Das Verfahren der konjugierten Gradienten

Michael Bauer, 11. November 2013

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.

Definition 1.1 (A-orthogonal)
Sei A eine symmetrische, nicht singuläre (invertierbare) Matrix. Zwei Vektoren x und y heißen **konjugiert** oder **A-orthogonal**, wenn $x^T Ay = 0$ ist.

Bemerkung:
· Es definiert $\langle x, y \rangle_A = x^T Ay$ 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.

Satz 1.2
Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ s.p.d. und

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

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

f hat ein eindeutig bestimmtes Minimum und

$$Ax^* = b \Longleftrightarrow f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \qquad (1.1)$$

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:

$$f(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T A(x - x^*) - c \;\; mit \;\; c = \frac{1}{2}(x^*)^T Ax^*$$

Da $\langle y, y, \rangle_A > 0 \;\; \forall_{y \neq 0}$ und c nicht von x abhängt, also c konstant, so 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. $\blacksquare$

Lemma 1.3
Sei f wie in (1.1). Die Richtung des steilsten Abstiegs von f an der Stelle x, d.h. $s \in \mathbb{R}^n$ so, dass die Richtungsableitung

$$\frac{d}{dt} f(x + t\frac{s}{\|s\|_2})|_{t=0} = (\nabla f(x))^T (\frac{s}{\|s\|_2}) \qquad (1.2)$$

minimal ist, wird durch $s = -\nabla f(x) = b - Ax$ gegeben.

Beweis:
Aus den Eigenschaften des Skalarproduktes wissen wir, dass $\langle x, y\rangle$ minimal wird genau dann, wenn $y = -x$. Da $\nabla f(x) = Ax - b$ und für festes x muss s in $\langle \nabla f(x), \frac{s}{\|s\|_2}\rangle$ zu $\nabla f(x)$ entgegengesetzte Richtung haben, also $s = -\nabla f(x) \Rightarrow$ Beh. $\blacksquare$

Lemma 1.4
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 $\langle p^i, p^j\rangle_A = 0 \ \ f\ddot{u}r \ \ i \neq j$. Sei $v \in \mathbb{R}^n$, dann gilt für $u^k \in U_k$:

$$\|u^k - v\|_A = \min_{u \in U_k} \|u - v\|_A \qquad (1.3)$$

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

$$P_{U_k, \langle\cdot,\cdot\rangle}(v) = \mathbf{u}^k = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\langle v, p^j\rangle_A}{\langle p^j, p^j\rangle_A} p^j \qquad (1.4)$$

Projektionssatz aus Numerik 1
Für $U \subset V$, U sei ein n-dim. Teilraum von V und ϕ_j eine ONB. Dann existiert ein eindeutiges $u^* \in U$, welches $\|u^* - v\| = \min_{u \in U} \|u - v\|$ erfüllt. Für jedes $v \in V$ wird dieses Problem durch

$$P_U(v) := \sum_{j=1}^{n} \langle v, \phi_j\rangle \phi_j$$

gelöst. $P_U(v)$ ist die orthogonale Projektion bzgl. $\langle\cdot,\cdot\rangle$.

Beweis von Lemma 1.4:
Mit $V = \mathbb{R}^n, U = U_k$ stellt Lemma 1.4 den Projektionssatz dar, wobei $\langle\cdot,\cdot\rangle = \langle\cdot,\cdot\rangle_A$ gilt. Zudem sind die $p^0, ..., p^{k-1}$ orthogonal. Also müssen diese orthonormalisiert werden mit $\phi_{j+1} = \frac{p^j}{\|p^j\|_A}$.

$$\Rightarrow \sum_{j=0}^{k-1} \langle v, \phi_{j+1}\rangle_A \phi_{j+1} = \sum_{j=0}^{k-1} \langle v, \frac{p^j}{\|p^j\|_A}\rangle_A \frac{p^j}{\|p^j\|_A} = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\langle v, p^j\rangle_A}{\langle p^j, p^j\rangle_A} p^j \qquad \blacksquare$$

Herleitung der CG-Methode

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.

Definition 1.5
Die folgenden Teilschritte definieren die Vorgehensweise zur Erzeugung der Lösung x^* durch Näherungen $x^1, x^2, ...$

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

CG_a: Bestimme A-orthogonale Basis $p^0, ..., p^{k-1}$ von U_k
CG_b: Bestimme $x^k \in U_k$, so dass

$$\|x^k - x^*\|_A = \min_{u \in U_k} \|x - x^*\|_A \qquad (1.5)$$

CG_c: Erweitung des Teilraumes:

$$U_{k+1} := span\{p^0, ..., p^{k-1}, r^k\} \ \ wobei \ \ r^k := b - Ax^k \qquad (1.6)$$

Bemerkungen:

- Damit der Algorithmus später stabil und effizient ist, muss die $A - orthogonale$ Basis von U_k bestimmt werden.
- Das x^k stellt die optimale Approximation von x^* dar.

Da in CG_b der Eindruck entsteht, dass man zur Bestimmung von x^k die Lösung x^* bereits kennen muss, zeigen wir mit dem folgenden Lemma, dass sich x^k berechnen lässt, ohne x^* zu kennen.

Lemma 1.6
Sei x^* die Lösung in Gleichung (1.5). Dann gilt für $y \in U_k$:

$$\langle x^*, y\rangle_A = \langle b, y\rangle \qquad (1.7)$$

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

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

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

Lemma 1.7
Sei x^* die Lösung von Gleichung (1.5) und x^k die optimale Approximation von x^* in U_k. Dann kann x^k wie folgt berechnet werden:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_{k-1} p^{k-1}, \ \ mit \ \ \alpha_{k-1} := \frac{\langle r^0, p^{k-1}\rangle}{\langle p^{k-1}, Ap^{k-1}\rangle} \qquad (1.8)$$

Beweis:

$$x^k \overset{(1.4)}{=} \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\langle x^*, p^j\rangle_A}{\langle p^j, p^j\rangle_A} p^j = \underbrace{\sum_{j=0}^{k-2} \frac{\langle x^*, p^j\rangle_A}{\langle p^j, p^j\rangle_A} p^j}_{=x^{k-1}} + \frac{\langle \overbrace{Ax^*}^{=b=b-Ax^0=r^0}, p^{k-1}\rangle}{\langle Ap^{k-1}, p^{k-1}\rangle} p^{k-1} = x^{k-1} + \alpha_{k-1} p^{k-1}, \ \ mit \ \ \alpha_{k-1} \overset{(1.7)}{=} \frac{\langle r^0, p^{k-1}\rangle}{\langle p^{k-1}, Ap^{k-1}\rangle}$$

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

Lemma 1.8
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:

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_{k-1} Ap^{k-1} \qquad (1.9)$$

Wobei α_{k-1} wie in (1.7).

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

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 (1.6) berechnet werden.
2. Zeige (1.9) durch Erweiterung von (1.8):

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

Satz 1.9 (Bestimmung einer A-orthogonalen Basis)
Durch

$$p^{k-1} = r^{k-1} - \sum_{j=0}^{k-2} \frac{\langle r^{k-1}, p^j\rangle_A}{\langle p^j, p^j\rangle_A} p^j \qquad (1.10)$$

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

Beweis:
Für $k = 1$ ist $U_1 = span\{r^0\}$ also $p^0 = r^0$.
Für $k > 1$ ist $U_k = span\{p^0, p^1, ..., p^{k-2}, r^{k-1}\}$, wobei $p^0, p^1, ..., p^{k-2}$ eine (bereits bekannte) A-orthogonale Basis von U_{k-1} ist.
Der neue A-orthogonale Basisvektor $p^{k-1} \in U_k$ ist nichts anders als der Vektor, der senkrecht zu U_{k-1} steht. Da r^{k-1} bekannt, lässt sich p^{k-1} durch r^{k-1} und die orthogonale Projektion von r^{k-1} auf U_{k-1} berechnen.
Sei w^{k-1} diese orthogonale Projektion, dann gilt:

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

Da offensichtlich $p^{k-1} = r^{k-1} - w^{k-1}$ folgt mit Einsetzen von w^{k-1} die Beh.

Lemma 1.10
Für jedes $\mathbf{r}^{k-1}$ und $\mathbf{p}^j$ gilt:

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

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

$$U_m = span\{r^0, r^1, ..., r^{m-1}\} \qquad m = 1, 2, ..., k \qquad (1.11)$$

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 (1.11) folgt hieraus

$$r^i \perp r^j \;\; für \;\; 0 \leq i, j \leq k, i \neq j \qquad (1.12)$$

Wir haben in (13.48) angenommen, dass $r^j \neq 0$ für $j \leq k-1$ gilt. Wegen (13.54) muss dann $r^j \neq r^{j-1}$ gelten, also auch $x^j \neq x^{j-1}, j \leq k-1$. Aus (13.50) erhält man damit, dass $\alpha_i \neq 0$ für $j \leq k-2$ gilt. Nun gilt für $j \leq k-3$

$$\langle r^{k-1}, p^j\rangle_A = \langle r^{k-1}, Ap^j\rangle \overset{(1.9)}{=} \langle r^{k-1}, \frac{1}{\alpha_j}(r^j - r^{j-1})\rangle = \frac{1}{\alpha_j}\langle r^{k-1}, r^j\rangle - \frac{1}{\alpha_j}\langle r^{k-1}, r^{j+1}\rangle \overset{(1.11)}{=} 0$$

Folgerung 1.11
Wegen Lemma 1.10 vereinfacht sich (1.10) auf

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

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

Satz 1.12 (Verallgemeinerung des Startvektors)
Das Verfahren der konjugierten Gradienten ist unabhängig von der Wahl des Startvektors x^0.

Beweis:
Idee: Sei $x^0 \neq 0$. Betrachte ein transformiertes System $A\tilde{x} = \tilde{b}$ mit $\tilde{x} = x^* - x^0$, $\tilde{b} = b - Ax = r^0$.
Wenn wir nun auf dieses System die CG-Methode anwenden und zum Schluss die Formeln Rücktransformieren mit $x^k := \tilde{x}^k + x^0$, $r^k = b - Ax^k = \tilde{b} - A\tilde{x}^k = \tilde{r}^k$ und $p^k := \tilde{p}^k$, erhalten wir wieder den Algorithmus der konjugierten Gradienten.

Definition 1.13 (Verfahren der konjugierten Gradienten)

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 $r^{k-1} \neq 0$:

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

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_{k-1}p^{k-1}, \;\; \mathit{mit} \;\; \alpha_{k-1} = \frac{\langle r^{k-1} r^{k-1} \rangle}{\langle p^{k-1} A p^{k-1} \rangle}$$

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

Folgerung 1.14 (Eigenschaften des CG-Verfahrens)
Solange $r^{k-1} \neq 0$ ist, gelten folgende Aussagen:

(1) Es ist $p^{k-1} \neq 0$.

(2) Es ist

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

(3) Die Vektoren $p^0, p^1, ..., p^{k-1}$ sind paarweise konjugiert.

(4) Es ist

$$f(x^k) = \min_{u \in U_k} f(x^0 + u)$$

Beweis:
Für $k = 1$ sind die Aussagen klar. Die Aussagen seien schon für $k \geq 1$ bewiesen.
Zunächst ist

$$r^k = r^{k-1} + A(x^k - x^{k-1}) = r^{k-1} + \alpha_{k-1}Ap^{k-1}$$

Also ist $r^k \in U_{k-1}$ und $span[r^i]_{i=0}^k \subset U_{k+1}$. Nach Induktionsvoraussetzung sind die Vektoren $p^0, p^1, ..., p^{k-1}$ konjugiert und wegen der Optimalität von x^k ist

$$p^{i'} r^k = 0 \;\; f\ddot{u}r \;\; i < k \qquad (3.7.)$$

Deshalb ist r^k nur von $p^0, p^1, ..., p^{k-1}$ linear unabhängig, falls $r^k = 0$ ist. Aus $r^k \neq 0$ schließen wir $r^k \notin U_k$. Dann ist $span[r^i]_{i=0}^k$ ein $k+1-$dimensionaler Raum und kein echter Unterraum von U_{k+1}. Damit ist fÃ¼r $k+1$ die erste Gleichung in der Aussage (2) bewiesen. Ferner stimmt U_{k+1} mit $span[r^i]_{i=0}^k$ Ã¼berein;

denn wegen $r^k + p^k \in U_k$ hätte man genause gut p^k hinzufügen können.
Außerdem folgt aus $r^k + p^k \in U_k$ sofort $p^k \neq 0$, falls $r^k \neq 0$ gilt. Also ist Aussage (1) richtig.
Zum Nachweis der Aussage (3) berechnen wir

$$p^{i'} A p^k = -p^{i'} A r^k + \beta_{k-1} p^{i'} A p^{k-1} \qquad (3.8.)$$

Für $i \leq k-2$ verschwindet der erste Term auf der rechten Seite wegen $AU_{k-1} \subset U_k$ und (3.7). Außerdem hat der zweite Term nach Voraussetzung den Wert null. Für $i = k-1$ wird gerade druch β_k gemäß (3.5) erreicht, dass die rechte Seite von (3.8) verschwindet.
Die letzte Eigenschaft wird durch Folgerung 3.3 geliefert, und der Induktionsbeweis ist fertig. ∎

Erinnerung: (Definition von einem Krylovraum)

$$\begin{aligned} &\mathcal{K}_k(r, A) := span\{r, Ar, ..., A^{k-1}r\} && mit\ \ k \geq 1 \\ &\mathcal{K}_k(r, A) := \{0\} && mit\ \ k = 0 \end{aligned}$$

heißt Krylovraum zur Matrix A und zum Vektor r.
Iterative Krylovraum-Methoden zur Lösung eines GLS $Ax = b$ mit $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ verlangen $x^k \in x^0 + \mathcal{K}_k(r^0, A)$ und $x^n = x^*$, wobei $r^0 = Ax^0 - b$.