{r^0, r^1, ..., r^{k-1}\} = span\{p^0, p^1, ..., p^{k-1}\} = span\{r^0, Ar^0, ..., A^{k-1} r^0\} \tag{12}$$

1.10.1 Beweis:

Per Induktion über k (klar für k=0):
Induktionsvoraussetzung:

$$U_k := span\{r^0, r^1, ..., r^{k-1}\} = span\{p^0, p^1, ..., p^{k-1}\} = span\{r^0, Ar^0, ..., A^{k-1}r^0\}$$
$$\Longrightarrow k \longrightarrow k+1 : U_{k+1}$$
$$r^k = r^{k-1} - \alpha_{k-1} A p^{k-1}$$
$$p^{k-1} \in U_k = span\{r^0, ..., A^{k-1}r^0\}$$
$$da \;\; p^{k-1} = (\sum_{i=0}^{k-1} \sigma_i A^i) r^0$$
$$\Longrightarrow Ap^{k-1} = (\sum_{i=0}^{k-1} \sigma_i A^{i+1}) r^0$$
$$= \sigma_0 A r^0 + ... + \sigma_{k-1} A^k r^0$$
$$\Longrightarrow r_k \in U_{k+1}$$

1.11 Satz (Bestimmung einer A-orthogonalen Basis)

Durch

$$p^{k-1} = r^{k-1} - \sum_{j=0}^{k-2} \frac{\langle r^{k-1}, p^j \rangle_A}{\langle p^j, p^j \rangle_A} p^j \tag{13}$$

wird die A-orthogonale Basis zum Vektor r^{k-1} bestimmt.

1.11.1 Beweis:

Der Beweis folgt direkt aus dem Gram-Schmidt-Orthonormalisierungsverfahren.

1.12 Lemma

Für jedes $\mathbf{r}^{k-1}$ und $\mathbf{p}^j$ gilt:

$$\langle r^{k-1}, p^j \rangle_A = 0 \;\; für \;\; 0 \leq j \leq k-3$$

1.12.1 Beweis:

Sei $k \geq 3$ fest gewählt. Aus $U_1 = span\{r^0\}, U_2 = U_1 \oplus span\{r^1\} = span\{r^0, r^1\}$ usw. erhält man

$$U_m = span\{r^0, r^1, ..., r^{m-1}\} \quad m = 1, 2, ..., k \tag{14}$$

Aus der Definition von x^m ergibt sich $x^m - x^* \perp_A U_m$, also $-r^m = A(x^m - x^*) \perp U_m$. Zusammen mit (14) folgt hieraus

$$r^i \perp r^j \;\; für \;\; 0 \leq i, j \leq k, i \neq j \tag{15}$$

Da $r^j \neq 0$ für $j \leq k-1$ gilt folgt wegen (15) muss dann $r^j \neq r^{j-1}$ gelten, also auch $x^j \neq x^{j-1}, j \leq k-1$. Aus (10) erhält man damit, dass $\alpha_i \neq 0$ für $j \leq k-2$ gilt. Nun gilt für $j \leq k-3$

$$\langle r^{k-1}, p^j \rangle_A = \langle r^{k-1}, Ap^j \rangle \stackrel{(11)}{=} \langle r^{k-1}, \frac{1}{\alpha_j}(r^j - r^{j-1}) \rangle = \frac{1}{\alpha_j} \langle r^{k-1}, r^j \rangle - \frac{1}{\alpha_j} \langle r^{k-1}, r^{j+1} \rangle \stackrel{(15)}{=} 0$$

1.13 Folgerung

Wegen Lemma 1.11 vereinfacht sich (13) auf

$$p^{k-1} = r^{k-1} - \frac{\langle r^{k-1}, Ap^{k-2} \rangle}{\langle p^{k-2}, Ap^{k-2} \rangle} p^{k-2}$$

1.13.1 Bemerkung:

Somit können wir p^{k-1} einfach aus r^{k-1} und p^{k-2} berechnen.

1.14 Algorithmus

Gegeben: $A \in \mathbb{R}^n$ s.p.d., $b \in \mathbb{R}^n$, Startvektor $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\beta_{-1} := 0$. Berechne $r^0 = b - Ax^0$. Für $k = 1, 2, ...$, falls $r^{k-1} \neq 0$:

$$p^{k-1} = r^{k-1} + \beta_{k-2} p^{k-2}, \;\; \textit{wobei} \;\; \beta_{k-2} = \frac{\langle r^{k-1}, r^{k-1} \rangle}{\langle r^{k-2}, r^{k-2} \rangle} \;\; \textit{mit} \;\; (k \geq 2), \tag{16a}$$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_{k-1} p^{k-1}, \;\; \textit{mit} \;\; \alpha_{k-1} = \frac{\langle r^{k-1}, r^{k-1} \rangle}{\langle p^{k-1}, Ap^{k-1} \rangle} \tag{16b}$$

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_{k-1} Ap^{k-1} \tag{16c}$$

1.15 Literatur:

1. “Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler“,
   W.Dahmen & A.Reusken, 2.,korrigierte Auflage, 2008, Seiten 566-572

2. “Finite Elemente“, Braess, Seiten 177-180