

# Gradientní iterční metody

- základní výsledek: pro symetrické a pozitivně definitní matici

je nalezení řešení  $Ax=b$  ekvivalentní

nalezení minima kvadratické formy

$$\boxed{\phi(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b}, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

neboli

$$\nabla \phi(x) = \frac{1}{2} [Ax + (x^T A)^T] - b \stackrel{\uparrow}{=} Ax - b = 0$$

pro  $A=A^T$  (symetrické matice)

- hledáme přibližné řešení iterčně

volbou poč.  $x_0$  (např.  $x_0=0$ ) a pak vhodného směru  $p_k$  v každém

kroku s tím, že minimalizujeme  $\phi(x_k + \alpha p_k)$  vzhledem k  $\alpha$

~~neboli~~ neboli  $\frac{\partial \phi(x_k + \alpha p_k)}{\partial \alpha} = 0$

protože

$$\begin{aligned} \phi(x_k + \alpha p_k) &= \frac{1}{2} (x_k + \alpha p_k)^T A (x_k + \alpha p_k) - (x_k + \alpha p_k)^T b \\ &= \underbrace{\frac{1}{2} x_k^T A x_k - x_k^T b}_{\text{konst.}} + \underbrace{\frac{\alpha}{2} (p_k^T A x_k + x_k^T A p_k)}_{2p_k^T A x_k \text{ díky symetrickosti}} - \alpha p_k^T b + \frac{\alpha^2}{2} p_k^T A p_k \\ &= \frac{1}{2} x_k^T A x_k - x_k^T b + \alpha [p_k^T (A x_k - b)] + \frac{\alpha^2}{2} p_k^T A p_k \end{aligned}$$

a derivujeme

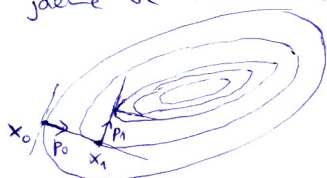
$$0 = \frac{\partial \phi}{\partial \alpha} = -p_k^T r_k + \alpha p_k^T A p_k \Rightarrow \boxed{\alpha_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}}$$

kde jsme označili zbytkový (reziduální) vektor v  $k$ -té iteraci

$$r_k = b - A x_k \quad (\text{reziduum})$$

- volba směru  $p_k$ :

metoda největšího spádu  
jde ve směru  $\nabla \phi$



neboli  $\nabla \phi(x_k) = A x_k - b = -r_k$

takže volíme  $p_k = r_k$

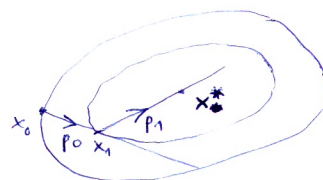
a tedy

$$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{r_k^T A r_k}$$

(conjugate gradient - CG)  
metoda sdružených gradientů

jde ve tzv.  $A$ -sdruženém směru  
tj. volíme  $p_k$  tak, aby

$$\boxed{p_k^T A p_i = 0 \quad \forall i=0, \dots, k-1}$$



ve 2D  
jde o přímou  
správný  
směr

## a) metoda největšího spádu

přítocáré:

zvolíme  $x_0$

pro  $k=1,2,\dots$

$$r_{k-1} = b - Ax_{k-1} \quad (\text{pokud mále' konec})$$

$$\alpha_{k-1} = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{r_{k-1}^T A r_{k-1}}$$

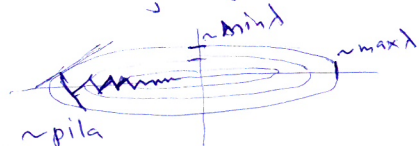
$$x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1} r_{k-1}$$

ne moc dobré kvůli  
dvěma matic. násobením

• pro hře podčižené matice  $A$

po-als' konvergence

$$\kappa(A) = \frac{\max_j |\lambda_j|}{\min_j |\lambda_j|} \gg 1 \Rightarrow$$



protáhlé elipsoidy

vždy jde o kolmo na předchozí směr

$$r_{k-1}^T r_k = r_{k-1}^T r_{k-1} - \alpha_{k-1} r_{k-1}^T A r_{k-1} = 0$$

což není dobré

$$\text{lépe: } r_k = b - Ax_k = b - A(x_{k-1} + \alpha_{k-1} r_{k-1}) \\ = r_{k-1} - \alpha_{k-1} A r_{k-1}$$

a tedy

zvolíme  $x_0$

$$r_0 = b - Ax_0$$

pro  $k=1,2,\dots$

$$w_{k-1} = A r_{k-1}$$

$$\alpha_{k-1} = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{r_{k-1}^T w_{k-1}}$$

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1} r_{k-1}$$

$$r_k = r_{k-1} - \alpha_{k-1} w_{k-1}$$

pokud  $\|r_k\| < \epsilon$  konec

## b) metoda sdružených gradientů

motivace volby  $p_1^T A p_0 = 0$  ve 2D:



protože  $\nabla \phi(x_1) = -r_1$  je kolmé na  $p_0$ , dostáváme

$$0 = p_0^T r_1 = p_0^T (b - Ax_1) = p_0^T (Ax^* - Ax_1) = p_0^T A (\underbrace{x^* - x_1}_{\alpha p_1 \text{ projistě } x}) = \alpha p_0^T A p_1 = 0$$

a díky symetrickosti  $A$  máme

$$p_1^T A p_0 = 0 \leftarrow \text{přítocárá volba ve 2D}$$

ovšem pro  $m > 2$  ne-dá se jednoznačnou volbu, protože neznáme  $x^*$

pokud bude volit  $p_k$  tak, aby bylo  $A$ -sdružené s  $p_0, \dots, p_{k-1}$

tak bude minimalizovat  $\phi(x)$  v prostoru  $x_0 + \text{span}\{p_0, \dots, p_k\}$

a optimum bude  $x_k = x_0 + \alpha_0 p_0 + \dots + \alpha_k p_k$

$p_0$  a  $p_1$  jsou lin. nezávislé  $\Rightarrow$  tvoří rovinu, která řeší elipsoidy  
 $\Rightarrow$  soustředěné elipsy v rovině  $\Rightarrow$  střed bude v  $x_2$  atd.  
 pokud některé z elips je kružnice, pak se dostane hned  
 do středu, což je pokud  $\lambda_i = \lambda_j$  pro nějaké  $i \neq j$ ,  $\lambda_j$  vlastní  
 čísla  $A$   
 $\rightarrow$  rychlejší konvergence

# algoritmus metody sdružených gradientů (bez předpodmínění)

zvol  $x_0$  (např. 0)

$$r_0 = b - Ax_0$$

$$p_0 = r_0, \quad g_0 = r_0^T r_0$$

pro  $k=1, 2, \dots$

toto jako  
v metody  
největšího  
spádu

$$\begin{cases} w_{k-1} = A p_{k-1} \\ \alpha_{k-1} = g_{k-1} / (p_{k-1}^T w_{k-1}) \\ x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1} p_{k-1} \\ r_k = r_{k-1} - \alpha_{k-1} w_{k-1} \end{cases}$$

pokud  $\|r_k\| < \epsilon$  konec

určení  
nového  
"optimálního"  
směru

$$\begin{cases} g_k = r_k^T r_k \\ \beta_{k-1} = g_k / g_{k-1} \\ p_k = r_k + \beta_{k-1} p_{k-1} \end{cases}$$

• Lze ukázat (viz např. Trefethen, Bau:  
Numerical Linear Algebra)  
že vektory generované metodou sdruž. grad.  
splňují (pokud  $r_k \neq 0$ , pro  $r_k = 0$  již máme řešení)

1)  $p_k^T A p_j = 0$  pro  $j=0, \dots, k-1$

2)  $r_k^T r_j = 0$  pro  $j=0, \dots, k-1$

3) podprostory  $\mathcal{L}(p_0, \dots, p_{k-1})$ ,  
 $\mathcal{L}(r_0, A r_0, \dots, A^{k-1} r_0)$  a  $\mathcal{L}(A e_0, \dots, A^k e_0)$

jsou stejné ( $e_0 = x^* - x_0$ ) a tento podprostor  
se nazývá Krylovův prostor  $(A, r_0)$

(pokud volíme  $x_0 = 0$ , pak  $r_0 = b$  a jde o  $(A, b)$ )

Náznak důkazu: indukci v  $k$ :

3) z  $p_k = r_k + \beta_{k-1} p_{k-1}$  plyne, že  $\mathcal{L}(p_0, \dots, p_{k-1}) = \mathcal{L}(r_0, r_1, \dots, r_{k-1})$   
a z  $r_k = r_{k-1} - \alpha_{k-1} A p_{k-1}$ , přičemž  $p_0 = r_0$  plyne  $\mathcal{L}(r_0, r_1, \dots, r_{k-1}) = \mathcal{L}(r_0, A r_0, \dots, A^{k-1} r_0)$

a díky  $e_0 = x^* - x_0$  máme  $A e_0 = A x^* - A x_0 = b - A x_0 = r_0$

2) spočítáme  $r_k^T r_j = (r_{k-1} - \alpha_{k-1} A p_{k-1})^T r_j = r_{k-1}^T r_j - \alpha_{k-1} p_{k-1}^T A r_j = 0$  pro  $j < k-1$  dle indukce  
0 pro  $j = k-1$  díky  $\alpha_{k-1} = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{p_{k-1}^T A r_{k-1}}$

což plyne z  $p_{k-1}^T A p_{k-1} = p_{k-1}^T A r_{k-1} + \underbrace{\beta_{k-1} p_{k-1}^T A p_{k-2}}_{=0 \text{ dle indukce}}$

1)  $p_k^T A p_j = r_k^T A p_j + \beta_{k-1} p_{k-1}^T A p_j = 0$  pro  $j < k-1$  dle indukce a díky 2), neboť  $A p_j = \frac{1}{\alpha_j} (r_j - r_{j+1})$   
0 pro  $j = k-1$  neboť  $\beta_{k-1} = \frac{r_k^T r_k}{r_{k-1}^T r_{k-1}} = -\frac{r_k^T A p_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}} \leftarrow r_k^T r_k = \cancel{r_{k-1}^T r_{k-1}} - \alpha_{k-1} r_{k-1}^T A p_{k-1}$   
 $\leftarrow \frac{1}{\alpha_{k-1}} (r_{k-1}^T r_{k-1} - \cancel{r_{k-1}^T r_{k-1}})$

Pozn:

1) nejde v pravé slova smyslu  
o iterativní metodu, v přesné  
aritmetice skončíme nejvýše po  $n$  krocích

avšak a) díky zaokr. chybám  
není konvergence zaručena

b) často konverguje mnohem  
rychleji (k dostatečně  
přesnému řešení), zvláště  
pokud matici předpodmíníme

2) opět pouze jedno násobení  $A \cdot v$   
(obvykle jako subrutina od uživatele)  
a 2 skalární součiny, neboť místo  
 $p_{k-1}^T r_{k-1}$  je použito  $r_{k-1}^T r_{k-1}$ , protože

$$p_{k-2}^T r_{k-1} = 0$$

nebo přímo výpočet

nebo přímo výpočet  
 $p_{k-2}^T r_{k-1} = p_{k-2}^T (r_{k-2} - \alpha_{k-2} A p_{k-2})$   
 $= 0$  díky volbě  $\alpha_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$



## Konvergence metody sdružených gradientů (CG)

- protože pracujeme se symetrickými, pozitivně definitními maticemi, můžeme pomocí těchto matic definovat normu

$$\|v\|_A = \sqrt{v^T A v}, \text{ neboť } v^T A v \text{ je nula pouze pro } v=0$$

ta se používá při rozboru metody CG (conjugated gradients)

- pro chybu  $e_k = x_k - x^*$  přibližného řešení  $x_k$  v  $k$ -tém kroku,  $x^*$  je přesné řešení  $Ax^* = b$ , dostaneme

$$\begin{aligned} \|e_k\|_A^2 &= (x_k - x^*)^T A (x_k - x^*) = \\ &= x_k^T A x_k - 2x_k^T \underbrace{A x^*}_b + (x^*)^T A x^* = \\ &= 2\phi(x_k) + (x^*)^T A x^*, \text{ kde } \phi(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b \end{aligned}$$

a tedy pokud minimalizujeme  $\phi(x)$ , minimalizujeme též chybu danou  $A$ -normou  $\|e\|_A$ .

- řešení hledáme na prostoru  $x_0 + K_k$ , kde

$$K_k = \mathcal{L}(p_0, p_1, \dots, p_{k-1}) = \underbrace{\mathcal{L}(r_0, A r_0, \dots, A^{k-1} r_0)}_{\text{Krylovův prostor } K_k(r_0, A)} = \mathcal{L}(A e_0, \dots, A^k e_0)$$

neboli

$$x_k = x_0 + \alpha_0 p_0 + \alpha_1 p_1 + \dots + \alpha_{k-1} p_{k-1}$$

z čehož odečtením  $x^*$

$$e_k = e_0 + \alpha_0 p_0 + \dots + \alpha_{k-1} p_{k-1} = e_0 + c_1 A e_0 + \dots + c_k A^k e_0$$

pro jisté koeficienty  $c_1, \dots, c_k$

neboli

$$e_k = P_k(A) e_0, \text{ kde } P_k(z) = 1 + c_1 z + \dots + c_k z^k \text{ je}$$

polynom z prostoru  $\mathcal{P}_k = \{P(z) \text{ stupně nejvýše } k \text{ pro něj } P(0) = 1\}$

- pomocí metody CG konstruuje přímo polynom  $P_k$ .

kteřý minimalizuje  $\|e_k\|_A = \|P_k(A) e_0\|_A$  na prostoru  $\mathcal{P}_k$

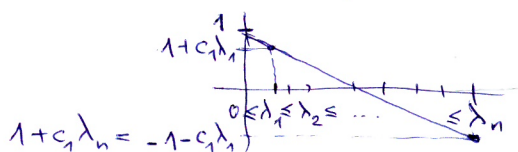
• chceme-li najít odhad chyby v  $k$ -tém kroku CG, stačí najít polynom v  $\mathcal{P}_k$ , pro který umíme  $P(A)$  nějak rozumně odhadnout, čímž dostaneme odhad i pro  $\|e_k\|_A$  neboť pro lib.  $\tilde{P}_k \in \mathcal{P}_k$  platí  $\|e_k\|_A \leq \|\tilde{P}_k(A)e_0\|_A$

- protože  $A$  je diagonalizovatelná (díky SPD), tj.  $A = V\Lambda V^T$ , kde  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_j)$  a  $\lambda_j, j=1, \dots, n$  jsou vlastní čísla  $A$ , můžeme psát  $P(A) = VP(\Lambda)V^T$ , pro lib. polynom

$$\begin{aligned} \text{a tedy } \|P(A)e_0\|_A^2 &= e_0^T P(A)^T A P(A) e_0 = \\ &= e_0^T V P(\Lambda)^T \underbrace{V^T A V}_{\Lambda} P(\Lambda) V^T e_0 = \\ &= e_0^T V \text{diag}(\lambda_j P(\lambda_j)^2) V^T e_0 \leq \\ &\leq \max_j P(\lambda_j)^2 \cdot e_0^T V \Lambda V^T e_0 = \max_j P(\lambda_j)^2 \|e_0\|_A^2 \end{aligned}$$

- odhad můžeme udělat tak, že vybereme polynom  $P(z)$ , abychom snadno odhadli jeho velikost ve vlastních číslech  $\lambda_j$

matrice  $A$ : pro  $k=1$  volíme např.  $\tilde{P}_1(z) = 1 + c_1 z$  tak, aby



nabíval maximálních hodnot na krajích intervalu  $\langle \lambda_1, \lambda_n \rangle$ , kde leží všechna  $\lambda_j$

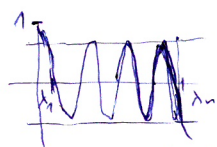
neboli musí být  $\tilde{P}_1(z) = 1 - \frac{2z}{\lambda_1 + \lambda_n}$

$$\text{a pro } \max_j |\tilde{P}_1(\lambda_j)| = 1 - \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_n} = \frac{\lambda_n/\lambda_1 - 1}{\lambda_n/\lambda_1 + 1} = \frac{\kappa(A) - 1}{\kappa(A) + 1}$$

kde  $\kappa(A)$  je číslo podmíněnosti  $A$

pro obecné  $k$  lze takový polynom zkonstruovat pomocí

Chebyshevova polynomu stupně  $k$



$$\tilde{P}_k(z) = \frac{T_k\left(\frac{\lambda_n + \lambda_1 - 2z}{\lambda_n - \lambda_1}\right)}{T_k\left(\frac{\lambda_n + \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_1}\right)}$$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{posunutý a} \\ \text{škálováný na} \\ \text{interval } \langle \lambda_1, \lambda_n \rangle \\ \text{"normalizace"} \\ \text{aby v } z=0 \\ \text{bylo } \tilde{P}_k(0)=1 \end{array} \right.$

lze pak ukázat (viz např. Trefethen), že

$$\max_j |\tilde{P}_k(\lambda_j)| = \tilde{P}_k(\lambda_1) = \frac{T_k(1)}{T_k\left(\frac{\lambda_n + \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_1}\right)} = 2 \left[ \left( \frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1} \right)^k + \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \right]^{-1} \leq 2 \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k$$

$$\text{a tedy } \|e_k\|_A \leq \|\tilde{P}_k(A)e_0\|_A \leq 2 \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \|e_0\|_A$$

a pro určitou přesnost a rozumné  $\kappa$  potřebujeme  $O(\sqrt{\kappa})$  iterací, kde  $\kappa$  je číslo podmíněnosti  $A$ . Sdějen o odhad, může konvergovat rychleji

# Předpodmínění (preconditioning)

- zkrátí u metod jako je metoda sdruž. gradientů apod. je předpodm. zcela zásadní pro rychlou konvergenci, neboť rychlost konvergence závisí na číslu podmíněnosti matice  $\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\| = \frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|}$  pro normální matice  $AA^T = A^T A$  což platí pro SPD matice a předpodmínění číslo podmíněnosti zmenšuje.

- základní výtěrka: místo  $Ax = b$  řešíme  $M^{-1}Ax = M^{-1}b$  (což je ekvivalentní problém), kde  $M^{-1}$  je "snadné" ovšem i když  $M$  a  $A$  jsou SPD matice, tak  $M^{-1}A$  už nemusí být SPD navíc konstruovat  $M^{-1}A$  přímo může narůst řádlost matice  $\Rightarrow A$  a  $M^{-1}$  se aplikují odděleně

- existují obecné postupy, např.  $M = \text{diag}(A)$ , pokud se změní číslo podmíněnosti ale velí často a účinněji se používají matice  $M$  sítě na úrovní dané v fyz. problému (např. vyřeší se problém bez interakce a pak se s interakce iteruje apod.) (nefunguje např. pro  $T_N$  u  $N=2$ , neboť  $\text{diag } T_N = 2I$  což nezmění číslo podmíněnosti, jak  $\lambda_{\min}$ , tak  $\lambda_{\max}$  se vydělí 2)

- pokud  $M^{-1}A$  není SPD, lze řešit  $(\tilde{C}^{-1})^T A \tilde{C}^{-1} (Cx) = (\tilde{C}^{-1})^T b$  pro nesingulární matici  $C$  (ale  $A$  je SPD)  $\tilde{A}x = \tilde{b}$

protože nyní je  $\tilde{A}$  také symetrická (pro lib.  $C$ ) a pozitivně definitní

$$\text{neboť } \tilde{A}^T = ((\tilde{C}^{-1})^T A \tilde{C}^{-1})^T = (\tilde{C}^{-1})^T A^T (\tilde{C}^{-1})^T = \tilde{A}$$

$$\text{a } v^T \tilde{A} v = v^T (\tilde{C}^{-1})^T A \tilde{C}^{-1} v = (\tilde{C}^{-1} v)^T A (\tilde{C}^{-1} v) > 0 \text{ pro lib. } v$$

jak je to s číslem podmíněnosti  $\tilde{A}$ ? je dáno vlastními čísly  $\tilde{A}$  (je SPD)

a ty jsou stejné jako pro matici

$$\tilde{C}^T \tilde{A} C = \tilde{C}^T (\tilde{C}^{-1})^T A = (C^T C)^{-1} A$$

$\Rightarrow$  pokud bychom měli rozumnou SPD matici  $M$ , pak lze brát  $C^T C$  jako její Choleského rozklad

ovšem lze ukázat, že tento rozklad není nutno dělat, a lze přímo

použít algoritmus

$$r_0 = b - Ax_0$$

$$\text{vyřeš } Mz_0 = r_0 \rightarrow z_0$$

$$p_0 = z_0$$

pro  $k=1, 2, \dots$

$$w_{k-1} = Ap_{k-1}$$

$$\alpha_{k-1} = (r_{k-1}^T r_{k-1}) / (p_{k-1}^T w_{k-1})$$

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1} p_{k-1}$$

$$r_k = r_{k-1} - \alpha_{k-1} w_{k-1} \rightarrow \text{pokud } \|r_k\| < \varepsilon \text{ konec}$$

$$\text{vyřeš } Mz_k = r_k \rightarrow z_k$$

$$\beta_{k-1} = (z_k^T r_k) / (z_{k-1}^T r_{k-1})$$

$$p_k = z_k + \beta_{k-1} p_{k-1}$$

$$\text{kde } x_k = \tilde{C}^{-1} \tilde{x}_k$$

$$p_k = \tilde{C}^{-1} \tilde{p}_k$$

$$w_k = \tilde{C}^{-1} \tilde{w}_k$$

$$r_k = \tilde{C}^T \tilde{r}_k$$



## Modifikace metody sdružených gradientů

- standardní verze CG, poréšitelnou s předpokládáním, funguje pro symetrické, pozitivně definitní matice
- přímocáre' je zobecnění na hermitovské, pozitivně definitní matice, kdy jen transpozice nahradíme hermitovským sdružením  
tj. bude  $\delta_k = r_k^+ r_k$  a  $\alpha_{k-1} = \delta_{k-1} / (p_{k-1}^+ w_{k-1})$
- 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)  
 $A^T A x = A^T b$ , nebo  $A^+ A x = A^+ b$  pro komplexní matice  
neboť  $A^T A$  a  $A^+ A$  jsou již symetrické, pozitivně definitní matice  
- problém však je, že číslo podmíněnosti  $\kappa(A^T A) = \kappa^2(A)$ ,  
a tedy pro špatně podmíněnou matici  $A$  jde o ještě horší  
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 nekonstruuje,  
ale volají se podprogramy na výpočet  $A \cdot x$  a  $A^T x$  či  $A^+ x$ .
- v kombinaci s dobrým předpodmínovačem 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  $x^T y$  symetrickým součinem  
 $x \cdot y$  bez komplexního sdružení
- velmi často, zvláště s předpokládáním, konverguje, ale  
konvergence není zaručena?
- velká výhoda (pokud konverguje) je její rychlost, oproti  
jiným obecnějším metodám

- pro obecný systém  $Ax=b$  lze též použít metodu bisdružených gradientů (BiCG), případně její stabilnější verzi BiCGStab, neboť BiCG ne vždy konverguje a není obecně stabilní (neminimalizuje žádné  $\phi(x)$ )
  - oproti CG metodě potřebujeme kromě  $Ax$  též  $A^T x$  (či  $A^T x$ ) 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  $\tilde{r}_i^T p_j = r_i^T \tilde{p}_j \quad \text{pro } j < i$
  - algoritmus včetně předpodmínění matricí  $M$ :
 

spočti  $r_0 = b - Ax_0$  pro zvolené  $x_0$   
 zvol  $\tilde{r}_0$  (např.  $= r_0$ )  
 pro  $i=1, 2, \dots$   
   vyřeš  $M \tilde{r}_{i-1} = r_{i-1}$  a  $M^T \tilde{z}_{i-1} = \tilde{r}_{i-1}$   
    $\gamma_{i-1} = \tilde{z}_{i-1}^T \tilde{r}_{i-1}$   
   pokud  $\gamma_{i-1} = 0$ , tak konec (metoda selhala, dělení nulou)  
   pokud  $i=1$  někdy se tomu lze vyhnout  
      $p_i = \tilde{z}_{i-1}$ ,  $\tilde{p}_i = \tilde{z}_{i-1}$  např. restartováním  
   jinak metody apod.  
      $\beta_{i-1} = \gamma_{i-1} / \gamma_{i-2}$   
      $p_i = \tilde{z}_{i-1} + \beta_{i-1} p_{i-1}$   
      $\tilde{p}_i = \tilde{z}_{i-1} + \beta_{i-1} \tilde{p}_{i-1}$   
    $q_i = A p_i$ ,  $\tilde{q}_i = A^T \tilde{p}_i$   
    $\alpha_i = \gamma_{i-1} / (\tilde{p}_i^T q_i)$   
    $x_i = x_{i-1} + \alpha_i p_i$   
    $r_i = r_{i-1} - \alpha_i q_i$   
    $\tilde{r}_i = \tilde{r}_{i-1} - \alpha_i \tilde{q}_i$   
   test konvergence ( $\|r_i\|_2 < \varepsilon$  apod.)
- pro symetrické, pozitivně definitní matice totéž, co CG, ale dvakrát úspornější