Gradientm' iteracin' netody

· zakladní vyslenka: pro synetnické a pozitivně detinitní natice de nalezení resení Axzb ekvivalentní

nalezeni minina kvadratické forny
$$\phi(x) = \frac{1}{2} x^{T}Ax - x^{T}b, \quad x \in \mathbb{R}^{n}$$

he bot
$$\nabla \phi(x) = \frac{1}{2} \left(Ax + (\overline{X}A)^T \right) - b = Ax - b = 0$$

pro $A = A^T$ (sy-etrické matice)

· hleddre priblishe resent iterative

volbou poè. Xo (např. Xo=0) a pak vhodného sněru pk v každé kroho stír, te rinimalizajere $\phi(x_k + \propto p_k)$ vzhleden k \propto heboli $\frac{\partial \phi(x_k + \alpha p_k)}{\partial x_k} = 0$

protoèle $\phi(x_k + \alpha p_k) = \frac{1}{2}(x_k + \alpha p_k)^T A(x_k + \alpha p_k) - (x_k + \alpha p_k)^T b$ = \frac{1}{2} \times_k \tau_k - \times_k b + \frac{\times}{2} (\rho_k \tau_k + \times_k \tau_k \rho_k) - \alpha \rho_k b + \frac{\times^2}{2} \rho_k \tau_k \rho_k \rho_k \rho_k \rightarrow \frac{\times_k \tau_k + \times_k \tau_k \rho_k \rho

 $= \frac{1}{2} \times_{\kappa}^{T} A \times_{\kappa} - \times_{\kappa}^{T} b + \infty \left[p_{\kappa}^{T} (A \times_{\kappa} - b) \right] + \frac{\alpha^{2}}{2} p_{\kappa}^{T} A p_{\kappa}$

$$0 = \frac{20}{20} = -p_k^T r_k + \alpha p_k^T A p_k = \infty = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$$

kde jsne oznacili zbythovy (rezidualni) vektor v k-te' iteraci

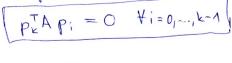
· volba smère pr:

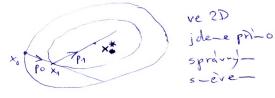
netoda nejvetsího spadu jdene ne smeru Pp



neboli Vp(xx) = Axx-b = -rx takée volice pe=rk $\alpha \text{ tedy} \qquad \alpha = \frac{r_k^T r_k}{r_k^T A r_k}$

(conjugate gradient - CG) metoda sdružených gradientů jdene v tev. A-sdruženém sneru tj voli-e pr tak jaby





a) metoda největšího spadu lepe: re=b-Axe=b-A(xe-1+xe-1 re-1) pri-ocare: = +k-1 - xk-1 A +k-1 zvolitye Xo a tedy pro k=1,2 ... zvolime xo rk-1 = b-Axx-1 (pokud male ro= b-Axo pro k=1,2, ---Wk-1 = Ark-1 X = X K-1+ XK-1 /K-1 $\alpha_{k-1} = \frac{\Gamma_{k-1} \Gamma_{k-1}}{\Gamma_{k-1} W_{k-1}}$ ne moc dobre kvůli dvema matic. nasobemi-. pro hire pode where matice A 2(A) = max [hi] >1 => protoble elipsoidy vidy ide-e leal. po-ala konvergence ridy jde-e kolno na predchozí s-èr b) metoda sdružených gradientů motivace volby PTA Po=0 ve 2D:

X k = X k-1 + X k-1 + K-1 rk = rk-1 - xk-1 Wk-1 pohod 11tx11 < E konec $r_{k-1}r_k = r_{k-1}r_{k-1} - \alpha_{k-1}r_{k-1} = 0$ cos neni dobre



protoze $\nabla \phi(x_1) = -t_1$ je kol-é na po, dostaval-e 0 = pot = po (b-Ax) = po (Ax - Ax) = po A(x - x) = a po A pr = 0 díhy sy-etrichosti A mane a dily sy-etrichosti A name pTA po= 0 e prilocara volba ve 2D

ovser pro m>2 ne-àre jednoznachou volbu protoge neznate x* pokud bude-e volit pr tak, aby bylo A-sdružece s po,--, Pr-1 tak bude-e minimalizorat pk) v prostoru xo+copo+ ... + Cope a optimu- bode Xx = x0 + x0 p0 + ... + xx px

po a pr joor lin. nezávisle s trori rovino, litera reze elipsoidy => soustred-e' elipsy v rovine -> stred bade v x2 atd.] pokud neutere z elips je kruznice, pak se dustane-e hhed do stredu, coè je podud);=); pro nejale i +j , h; ulastní
cisla A -> rychlejší konvergence

algorithus metody sdrožených gradientů (bez předpodnímemí)

zvol Xo (napr. 0) ro = b - A xo po = ro , yo= ro ro pro k=1,21 ---(WK-1 = A PK-1 toto jako X = X k-1 + X k-1 Pk-1 u metody nejvetsiho spadu rk = rk-1 - xk-1 Wk-1 pokud Irall < E konec (gr = rkrk unceni noveho Bk-1 = 8k/8k-1

L Pk = tx+ Bk-1 Pk-1 sverv · Lze uhazat (vit napr. Trefethen, Bau: Numerical Linear Algebra) Ze veletory generorare metodor sdruž. grad. splārji (polud reto, pro re=0 již mal-e teseni)

- 1) Pr Api=0 pro +j=0,...k-1
- 2) rkrj = 0 pro tj = 0,...,k-1
- 3) podprostory & (poj ... pr-1), & (ro, Aro, ... Ak-10) a & (Aeo, ..., Akeo) jsou stejne (eo=x-xo) a tento podprostor se nazyva'kti/Kryloviv prostor (A,ro) (pokud volne xo=0, pakro=b a jdeo (A,b))

Naznak dékazu: indoka! v k;

- 3) = Pk = rk + Bk-1 Pk-1 Pk-1 Plyne ise & (populpk-1) = & (ro, r1, ..., rk-1) az r = r - x - x - Ape-1 , price-z po=ro plyne = & (ro, Aro, - · A ro) a dily eo=x-xo rate Aeo=Ax-Axo=b-Axo=To
- 2) sporte = tr; = (rk-1 dk-1) Apr-1/rs = tr-1; xk-1 Pr-1 = 10 pro j<k-1 dle indukce ope j=k-1 diky xx== TK-1 K-1
 PK-1 Ark-1 coè pyre = pr. Apr. = pr. Ar. + Ben pr. Apr. 2 "o die indukce
- 1) PrAPi= rrApi+Br-APi= -0 projek-1 dle indukce a diky 2), mebot Api= 1 (ri-ri+1) o projek-1 mebot Bk-1 TETR- TEAPL-1 & TETR- TECH-1 - XK-1 TEAPK-1

N) nejde v prave- slove s-yslu

o iteración etodo, v presue

aritmetice skonate negy'se po n'evocich

ausak a) dily racker. clybalnení konvergence zarrocena

- b) casto konversuje mnohe rychleji (k dostatečne president resent), zvlaste polind matici predpodinile
- 2) opet poure jedno násobení A.V (obykle jako subroutina od uživatele) a 2 skalarm' soverny, nebot -13to PK-1 rk-1 je pouzito rk-1 rk-1, protoze

PK-2 1/k-1 = 0 nebo primo výpoctem Pu-2 ru-1 = Pt-2 (ru-2 - xx-2 Apu-2) = 0 dly volbe x = Pira

```
Predpodmineni (preconditioning)
· zvláště u metod jako je metoda sdruž. gradie te apod. je předpodm.
    Zcela zasadní pro rychlou konversenci, nebot rychlost konvergence
    Zavisi na cisto podminerosti natice &(A)= NAIIII A-11 = [A-ax]

Zavisi na cisto podminerosti natice &(A)= NAIIII A-11 = [A-ax]

pro norualini matice

AA = AA
    a predpodninent disto podninenosti enensuje e.
                                                                           coèpintipro SPD natice
                 resile M'Ax = M'A (coèje ekviralentul problem), kde M'je snadne"
a Zakl. -ysterka: -isto Ax=6
    orse- i když M a A jsou SPD - tice, tak M'A vænerusi být SPD
    navic konstruorat M'A prino music narusit ridhost latice => A a M' se aplikuji
  « existy) obece postupy, mapr. M = dias(A), pohod se zněhí díslo podmírenost
                                                    (maturguje např. pro Tu u = 134 * nebot diag Tu = 2I
                                                                        coènezeni zistopodnin.
                                                                        Jak X -in tak max se vydělí 2)
    ale vel-i casto a boineji se
     pouzivají matice M site na -in
          problé bez interakce a pak ses interakce iteroje apodi)
      dané-u fyz. problém (nepr. nytesí se
   · pokud M'A není SPD, lze řesít ((C) AC) (Cx) = (C) To pro nesinsulární
(ale A no SPD)
         (ale A je SPD)
        protoze nymi je A tale symetrické (pro lib. C) a pozitivne definitní
        nebot \widetilde{A}^T = ((\overline{c}^1)^T A \overline{c}^1)^T = (\overline{c}^1)^T A \overline{(c^1)}^T = \widetilde{A}
             a \mathbf{v}^{\mathsf{T}} \tilde{A} \mathbf{v} = \mathbf{v}^{\mathsf{T}} (\tilde{c}^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}} \mathbf{A} \tilde{c}^{\mathsf{T}} \mathbf{v} = (\tilde{c}^{\mathsf{T}} \mathbf{v})^{\mathsf{T}} \mathbf{A} (\tilde{c}^{\mathsf{T}} \mathbf{v}) > 0 prolib. \mathbf{v}
        jakje to s čískom podmíněnosti Ã? je dáno vlastníh i čísly à (je SPD)
             a ty jsou stejne jako pro matici
                                   c1Ãc = c7(c1)TA = (ctc) A
                   => pokud bycho- měli rozu-ngu SPD natici M pak lze
                         brat CTC jako jeji Choleského rozklad
          ovie- le obard, re tento rosklad nevi nutro delat, a le prilo
                                                            XK = ETXK
           poulit alsoritus
                                                    Vde
              ro = 6-Axo
                                                            PK = CIPK
              Vyres M=0=10-> 70
                                                            WE = ET WE
                                                             re = cTrk
              pro k=1,2, ...
                  WK-1 = APK-1
                  ak-1 = (2k-1 rk-1)/(pk-1 Wk-1)
                  X = X x - 1 X x - 1 Px - 1
                  the = re-1 - xe-1 We-1 -> pokud Il rell < & konec
                  Vyres Mak=tk -> 7k
                  BK-1 = (ZErk)/(26-1 rk-1)
```

PE = Ze +BK-1PK-1

Konvergence metody sdružených gradiento (CG)

o protoze pracujeme se synetrickými, pozitivné definitními maticemi, můžeme pomocí těchto matic definovat normu

11 UNA = VVTAV , neboť vTAV je nulo povze pro v=0

ta se povzíva při rozboru metody CG (conjugated gradients)

· prochybu e = Xk-X* přibližného řesení Xk v k-tél krohu, X* je přesné řesení Ax*=b, dostaneme

$$\begin{aligned} \|e_{k}\|_{A}^{2} &= (x_{k} - x^{*})^{T} A (x_{k} - x^{*}) = \\ &= x_{k}^{T} A x_{k} - 2 x_{k}^{T} \underbrace{A x_{k}^{*}}_{b} + (x^{*})^{T} A x^{*} = \\ &= 2 \phi (x_{k}) + (x^{*})^{T} A x^{*} \qquad \text{, ide } \phi(x) = \frac{1}{2} x^{T} A x - x^{T} b \end{aligned}$$

a tedy pokud minimalizujeme $\phi(x)$, minimalizujeme tézchybu danou A-normou IIellA.

· řešení hledáme na prostoru Xo+Kk, kde

neboli

z čehož odectením x*

neboli

$$e_k = P_k(A) e_0$$
, kde $P_k(z) = 1 + c_1 z + ... + c_k z^k$ jo

polynom z prostoru $P_k = \{P(z) \text{ stupne nejsyse} k \text{ pro nej } P(0) = 1\}$

* pomoci metody CG konstruujene primo polynom Pk.

ktery minimalizuje IIeklia= IIPk(A)eolla na prostoru Pk

· chceme-li najit odhad chyby v k-tén kroku CG, staci najit polynom v Pk, pro který umíme P(A) nejak rozumne odhadnout, c'inà dostanene odhad i pro llexla nebot pro lib. Pre Pr plat' level A < li Pr (A) eoll A - protore A je diagonalizovatelna (dihy SPD), tj. A=VNV, kde N=diag (xj) a xj, "j=1,..,n jsov vlastní čísla A, mittene post P (A) = VP(N)VT, pro lib. polynom $\|P(A)e_o\|_A^2 = e_o^T P(A)^T A P(A) e_o =$ $= e_{\circ}^{\mathsf{T}} \mathsf{VP}(\mathsf{N})^{\mathsf{T}} \underbrace{\mathsf{v}^{\mathsf{T}} \mathsf{A} \mathsf{V}}_{\mathsf{A}} \mathsf{V} \mathsf{P}(\mathsf{N}) \mathsf{V}^{\mathsf{T}} e_{\circ} =$ = $e_o^T V \operatorname{diag} (\lambda_i P(\lambda_i)^2) V^T e_o \leq$ < max P(x) etV/Ve = max P(x) " Hell A - odhad tmůřeme udělat tak , ze vybereme polynom P(z), abychom snadno odhadli jeho velikost ve vlastnich číšlech) natice A: pro k=1 voline napr. Pr(2) = 1+c12 tak, aby nablval maximalnich hodnot na krajich intervalu $\langle \lambda_1, \lambda_n \rangle$, kde leží vsechna λ_j $1+c_1\lambda_n = -1-c_1\lambda_1$ neboli mosi být $\widetilde{P}_1(z) = 1 - \frac{2z}{\lambda_1 + \lambda_n}$ a pro $\max_{j} |\widetilde{P}_{\mathbf{A}}(\lambda_{j})| = 1 - \frac{2\lambda_{1}}{\lambda_{1} + \lambda_{n}} = \frac{\lambda_{n}/\lambda_{1} - 1}{\lambda_{n}/\lambda_{1} + 1} = \frac{2(A) - 1}{2(A) + 1}$ rde & (A) je cislo podrinehosti A a konstruovat pouoci pro obecné k lze takový polyno-Tinterval (A, 1, A, debysevova polynomu stapně k $T_{\kappa}\left(\frac{\lambda_{n}+\lambda_{n}-2+1}{\lambda_{n}-\lambda_{n}}\right)$ ("Normalizace $\widetilde{P}_{k}(z) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_{n} + \lambda_{1}}}$ e aby v == 0 Lbylo Pk(0) = 1 le pak ukazat (viz např. Trefethen), de $\max_{j} |\widetilde{P}_{k}(\lambda_{j})| = \widetilde{P}_{k}(\lambda_{1}) = \frac{T_{k}(\lambda_{1})^{1/4}}{T_{k}(\frac{\lambda_{n}+\lambda_{1}}{\lambda_{n}-\lambda_{1}})} = 2\left[\left(\frac{\sqrt{2k}+1}{\sqrt{2k}-1}\right)^{k} + \left(\frac{\sqrt{2k}+1}{\sqrt{2k}-1}\right)^{k}\right]^{-1} \leq 2\left(\frac{\sqrt{2k}+1}{\sqrt{2k}+1}\right)^{k}$ $\|e_k\|_A \leq \|\widetilde{P}_k(A)e_o\|_A \leq 2\left(\frac{\sqrt{2\kappa}-1}{\sqrt{2\kappa}+1}\right)\|e_o\|_A = 2\left(1-\frac{2}{\sqrt{2\kappa}+1}\right)^k\|e_o\|_A$ a provircitor presnost a rozumne ze potrebujeme O(ta) iteració odhad, mosée

Modifikace metody sdružených gvadientů

- · standardní verze CG, poretšinou s předpodníněním, funguje pro symetrické, pozitívně definitní matice
- primocare je zobecnení na hermitovske, pozitivně definitní matice, kdy jen transpozici nahradine hermitovským sdružením tj. bode Jk=rkrk a xk-1=8k-1/(pk-1 Wk-1)
- v principu by slo pouzit CG na libovolný syster Ax=b

 když ho vynásobine AT, případně At, tj. bude-e

 resit normální rovnice (měli jsne je u metody nejnenších čtverců)

 ATA x = ATb, nebo ATA x = Atb pro ko-plexu, matice

 nebot ATA a ATA jsou již synetricke pozitívně definitní matice

 problém však je , že číslo podníněností se (ATA) = se (A),

 a tedy pro šprtně podníněnou matici A jde oještě hore

 podníněný systém = mai snysl používat jen pro

 rozumně podmíněne úlohy
 - pro toto metodo se pouziva zkratka CGNR
 a pri jeji i-plenentaci se ATA di ATA prilo nekonstruji,
 ale volaji se podprograny na výpočet A.x a ATX di Atx.
 - v konbinaci s dobrým predpodnihovačem může ale jít o rychlov metodu
- pro komplexmi symetrické matice AT=A (ne AT=A)

 se pověíva varianta conjugate orthogonal CG = COCG metada

 která nahvazuje skalární součín xty symetrickým součínem

 x.y bez komplexního sdružení
 - -velni často, zuläste spredpod-inenin, konverguje, ale konvergence neni zaručena?
 - velka výhoda (pokud konverguje) je její rychlost, oproti jiným obecnějším metoda –

```
· pro obecny system Ax=b lze te'z pouzit
   metodu bisdružených gradientů (BiCG), případně
   jeji stabilnojsi verzi BiCGStab, nebot BiCG ne vady
    konverguje a neni obecné stabilní (neminimalituje zádné p(x))
   - oproti CG metodé potrobyène kroné Ax tér Ax (à Ax)
      a v průběhu výpočtu se vedle tk a pk generují jestě
       posloupnosti Fix a Pix a je treba volit kro-e xo a po=ro
        jeste po= ro (casto se voli ro= ro, ale obecne totak být ne-usi)
    - rezidua nejsou byní ortogonalní navzájem, ale platí
               Fit; = riti = 0 pro j <i , tev. biortogonalita
               PitAp; = PitAp; = O projei , tav. bisdruženost
       a navic Fitpi = ritpi projei
   - algorithus voetne predpod-inení matici M:
            sporti ro = b - Axo pro zvolece xo
            Zuol Fo (napr. = ro)
            pro i=1,2, ...
                vyres MZi-1= ri-1 a MTZi-1= Fi-1
                81-1= == + 7 = 1-1
                pokud 8i-1=0, tak konec (metoda selhala, deteninulou)
                pokud i=1
                                               neledy seton le uphnout
                  Pi===i-1, Pi===i-1
                                               napr. restartovaníha
                                               metody apod.
                  Bi-1 = 81-1/81-2
                   Pi = Zi-1+Bi-1Pi-1
                  Pi = Zi-1 + Bi-1 Pi-1
                \varphi_i = A \rho_i, \widetilde{\varphi}_i = A^T \widetilde{\rho}_i
                \alpha_i = \gamma_{i-1}/(\widetilde{p}_i^T q_i)
                Xi = xi-1 + xipi
                r = ri-1 - x; q;
                r = r 1-1- x i q i
                test konvergence (Irillz < & apod.)
```

-pro synétrické pozitivně definitm natice totéž, co CG, ale dvakrát ndročnější