

Metoda sdružených gradientů

Poznámka

A -skalární součin, A -norma (energetická norma)

- Standardní euklidovský skalární součin vektorů

$$\langle x, y \rangle = y^T x = \sum_{i=1}^n y_i x_i .$$

- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je **symetrická, pozitivně definitní**, definujme

$$\langle x, y \rangle_A \equiv y^T A x, \quad \|x\|_A \equiv \langle x, x \rangle_A^{1/2} .$$

- Z normality a z pozitivní definitnosti plyne

$$\|x\|_A^2 = \|A^{1/2} x\|^2 .$$

Problém $Ax = b$

a minimalizace funkcionálu

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je **symetrická, pozitivně definitní**.

- Data A , b , definujeme kvadratický funkcionál

$$\mathcal{F}(y) \equiv \frac{1}{2} y^T A y - y^T b, \quad \mathcal{F} : \mathbb{R}^n \longmapsto \mathbb{R}.$$

- Platí

$$\nabla \mathcal{F}(y) = Ay - b.$$

$\mathcal{F}(y)$ nabývá minima v bodě $\nabla \mathcal{F}(y) = 0$, tj. $Ay - b = 0$.

-

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{F}(x) \text{ nabývá v } x \text{ minima.}$$

Problém $Ax = b$

a minimalizace funkcionálu

- Necht y je aproximace **řešení** x , platí

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(y) &= \frac{1}{2} y^T A y - y^T b \\ &= \frac{1}{2} (x - y)^T A (x - y) - \frac{1}{2} x^T A x \\ &= \frac{1}{2} \|x - y\|_A^2 - \frac{1}{2} \|x\|_A^2.\end{aligned}$$

- **Minimalizace funkcionálu** $\mathcal{F}(y)$ přes nějaký podprostor $\Leftrightarrow$ **minimalizace** $\|x - y\|_A$ přes ten samý podprostor.
- Přirozené měřit vzdálenost aproximace řešení y od x pomocí energetické normy $\|x - y\|_A$.

Problém $Ax = b$

a minimalizace funkcionálu - shrnutí

Problém:

$$Ax = b,$$

kde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je **symetrická, pozitivně definitní**.



$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{F}(y) \text{ nabývá v } x \text{ minima.}$$

- $\mathcal{F}(y)$ a A -norma chyby,

$$\mathcal{F}(y) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_A^2 - \frac{1}{2} \|\mathbf{x}\|_A^2.$$

- Jak efektivně konstruovat aproximace řešení?

Strategie na **hledání minima** $\mathcal{F}(y)$.

Blížím se k minimu $\Rightarrow$ blížím se i k řešení $Ax = b$.

Hledání minima v daném směru

- Dána aproximace minima x_k . Nová aproximace

$$x_{k+1} = x_k + \gamma_k p_k$$

kde p_k je zvolený **směrový vektor** a γ_k vhodný **koeficient**.

- Určení γ_k : lokální minimalizace $\mathcal{F}(x_k + \gamma p_k)$, ukážeme (cv.)

$$\gamma_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k},$$

kde $r_k \equiv b - Ax_k$ je reziduum.

- Reziduum lze psát pomocí chyby

$$r_k = b - Ax_k = A(x - x_k) \equiv Ae^{(k)}.$$

- Pro reziduum platí (cv.)

$$r_{k+1} = r_k - \gamma_k A p_k, \quad r_{k+1} \perp p_k \quad \Leftrightarrow \quad e^{(k+1)} \perp_A p_k.$$

Hledání minima v daném podprostoru

- Start v aproximaci x_0 . V každém kroku

$$x_{k+1} = x_k + \gamma_k p_k.$$

- Rozepsáním

$$x_{k+1} = x_0 + \gamma_0 p_0 + \cdots + \gamma_k p_k.$$

- Pro chyby $e^{(k+1)} \equiv x - x_{k+1}$ platí

$$e^{(k+1)} = e^{(0)} - (\gamma_0 p_0 + \cdots + \gamma_k p_k).$$

- γ_k umíme volit. **Jak volit směrové vektory?** Chceme, aby

$$\|e^{(k+1)}\|_A = \left\| e^{(0)} - \sum_{j=1}^k \gamma_j p_j \right\|_A$$

byla co nejmenší.

Kdy je $\|e^{(k+1)}\|_A$ minimální?

$$e^{(k+1)} = e^{(0)} - \sum_{j=1}^k \gamma_j p_j.$$

- $\|e^{(k+1)}\|_A$ bude minimální, odečteme-li od $e^{(0)}$ její projekci do

$$\mathcal{S}_{k+1} = \text{span}\{p_0, \dots, p_k\},$$

ortogonalitu měříme **energetickým skalárním součinem**.

Požadujeme, aby platilo

$$\langle e^{(k+1)}, p_j \rangle_A = 0, \quad j = 0, \dots, k.$$

- Vektory **ortogonální** v $\langle \cdot, \cdot \rangle_A$ se nazývají **sdužené**.
- **Cíl**: metoda, pro kterou bude **chyba** v každém kroku **sdužená** ke všem předchozím směrovým vektorům.

Směrové vektory stačí volit sdružené

- Zajímá nás, jak docílit splnění podmínky

$$\langle e^{(k+1)}, p_j \rangle_A = 0, \quad j = 0, \dots, k.$$

- Víme, že $\langle e^{(1)}, p_0 \rangle_A = 0$. V následujícím kroku platí

$$e^{(2)} = e^{(1)} - \gamma_1 p_1,$$

díky volbě γ_1 je $\langle e^{(2)}, p_1 \rangle_A = 0$. Chceme $\langle e^{(2)}, p_0 \rangle_A = 0$, tj.

$$0 = \langle e^{(2)}, p_0 \rangle_A = \langle e^{(1)}, p_0 \rangle_A - \gamma_1 \langle p_1, p_0 \rangle_A = \gamma_1 \langle p_1, p_0 \rangle_A.$$

Postačující podmínka: $\langle p_1, p_0 \rangle_A = 0$.

- Indukce: Podmínky $\langle e^{(k+1)}, p_j \rangle_A = 0$ lze docílit, volíme-li

$$\langle p_i, p_j \rangle_A = 0 \quad \forall i \neq j.$$

Konkrétní volba směrových vektorů

- Krok k : máme A -ortogonální vektory $p_0, \dots, p_k$, aproximace $x_0, \dots, x_k$ a rezidua $r_0, \dots, r_k$, umíme sestavit x_{k+1} a r_{k+1} . Jak rozšiřovat prostor směrových vektorů, **jak volit** p_{k+1} ?
- K rozšíření použijeme **reziduový vektor** r_{k+1} . Volme

$$p_{k+1} = r_{k+1} - \sum_{j=0}^k c_{k,j} p_j ,$$

koeficienty $c_{k,i}$ určíme tak, aby $\langle p_{k+1}, p_j \rangle_A = 0$, tj.

$$c_{k,j} = \frac{\langle r_{k+1}, p_j \rangle_A}{\langle p_j, p_j \rangle_A} , \quad j = 0, \dots, k .$$

Shrnují

Tím je formálně definována **metoda sdružených gradientů**

Dáno A, b, x_0

$r_0 = b - Ax_0, p_0 = r_0$

Pro $k = 0, \dots$

$$\gamma_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \gamma_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \gamma_k A p_k$$

$$c_{k,j} = \frac{\langle r_{k+1}, p_j \rangle_A}{\langle p_j, p_j \rangle_A}, \quad j = 0, \dots, k$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} - \sum_{j=0}^k c_{k,j} p_j$$

Kdy skončí? Nalezne řešení? Lze zapsat efektivněji?

Metoda sdružených gradientů nalezne řešení

nejvýše po n krocích

Věta

Metoda sdružených gradientů **nalezne řešení** nejvýše po n krocích.



k -tý **Krylovův podprostor** generovaný maticí A a vektorem v ,

$$\mathcal{K}_k(A, v) \equiv \text{span}\{v, Av, A^2v, \dots, A^{k-1}v\}.$$

Lemma o rovnosti podprostou

Po k krocích sdružených gradientů (s $r_j \neq 0$ v každém kroku) platí

$$\text{span}\{p_0, \dots, p_k\} = \text{span}\{r_0, \dots, r_k\} = \mathcal{K}_{k+1}(A, r_0).$$



Ortogonalita reziduí

- $e^{(j)} \perp_A \text{span}\{p_0, \dots, p_{j-1}\} \Rightarrow$

$$e^{(j)} \perp_A \mathcal{K}_j(A, r_0) \Leftrightarrow r_j \perp \mathcal{K}_j(A, r_0),$$

neboť $Ae^{(j)} = r_j$.

- Jelikož $\mathcal{K}_j(A, r_0) = \text{span}\{r_0, \dots, r_{j-1}\}$, platí

$$r_j \perp \text{span}\{r_0, \dots, r_{j-1}\}.$$

- Metoda sdružených gradientů postupně počítá
 - **A-ortogonální bázi** $\mathcal{K}_{j+1}(A, r_0)$ (směrové vektory p_k),
 - **ortogonální bázi** $\mathcal{K}_{j+1}(A, r_0)$ (reziduové vektory r_k).

Formálně definovaná CG

Lze zapsat efektivněji?

Dáno A, b, x_0

$r_0 = b - Ax_0, p_0 = r_0$

Pro $k = 0, \dots$

$$\gamma_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \gamma_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \gamma_k A p_k$$

$$c_{k,j} = \frac{\langle r_{k+1}, p_j \rangle_A}{\langle p_j, p_j \rangle_A}, \quad j = 0, \dots, k$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} - \sum_{j=0}^k c_{k,j} p_j$$

Efektivní implementace

$$p_{k+1} = r_{k+1} - \sum_{j=0}^k c_{k,j} p_j$$

Lemma o nulovosti $c_{k,j}$ koeficientů

Pro $j = 0, \dots, k-1$ jsou koeficienty $c_{k,j}$ nulové.



- Označme $\delta_{k+1} \equiv -c_{k,k}$, potom

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \delta_{k+1} p_k.$$

- Platí 

$$\gamma_k = \frac{\langle r_k, r_k \rangle}{\langle p_k, A p_k \rangle}, \quad \delta_{k+1} = \frac{\langle r_{k+1}, r_{k+1} \rangle}{\langle r_k, r_k \rangle}.$$

Metoda sdružených gradientů

input A, b, x_0

$r_0 := b - Ax_0$

$p_0 := r_0$

for $k = 0, 1, 2, \dots$ **do**

$\gamma_k := \frac{r_k^* r_k}{p_k^* A p_k}$

$x_{k+1} := x_k + \gamma_k p_k$

$r_{k+1} := r_k - \gamma_k A p_k$

$\delta_{k+1} := \frac{r_{k+1}^* r_{k+1}}{r_k^* r_k}$

$p_{k+1} := r_{k+1} + \delta_{k+1} p_k$

end for

Konvergence metody sdružených gradientů

Chyba zapsaná pomocí polynomu

- Jak rychle se aproximace $x_1, x_2, \dots$ přibližují k řešení x ?
- $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ je generován vektory $r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0 \rightarrow$

$$v \in \mathcal{K}_k(A, r_0) \quad \Rightarrow \quad v = q(A)r_0,$$

kde q je polynom stupně nejvýše $k - 1$.

- Potom

$$x_k = x_0 + q(A)r_0,$$

$\deg q \leq k - 1$, a chybu $e^{(k)} \equiv x - x_k$ lze psát jako

$$\begin{aligned} e^{(k)} &= (x - x_0) - (x_k - x_0) \\ &= e^{(0)} - Aq(A)e^{(0)} \\ &= p(A)e^{(0)}, \end{aligned}$$

kde $p(z) \equiv 1 - zq(z)$, $\deg q \leq k$, $p(0) = 1$.

Konvergence metody sdružených gradientů

Použití spektrálního rozkladu

- **Minimalizační vlastnost** metody

$$\begin{aligned}\|x - x_k\|_A &= \min_{y \in x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|x - y\|_A, \\ \|e^{(k)}\|_A &= \min_{p \in \pi_k} \|p(A)e^{(0)}\|_A,\end{aligned}$$

kde π_k je množina všech polynomů, $\deg p \leq k$, $p(0) = 1$.

- Uvažujme spektrální rozklad $A = Q\Lambda Q^T$, a definujme vektor

$$\omega = [\omega_1, \dots, \omega_n]^T \equiv Q^T r_0.$$

Potom 

$$\|p(A)e^{(0)}\|_A^2 = \sum_{j=1}^n \frac{|\omega_j|^2}{\lambda_j} p(\lambda_j)^2.$$

Konvergence metody sdružených gradientů

Dva rozhodující faktory

- Dosazením

$$\|e^{(k)}\|_A = \min_{p \in \pi_k} \left(\sum_{j=1}^n \frac{|\omega_j|^2}{\lambda_j} p(\lambda_j)^2 \right)^{1/2}.$$

- **Konvergence CG závisí na** dvou faktorech,
 - na velikosti *projekcí* $|\omega_j|$ vektoru r_0 do báze vlastních vektorů,
 - na *rozložení vlastních čísel* matice A .
- **Jak odhadnout veličinu** na pravé straně? Z nerovnosti

$$\|p(A)e^{(0)}\|_A = \|p(A)A^{1/2}e^{(0)}\| \leq \|p(A)\| \|e^{(0)}\|_A$$

plyne

$$\frac{\|e^{(k)}\|_A}{\|e^{(0)}\|_A} \leq \min_{p \in \pi_k} \|p(A)\|.$$

Konvergence metody sdružených gradientů

Odhad (omezení) pravé strany

$$\frac{\|e^{(k)}\|_A}{\|e^{(0)}\|_A} \leq \min_{p \in \pi_k} \|p(A)\|.$$

- Využijeme-li spektrálního rozkladu matice A , dostaneme

$$\begin{aligned}\|p(A)\| &= \|p(Q\Lambda Q^T)\| = \|Qp(\Lambda)Q^T\| \\ &= \|p(\Lambda)\| = \max_{i=1,\dots,n} |p(\lambda_i)|.\end{aligned}$$

a proto

$$\frac{\|e^{(k)}\|_A}{\|e^{(0)}\|_A} \leq \min_{p \in \pi_k} \max_{i=1,\dots,n} |p(\lambda_i)|.$$

- Odhad platí $\forall b$, dostali jsme **min-max aproximační problém** na **diskrétní množině bodů** (na spektru matice A).

Konvergence metody sdružených gradientů

Hrubší omezení (méně informativní odhad)

- Uvažujme **místo diskrétní množiny** bodů **interval** obsahující všechna vlastní čísla,

$$\min_{p \in \pi_k} \max_{i=1, \dots, n} |p(\lambda_i)| \leq \min_{p \in \pi_k} \max_{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_n]} |p(\lambda)|.$$

- Řešení** problému **na intervalu** $\rightarrow$ **známo**, pomocí vhodně posunutých a škálovaných Čebyševových polynomů, platí

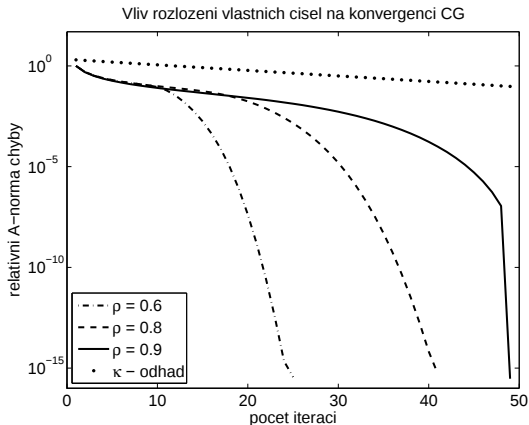
$$\frac{\|e^{(k)}\|_A}{\|e^{(0)}\|_A} \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1} \right)^k,$$

kde $\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\| = \lambda_n / \lambda_1$.

- Důsledek: Je-li $\kappa(A)$ **malé**, **CG konverguje rychle**.

Konvergence metody sdružených gradientů

Špatná podmíněnost matice A nemusí implikovat pomalou konvergenci.



Konvergence závisí na rozložení vlastních čísel.

$$\lambda_j = \lambda_1 + \frac{j-1}{n-1}(\lambda_n - \lambda_1)\rho^{n-j}, \quad j = 2, 3, \dots, n-1.$$

Předpodmínění

- **Kdy je konvergence CG rychlá?**
 - Malé číslo podmíněnosti.
 - Vhodné rozložení vlastních čísel.
 - Vektor pravé strany má málo nenulových komponent.
- **Smysl předpodmínění:** modifikace soustavy za účelem **zrychlení konvergence**.
- **Jak modifikovat soustavu $Ax = b$?** Modifikovaná matice soustavy by opět měla být symetrická a pozitivně definitní. Nechť C je libovolná regulární matice.

$$Ax = b \quad \Rightarrow \quad (C^{-1}AC^{-T})(C^T x) = C^{-1}b.$$

Máme systém $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$ se symetrickou pozitivně definitní $\hat{A}$.
Mezi řešeními platí vztah $x = C^{-T}\hat{x}$.

Předpodmínění

Transformace vektorů

- CG na $\hat{A}\hat{x} = \hat{b} \rightarrow$ získáme aproximace řešení $\hat{x}$. Potom jsou

$$x_k \equiv C^{-T} \hat{x}_k$$

aproximace původního řešení x .

- Navíc platí

$$\begin{aligned} \|\hat{x} - \hat{x}_k\|_{\hat{A}}^2 &= (\hat{x} - \hat{x}_k)^T \hat{A} (\hat{x} - \hat{x}_k) \\ &= (C^T x - C^T x_k)^T C^{-1} A C^{-T} (C^T x - C^T x_k) \\ &= \|x - x_k\|_A^2. \end{aligned}$$

Pokud $\hat{x}_k$ aproximuje dobře $\hat{x}$, pak x_k dobře aproximuje x .

- Zajímají nás **vektory vztahující se k původní soustavě**
 $Ax = b$, položme $p_k \equiv C^{-T} \hat{p}_k$, $r_k \equiv C \hat{r}_k$, $z_k \equiv C^{-T} C^{-1} r_k$.
Přepišme CG aplikované na $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$ do nové podoby (cvičení),
ve kterém využijeme právě zavedených vektorů.

Algoritmus PCG

Předpokládaná metoda sdružených gradientů

input A, b, x_0, C

$r_0 := b - Ax_0$

$z_0 := C^{-T}C^{-1}r_0$

$p_0 := z_0$

for $k = 1, 2, \dots$ **do**

$\hat{\gamma}_{k-1} := \frac{z_{k-1}^T r_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}}$

$x_k := x_{k-1} + \hat{\gamma}_{k-1} p_{k-1}$

$r_k := r_{k-1} - \hat{\gamma}_{k-1} A p_{k-1}$

$z_k := C^{-T}C^{-1}r_k$

$\hat{\delta}_k := \frac{z_k^T r_k}{z_{k-1}^T r_{k-1}}$

$p_k := z_k + \hat{\delta}_k p_{k-1}$

end for

Poznámky k předpokládání

- Snadnou manipulací dostaneme

$$r_k = C \hat{r}_k = b - Ax_k.$$

- Nepočítáme inverze matic C a C^T ! Platí

$$z_k = C^{-T} C^{-1} r_k \Leftrightarrow CC^T z_k = r_k,$$

řešíme soustavu lineárních algebraických rovnic

$$Cy = r_k \quad \text{a} \quad C^T z_k = y.$$

Předpodmínění

Volba matice C

- **Požadavky**

- ① **Rychlá konvergence** CG aplikované na $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$, ideálně $\hat{A} = C^{-1}AC^{-T} \approx I$.
 - ② **Soustavy** $Cy = r_k$ a $C^T z_k = y$ musí být **rychle řešitelné**, řádově v $O(n)$ operacích.
 - ③ **A řídká** $\Rightarrow$ **C** musí být **řídká** (jinak vzrostou paměťové i výpočetní nároky).
- **Předpodmínění** $\rightarrow$ v jistém smyslu jde o **kombinaci přímých metod** (řešíme soustavy s C a C^T) a **iteračních metod** (CG).
 - Soustavy s C a C^T je **možné řešit i iteračně** (dostáváme tzv. **metody s vnější a vnitřní iterací**).

Neúplný Choleského rozklad

Jedna z možností, jak volit matici C

- **Choleského rozklad** $A = LL^T$.
- A řádká, L **nemusí být řádká**, výpočet L často neekonomický.
- **Idea**: **aproximovat** L dolní trojúhelníkovou C , která je blízká L a zachovává předepsanou řádkost a

$$A \approx CC^T,$$

použijeme ji k předpodmínění metody sdružených gradientů.

- Jeden způsob: položit $c_{i,j} = 0$ **vždy, když je** $a_{i,j} = 0$ (definujeme nenulovou strukturu matice C) $\rightarrow$ označení IC(0), v Matlabu C^T získáme příkazem `cholinc(A,'0')`.

Neúplný Choleského rozklad $IC(0)$

```
input  $A$   
 $C := \text{tril}(A)$   
for  $k = 1 : n$  do  
   $c_{k,k} := \sqrt{c_{k,k}}$   
  for  $i = k + 1 : n$  do  
    if  $c_{i,k} \neq 0$  then  
       $c_{i,k} := \frac{c_{i,k}}{c_{k,k}}$   
    end if  
    for  $j = k + 1 : i$  do  
      if  $c_{i,j} \neq 0$  then  
         $c_{i,j} := c_{i,j} - c_{i,k} c_{j,k}^T$   
      end if  
    end for  
  end for  
end for
```

Další varianty neúplného Choleského rozkladu

- Dovolíme větší zaplnění matice C . Dva základní principy.
 - **Zobecnění IC(0).** Nenulovou strukturu C rozkladu IC(1) určíme z nenulové struktury matice, jež vznikne (formálním) vynásobením faktorů rozkladu IC(0). Obecně IC(k).
 - Můžeme **vzít v úvahu velikosti prvků** matice C , položíme malé prvky ve spočtené části faktoru rovny nule, velikost malých prvků vyhodnotíme pomocí zadané tolerance `droptol`. Matlabovským příkazem `cholinc(A,droptol)` získáme matici C^T s prvky $c_{i,j}$ jejichž velikosti jsou zdola omezeny podle

$$|c_{i,j}| \geq \text{droptol} \cdot \frac{\|a_j\|}{c_{ii}},$$

kde a_j označuje j -tý sloupec matice A .

Volba počáteční aproximace řešení

- Vhodná počáteční aproximace řešení **může urychlit nalezení** dobré aproximace řešení x_k .
- **Pozor** na vnesení **irelevantní informace** vzhledem k řešení. Při nevhodné volbě x_0 totiž může dojít k tomu, že

$$\|x - x_0\|_A \gg \|x\|_A .$$

- **Nutné škálovat** nenulovou počáteční aproximaci tak, aby

$$\|x - \alpha x_0\|_A \leq \|x\|_A ,$$

Platí (cvičení), že pro

$$\alpha = \frac{b^T x_0}{x_0^T A x_0}$$

je $\|x - \alpha x_0\|_A$ minimální.

- Není-li k dispozici vhodná počáteční aproximace, volíme **standardně** $x_0 = 0$.

Zastavovací kritéria

- **Přirozenou konvergenční charakteristikou** je

$$\frac{\|x - x_k\|_A}{\|x\|_A},$$

není obecně možné vyjádřit (neznáme přesné řešení x).
Existují techniky jak tuto veličinu odhadovat.

- **Normovaná relativní zpětná chyba**

$$\beta(x_k) = \frac{\|r_k\|}{\|b\| + \|A\|\|x_k\|}.$$

udává **velikosti nejmenších možných změn** vstupních dat A a b takových, že x_k je přesným řešením

$$(A + \Delta A)x_k = b + \Delta b.$$

Velikost změn měříme pomocí podílu norem $\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}$ a $\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$.

Zastavovací kritéria

- **Třetí charakteristika**

$$\frac{\|r_k\|}{\|b\|}$$

reprezentuje **relativní velikost změny pravé strany**,

$$Ax_k = b - r_k = b + \Delta b.$$

- Výběr zastavovacího kritéria i velikosti tolerance tol by měl být vždy **propojen s řešeným problémem** reálného světa.

Vliv konečné aritmetiky

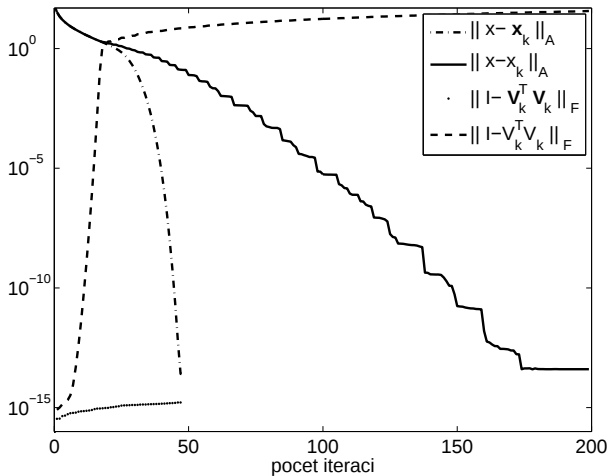
- V CG **ortogonalizujeme** vznikající r_k pouze proti r_{k-1} , p_k A -ortogonalizujeme pouze proti p_{k-1} . Ortogonalita proti ostatním vektorům plyne ze symetrie A , **lze očekávat, že** v aritmetice s konečnou přesností **nebude zachována**.
- **Vliv konečné aritmetiky** je **značný** a nemůže být ignorován.
- Příklad, vykreslíme ztrátu ortogonality mezi $r_0, \dots, r_{k-1}$ měřenou pomocí

$$\|I - V_k^T V_k\|_F,$$

$V_k \rightarrow$ sloupce tvoří normované reziduové vektory $r_j / \|r_j\|$.

Vlivem konečné aritmetiky

Zpoždění konvergence, ztráta ortogonality, hladina limitní přesnosti



Analýza chování CG v konečné aritmetice

Předmětem mnoha prací

- **Paige 1972** – ztráta ortogonality v Lanczosově metodě.
- **Greenbaum a Strakoš** – na **výpočty FP CG** aplikované na systém $Ax = b$ lze hledět jako na **výpočty přesné CG** aplikované na jiný systém $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$, kde $\tilde{A}$ je symetrická pozitivně definitní matice.
- Ve výše uvedeném smyslu nahrazení původní úlohy $Ax = b$ větší úlohou $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ zůstávají **některé teoretické vlastnosti CG zachovány** i v konečné aritmetice.
- Vlivem konečné aritmetiky dochází ke **zpoždění konvergence**, případně k jejímu **zastavení na hladině** maximálně dosažitelné přesnosti.

Cvičení

- Ukažte, že funkce $g(\gamma) = \mathcal{F}(x_k + \gamma p_k)$ nabývá minima pro

$$\gamma = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}.$$

a že platí

$$r_{k+1} \perp p_k.$$

8.2 Ukažte, že pro směrové vektory počítané metodou CG platí $p_j^T p_i > 0$. Na základě této vlastnosti dokažte:

- 1 Euklidovská norma chyby $\|x - x_k\|$ v metodě CG je monotónně klesající.
- 2 Je-li $x_0 = 0$, potom je $\|x_k\|$ ostře rostoucí.

8.3 Uvažujme CG algoritmus pro řešení systému $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$.

Definujme $x_k \equiv C^{-T}\hat{x}_k$, $p_k \equiv C^{-T}\hat{p}_k$, $r_k \equiv C\hat{r}_k$ a $z_k \equiv C^{-T}C^{-1}r_k$. Ukažte, že pomocí nově definovaných vektorů lze algoritmus přepsat do podoby algoritmu PCG.

8.5 Uvažujme soustavu $Ax = b$ se symetrickou pozitivně definitní maticí a počáteční aproximací x_0 . Ukažte, že $\|x - \alpha x_0\|_A$ je minimální pro

$$\alpha = \frac{b^T x_0}{x_0^T A x_0}$$

- Ukažte, že A -norma chyby je monotónně klesající a že platí

$$\|x - x_k\|_A^2 = \gamma_k \|r_k\|^2 + \|x - x_{k+1}\|_A^2.$$

Ukažte, že pro celé kladné číslo d platí,

$$\|x - x_k\|_A^2 = \sum_{j=k}^{k+d-1} \gamma_j \|r_j\|^2 + \|x - x_{k+d}\|_A^2.$$