Modifikace metody sdružených gradientů

- standardní verze CG, povětšinou s předpodmíněním, funguje pro symetrické, pozitivně definitní matice
- přímočaré je zobecnění na hermitovské, pozitivně definitní matice, kdy jen transpozici nahradíme hermitovským sdružením
  tj. bude $\gamma_k = r_k^+ r_k$ a $\alpha_{k-1} = \gamma_{k-1}/(p_{k-1}^+ w_{k-1})$
- v principu by šlo použít CG na libovolný systém $Ax = b$ když ho vynásobíme A^T, případně A^+, tj. budeme řešit normální rovnice (měli jsme je u metody nejmenších čtverců)
  $$A^T A x = A^T b, \quad \text{nebo} \quad A^+ A x = A^+ b \text{ pro komplexní matice}$$
  neboť $A^T A$ a $A^+ A$ jsou již symetrické, pozitivně definitní matice
  - problém však je, že číslo podmíněnosti $\varkappa(A^T A) = \varkappa^2(A)$, a tedy pro špatně podmíněnou matici A jde ještě hůře podmíněný systém $\Rightarrow$ má smysl používat jen pro rozumně podmíněné úlohy
  - pro tuto metodu se používá zkratka CGNR a při její implementaci se $A^T A$ či $A^+ A$ přímo nekonstruují, ale volají se podprogramy na výpočet $A \cdot x$ a $A^T x$ či $A^+ x$.
  - v kombinaci s dobrým předpodmiňovačem může ale jít o rychlou metodu
- pro komplexní symetrické matice $A^T = A$ (ne $A^+ = A$) se používá varianta conjugate orthogonal CG = COCG metoda která nahrazuje skalární součin $x^+ y$ symetrickým součinem $x \cdot y$ bez komplexního sdružení
  - velmi často, zvláště s předpodmíněním, konverguje, ale konvergence není zaručena!
  - velká výhoda (pokud konverguje) je její rychlost, oproti jiným obecnějším metodám

- pro <u>obecný systém $Ax=b$</u> lze též použít <u>metodu bisdružených gradientů</u> (BiCG), případně její <u>stabilnější verzi BiCGStab</u>, neboť BiCG ne vždy konverguje a není obecně stabilní (neminimalizuje žádné $\phi(x)$)
  - oproti CG metodě potřebujeme kromě Ax též A^Tx (či A^+x) a v průběhu výpočtu se vedle r_k a p_k generují ještě posloupnosti $\tilde{r}_k$ a $\tilde{p}_k$ a je třeba volit kromě x_0 a $p_0=r_0$ ještě $\tilde{p}_0=\tilde{r}_0$ (často se volí $\tilde{r}_0=r_0$, ale obecně to tak být nemusí)
  - rezidua nejsou nyní ortogonální navzájem, ale platí

$$\tilde{r}_i^T r_j = r_i^T \tilde{r}_j = 0 \quad \text{pro } j<i \text{, tzv. biortogonalita}$$

$$\tilde{p}_i^T A p_j = p_i^T A^T \tilde{p}_j = 0 \quad \text{pro } j<i \text{, tzv. bisdruženost}$$

a navíc $\quad \tilde{r}_i^T p_j = r_i^T p_j \quad$ pro $j<i$

  - algoritmus včetně předpodmínění maticí M:

spočti $r_0 = b - Ax_0$ pro zvolené x_0
zvol $\tilde{r}_0$ (např. $=r_0$)
pro $i=1,2,\dots$
  vyřeš $Mz_{i-1} = r_{i-1}$ a $M^T\tilde{z}_{i-1} = \tilde{r}_{i-1}$
  $\gamma_{i-1} = z_{i-1}^T \tilde{r}_{i-1}$
  pokud $\gamma_{i-1}=0$, tak konec (metoda selhala, dělení nulou)
  pokud $i=1$
    $p_i = z_{i-1}$, $\tilde{p}_i = \tilde{z}_{i-1}$
  jinak
    $\beta_{i-1} = \gamma_{i-1}/\gamma_{i-2}$
    $p_i = z_{i-1} + \beta_{i-1} p_{i-1}$
    $\tilde{p}_i = \tilde{z}_{i-1} + \beta_{i-1}\tilde{p}_{i-1}$
  $q_i = Ap_i$, $\tilde{q}_i = A^T\tilde{p}_i$
  $\alpha_i = \gamma_{i-1}/(\tilde{p}_i^T q_i)$
  $x_i = x_{i-1} + \alpha_i p_i$
  $r_i = r_{i-1} - \alpha_i q_i$
  $\tilde{r}_i = \tilde{r}_{i-1} - \alpha_i \tilde{q}_i$
  test konvergence ($\|r_i\|_2 < \varepsilon$ apod.)

někdy se tomu lze vyhnout např. restartováním metody apod.

  - pro symetrické, pozitivně definitní matice totéž, co CG, ale dvakrát náročnější