Inhaltsverzeichnis

Das CG-Verfahren

Janina Zachej & Martin Kunkel

1 Verfahren für symmetrische, positiv definite Matrizen

Wir betrachten im Folgenden stets Lineare Gleichungssysteme der Form

$$Ax = b \tag{1}$$

mit einer regulären, symmetrischen und postiv definiten Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und einer rechten Seite $b \in \mathbb{R}^n$.
Zur Herleitung der Verfahren betrachten wir die Funktion

$$\begin{aligned} F : \mathbb{R}^n &\to \mathbb{R} \\ x &\mapsto \frac{1}{2}(Ax, x)_2 - (b, x)_2 \end{aligned} \tag{2}$$

Lemma 1.1 *Seien $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch, postiv definit und $b \in \mathbb{R}^n$ gegeben, dann gilt mit der durch (2) gegebenen Funktion F*

$$x^* := \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x)$$

genau dann, wenn

$$Ax^* = b$$

gilt.

Bei allen folgenden Verfahren nehmen wir eine Minimierung der Funktion F ausgehend vom Punkt $x \in \mathbb{R}^n$ entlang spezieller Richtungen $p \in \mathbb{R}^n$ vor. Wir definieren daher für $x, p \in \mathbb{R}^n$ die Funktion

$$\begin{aligned} f_{x,p} : \mathbb{R} &\to \mathbb{R} \\ \lambda &\mapsto f_{x,p}(\lambda) := F(x + \lambda p). \end{aligned} \tag{3}$$

Lemma und Definition 1.2 *Seien die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch, positiv definit und die Vektoren $x, p \in \mathbb{R}^n$ mit $p \neq 0$ gegeben, dann gilt:*

$$\lambda_{opt} := \lambda_{opt}(x,p) := \arg\min_{\lambda\in\mathbb{R}} f_{x,p}(\lambda) = \frac{(r,p)_2}{(Ap,p)_2}$$

mit $r := b - Ax$. Der Vektor r wird als Residuenvektor und seine euklidische Norm $\|r\|_2$ als Residuum bezeichnet.

Sei nun eine Folge $(p_m)_{m\in\mathbb{N}_0}$ von Suchrichtungen aus $\mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ gegeben, dann können wir unser erstes Verfahren erstellen:

Algorithmus - Basislöser

Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$
Für $m := 0, 1, \ldots$
$r_m := b - Ax_m$
$\lambda_m := \frac{(r_m,p_m)_2}{(Ap_m,p_m)_2}$
$x_{m+1} := x_m + \lambda_m p_m$

2 Das Verfahren des steilsten Abstiegs (Gradientenverfahren)

Um den Algorithmus - Basislöser zu vervollständigen, benötigen wir eine Berechnungsvorschrift zur Ermittlung der Suchrichtungen $p_m \in \mathbb{R}^n$. Wir forden außerdem ohne Beschränkung der Allgemeinheit: $\|p_m\|_2 = 1$.
Eine optimale Wahl erhalten wir mit dem negativen Gradienten der Funktion F. Hier gilt:

$$\nabla F(x) = Ax - b = -r.$$

Somit ist die optimale Suchrichtung (die Richtung des steilsten Abstiegs) gegeben durch:

$$p := \begin{cases} \frac{r}{\|r\|_2} & \text{für } r \neq 0 \\ 0 & \text{für } r = 0 \end{cases} \tag{4}$$

Algorithmus - Verfahren des steilsten Abstiegs

Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$

Für $m := 0, 1, \ldots$

- $r_m := b - Ax_m$
- Falls $r_m = 0$ Abbruch, sonst:
- $\lambda_m := \frac{\|r_m\|_2^2}{(Ar_m, r_m)_2}$
- $x_{m+1} := x_m + \lambda_m r_m$

Definition 2.1 *Sei $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ gegeben, dann heißt $x \in \mathbb{R}^n$*

1. *optimal bezüglich der Richtung $p \in \mathbb{R}^n$, falls*

$$F(x) \le F(x + \lambda p) \qquad \forall \lambda \in \mathbb{R}$$

   gilt.

2. *optimal bezüglich eines Unterraums $U \subset \mathbb{R}^n$, falls*

$$F(x) \le F(x + \xi) \qquad \forall \xi \in U$$

   gilt.

Lemma 2.2 *Sei F durch (2) gegeben, dann ist $x \in \mathbb{R}^n$ genau dann optimal bezüglich $U \subset \mathbb{R}^n$, wenn*

$$r := (b - Ax) \perp U$$

gilt.

Satz 2.3 *Die Iterierten x_m, $m \in \mathbb{N}$ des Gradientenverfahrens sind optimal bezüglich der Richtung $r_{m-1} := b - Ax_{m-1}$.*

3 Das Verfahren der konjugierten Richtungen

Satz 3.1 *Sei F durch (2) gegeben und $x \in \mathbb{R}^n$ optimal bezüglich des Unterraums $U := \operatorname{span}\{p_0, \ldots, p_{m-1}\} \subset \mathbb{R}^n$, dann ist $\tilde{x} := x + \xi$ genau dann optimal bezüglich U, wenn*

$$A\xi \perp U$$

gilt.

Definition 3.2 *Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, dann heißen die Vektoren $p_0, \dots, p_m \in \mathbb{R}^n$ paarweise konjugiert (oder A-orhogonal), falls*

$$(p_i, p_j)_A := (Ap_i, p_j)_2 = 0 \qquad \forall i, j \in \{0, \dots, n\} \text{ und } i \neq j$$

gilt.

Lemma 3.3 *Seien $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch, positiv definit und $p_0, \dots, p_{m-1} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ paarweise konjugiert, dann gilt:*

$$\dim \operatorname{span}\{p_0, \dots, p_{m-1}\} = m$$

für $m := 1, \dots, n$.

Algorithmus - Verfahren der konjugierten Richtungen

Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$
$r_0 := b - Ax_0$
Für $m := 0, \dots, n-1$
$\lambda_m := \frac{(r_m, p_m)_2}{(Ap_m, p_m)_2}$
$x_{m+1} := x_m + \lambda_m p_m$
$r_{m+1} := r_m - \lambda_m A p_m$

4 Das Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren)

Mit den Residuenvektoren $r_0, \dots, r_m$ ermitteln wir die Suchrichtungen durch

$$\begin{aligned} p_0 &:= r_0, \\ p_m &:= r_m + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j p_j \qquad \text{für } m := 1, \dots, n-1. \end{aligned}$$

Für $\alpha_j = 0$ $(j := 0, \dots, m-1)$ erhalten wir damit eine zum Verfahren des steilsten Abstiegs analoge Auswahl der Suchrichtungen. Unter Berücksichtigung der bereits genutzen Suchrichtungen $p_0, \dots, p_{m-1}$ in der obigen Form liegen m Freiheitsgerade in der Wahl der Koeffizienten α_j vor, die zur Gewährleistung der Konjugiertheit der Suchrichtungen genutzt werden. Aus der geforderten Konjugiertheitsbedingung folgt

$$0 = (Ap_m, p_i)_2 = (Ar_m, p_i)_2 + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j (Ap_j, p_i)_2 \qquad \text{für } m := 1, \dots, n-1.$$

Mit

$$(Ap_j, p_i)_2 = 0 \text{ für } i, j \in \{0, \ldots, m-1\} \text{ und } i \neq j$$

erhalten wir die benötigte Vorschrift zur Berechnung der Koeffizienten in der Form

$$\alpha_i = -\frac{(Ar_m, p_i)_2}{(Ap_i, p_i)_2}.$$

Algorithmus - vorl. Verfahren der konjugierten Gradienten

Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$
$p_0 := r_0 := b - Ax_0$
Für $m := 0, \ldots, n-1$
$\lambda_m := \frac{(r_m, p_m)_2}{(Ap_m, p_m)_2}$
$x_{m+1} := x_m + \lambda_m p_m$
$r_{m+1} := r_m - \lambda_m A p_m$
$p_{m+1} := r_{m+1} - \sum_{j=0}^{m} \frac{(Ar_{m+1}, p_j)_2}{(Ap_j, p_j)_2} p_j$

Dieses Verfahren hat den Nachteil, dass zur Berechnung von p_{m+1} alle p_j $(j = 0, \ldots, m)$ benötigt werden, was viel Speicherplatz verbrauchen kann. Mit geeigneten Modifikationstechniken erhält man:

Algorithmus - Verfahren der konjugierten Gradienten

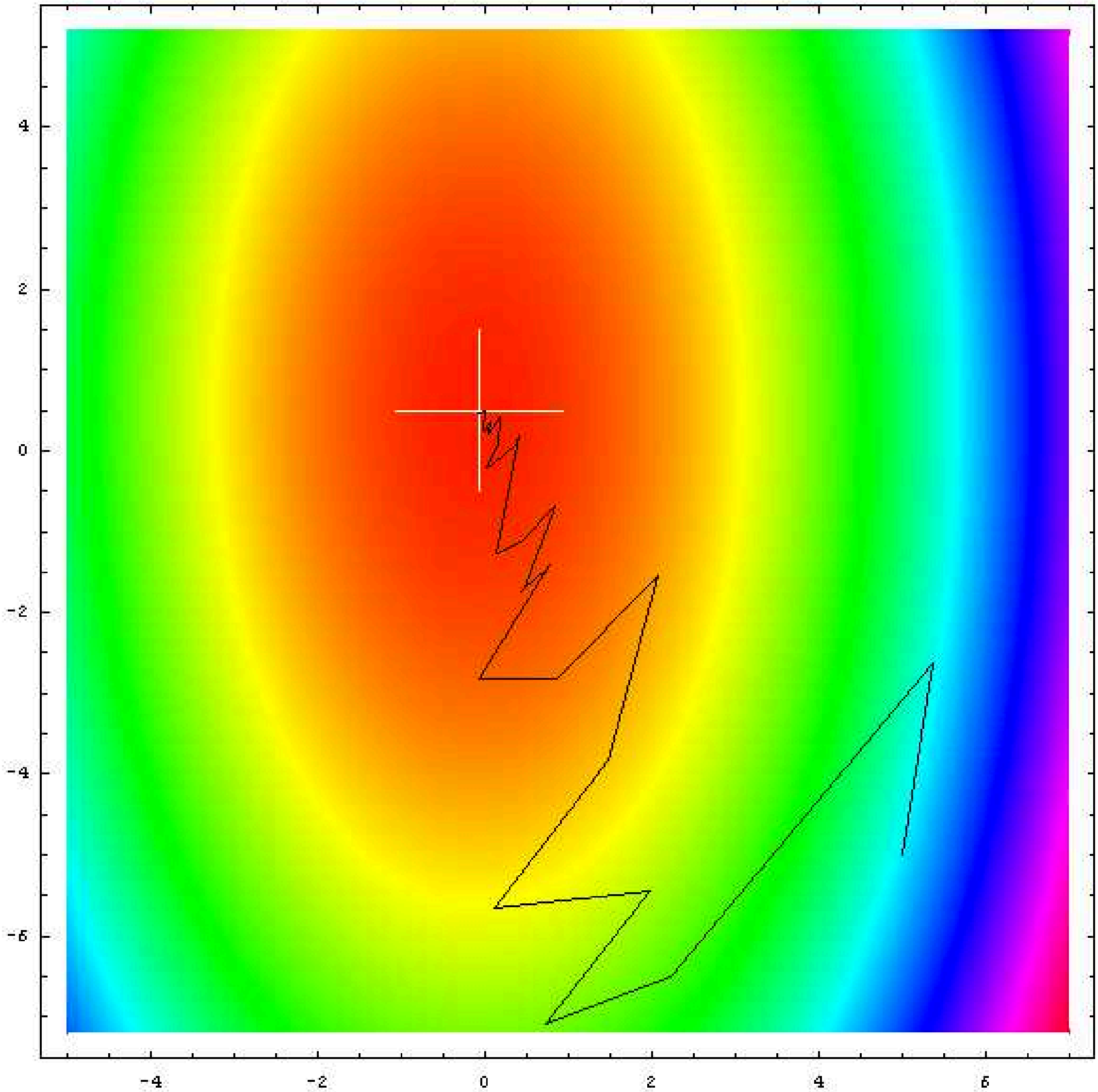
Wähle $x_0 \in \mathbb{R}^n$
$p_0 := r_0 := b - Ax_0, \alpha_0 := \\|r_0\\|_2^2$
Für $m := 0, \ldots, n-1$
Falls $\alpha_m = 0$ Abbruch, sonst:
$v_m := Ap_m, \lambda_m := \frac{\alpha_m}{(v_m, p_m)_2}$
$x_{m+1} := x_m + \lambda_m p_m$
$r_{m+1} := r_m - \lambda_m v_m$
$x_{m+1} := x_m + \lambda_m p_m$
$p_{m+1} := r_{m+1} + \frac{\alpha_{m+1}}{\alpha_m} p_m$

5 Beispiele

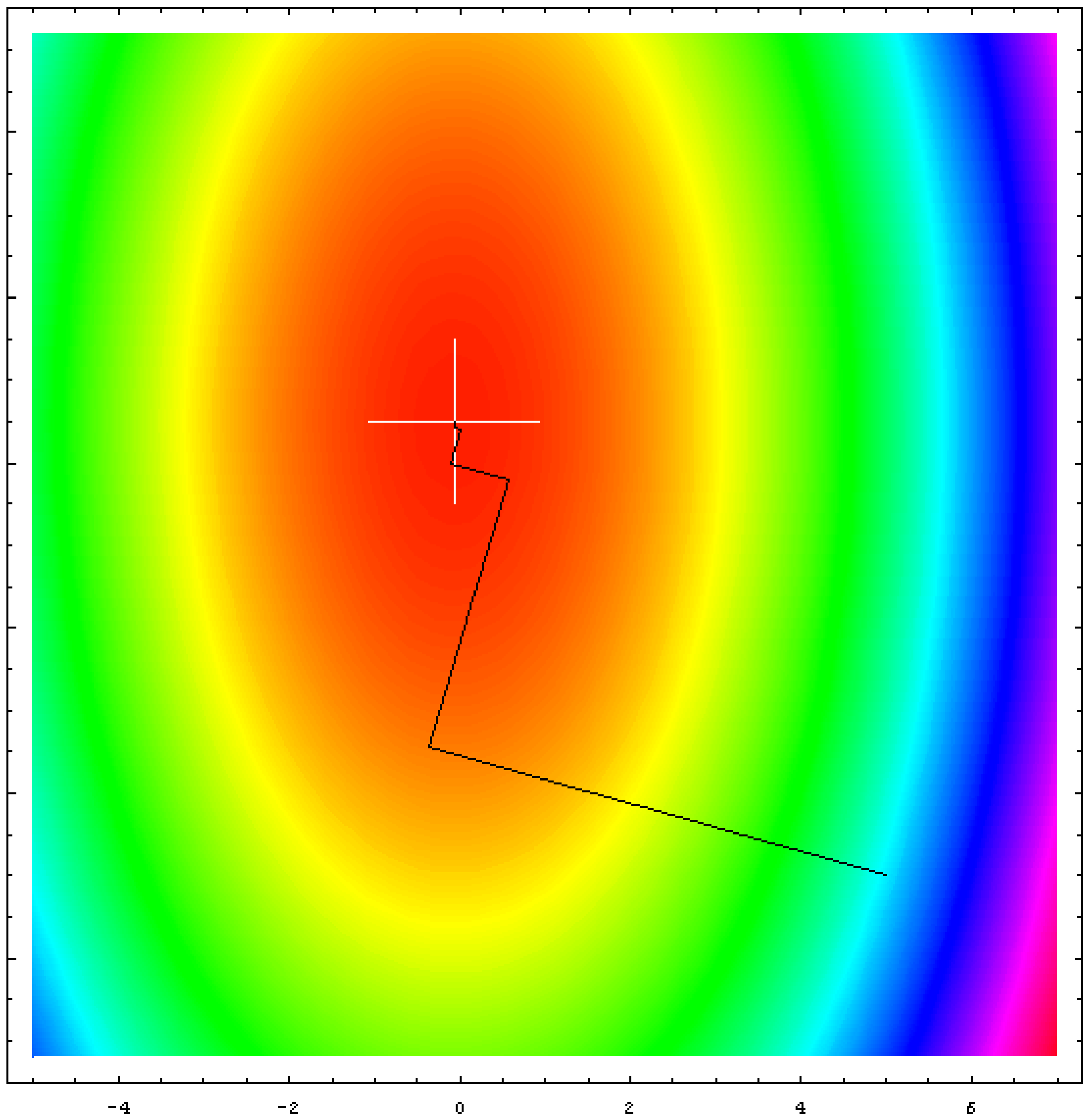
Wir suchen die Lösung des LGS $Ax = b$ mit

$$A := \begin{pmatrix} 15 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}, b := \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}, x_0 := \begin{pmatrix} 5 \\ -5 \end{pmatrix}$$

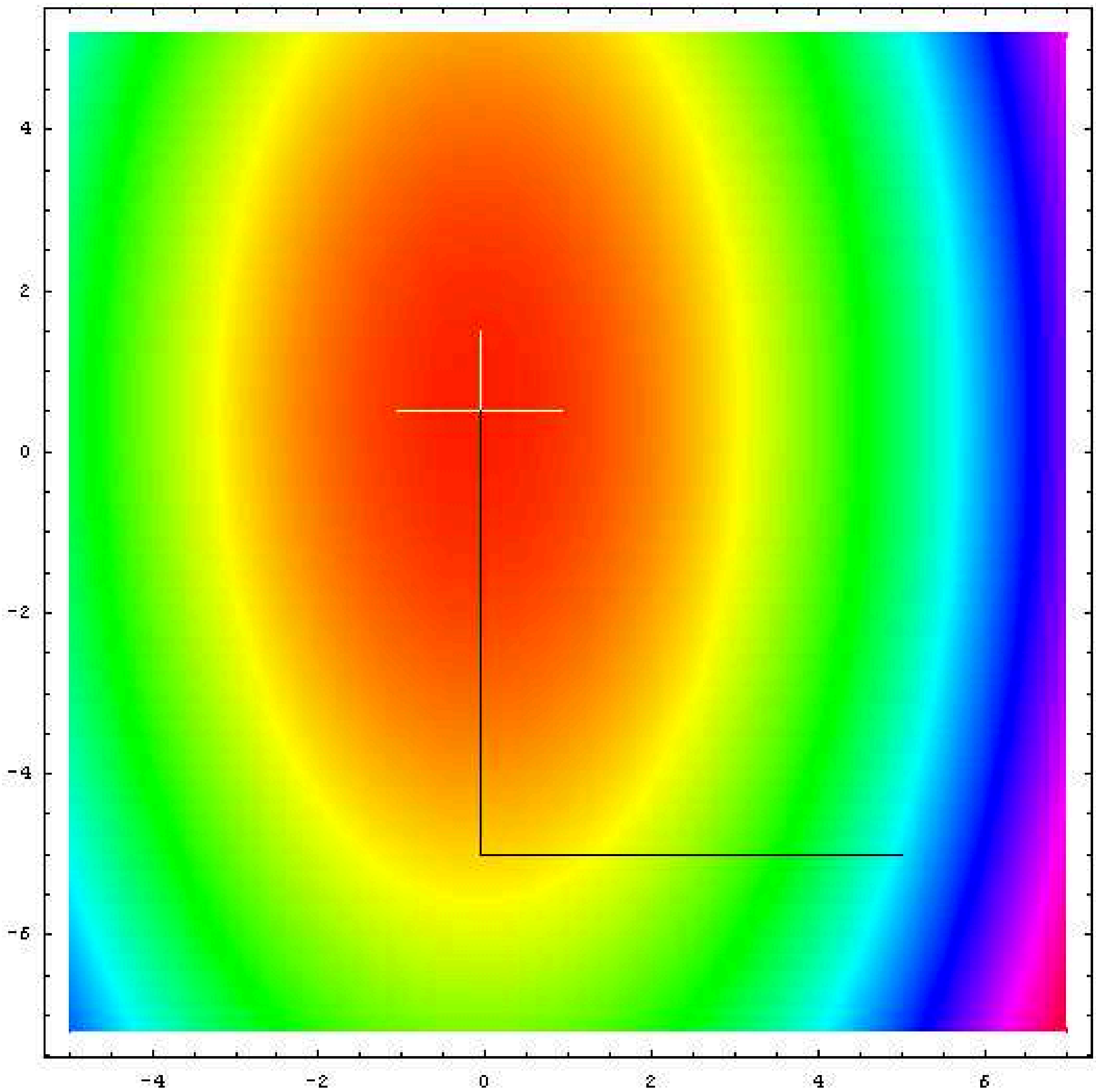
Zunächst verwenden wir den Basislöser-Algorithmus mit zufälligen Suchrichtungen aus $\mathbb{R}^2$.
Man erhält folgenden Konvergenzverlauf (die Werte der durch (2) gegebenen Funktion F sind als Farben dargestellt: von blau (hoher Wert) bis rot (niedriger Wert). Die Lösung $x^* := \begin{pmatrix} -\frac{1}{15} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ ist mit dem weißen Kreuz markiert.



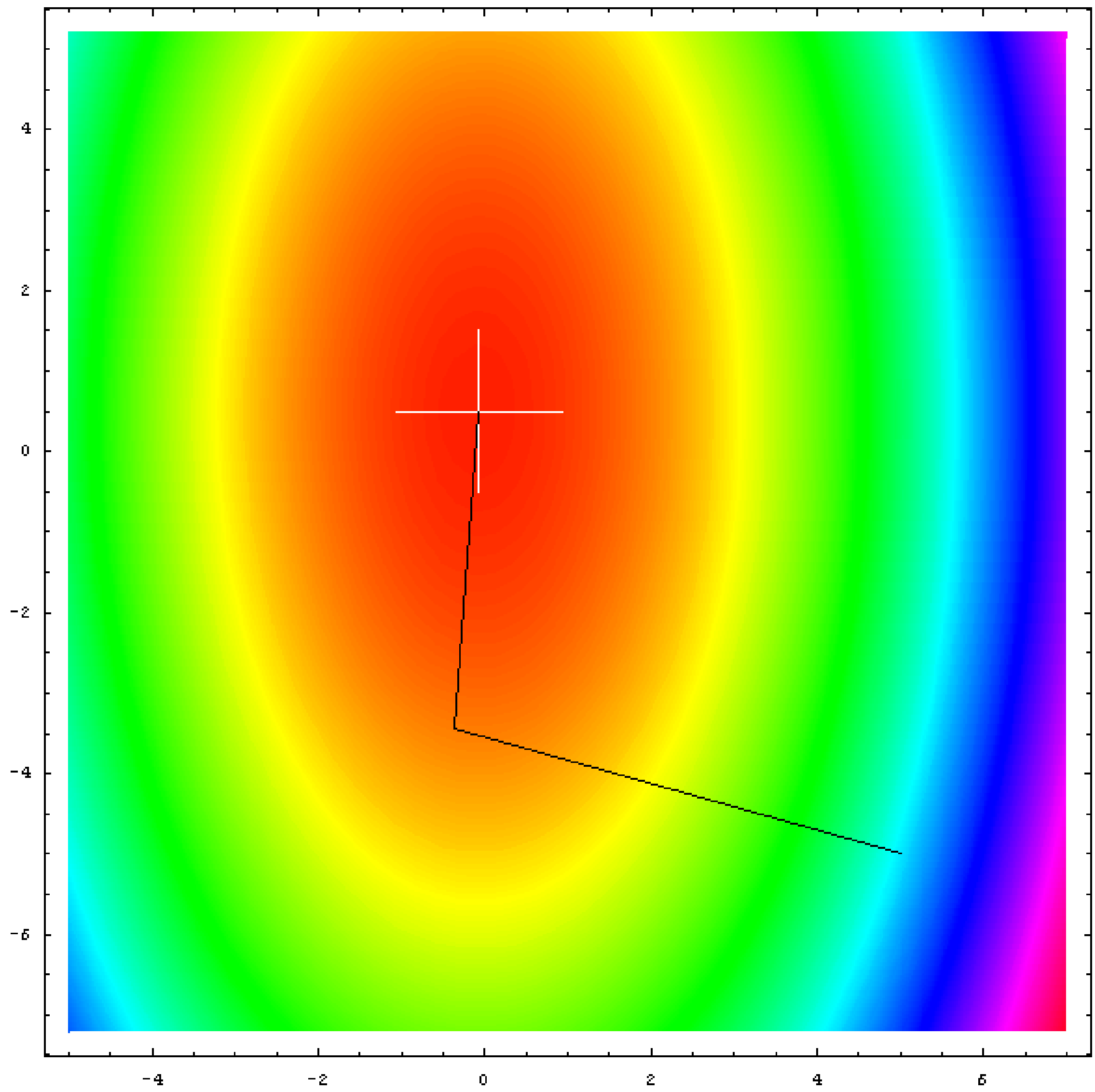
Das Verfahren des steilsten Abstiegs konvergiert deutlich schneller gegen die Lösung des LGS:



Hier ist der Konvergenzverlauf für das Verfahren der konjugierten Richtungen mit Suchrichtungen gleich den kanonischen Basisvektoren des $\mathbb{R}^2$.



Als letztes Beispiel sind hier die Ergebnisse des CG-Verfahrens:



6 Quellen

Wir verwendeten für unseren Vortrag hauptsächlich das Buch:

Andreas Meister. Numerik linearer Gleichungssysteme, Einführung in moderne Verfahren, Vieweg Verlagsgesellschaft, 1999, ISBN 3528031352.

Darin befinden sich auch die Beweise zu den einzelnen Sätzen.