SOUSTAVY LINEÁRNÍCH ALGEBRAICKÝCH ROVNIC

Metody

- **přímé** (GEM, metoda LU-rozkladu)
- **iterační** (Jacobi, Gauss-Seidel, SOR)
- $\boxed{\textbf{gradientní}}$

Motivace:

Uvažujme kvadratickou funkci

$$f(x) = \frac{1}{2}ax^2 - bx + c, \quad a > 0.$$

Nutná a postačující podmínka minima má tvar

$$ax = b.$$

To znamená, že místo řešení rovnice můžeme řešit úlohu najít minimum konvexní kvadratické funkce $f(x)$ (obě úlohy mají stejné řešení). Uvědomme si, že v případě funkce více proměnných je třeba splnit další podmínky kladené na matici soustavy $\mathbf{A}$, abychom zaručili konvexnost příslušné kvadratické funkce.

Uvažujeme soustavu (matice $\mathbf{A}$ je symetrická, pozitivně definitní)

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Dále uvažujeme kvadratickou formu - **energetický funkcionál**

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{A}\ \mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x}.$$

Platí

$$\operatorname{grad} \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\ \mathbf{x} - \mathbf{b}.$$

Funkce $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ je konvexní a kvadratická

$\Longrightarrow$ $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ má globální minimum a pro bod minima $\tilde{\mathbf{x}}$ platí

$$\operatorname{grad} \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{x}}) = \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b} = \mathbf{0}.$$

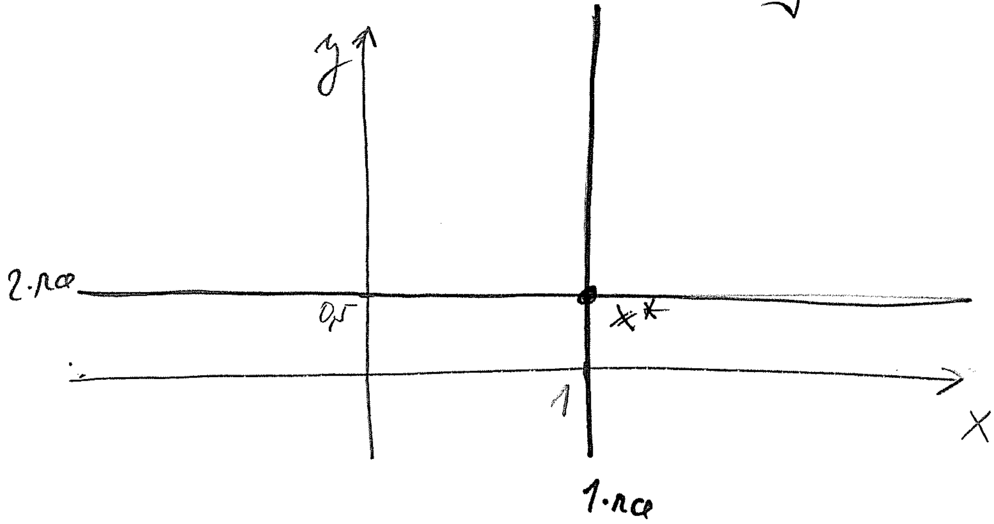
Bod minima $\tilde{\mathbf{x}}$ je tedy řešením soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

Poznámka:
Úlohy najít bod minima funkce $\mathbf{F}$ a řešit soustavu $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ jsou ekvivalentní.

Poznámka: V případě soustavy 2 rovnic si lze udělat geometrickou představu, neboť pro $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ je grafem funkce $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ eliptický paraboloid, jehož vrstevnice jsou elipsy. Minima $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ se nabývá ve vrcholu paraboloidu.

Příklad

$$A = \begin{bmatrix} 25 & 0 \\ 0 & 16 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 25 \\ 8 \end{bmatrix} \qquad x^* = \begin{bmatrix} 1 \\ 0{,}5 \end{bmatrix}$$



$$F(x) = \frac{1}{2} x^T A x^T - b^T x$$

$$= \frac{1}{2} [x, y] \begin{bmatrix} 25 & 0 \\ 0 & 16 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} - [25, 8] \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}(25x^2 + 16y^2) - 25x - 8y$$

Vrstevnice (hladiny):

$$F(x) = c$$

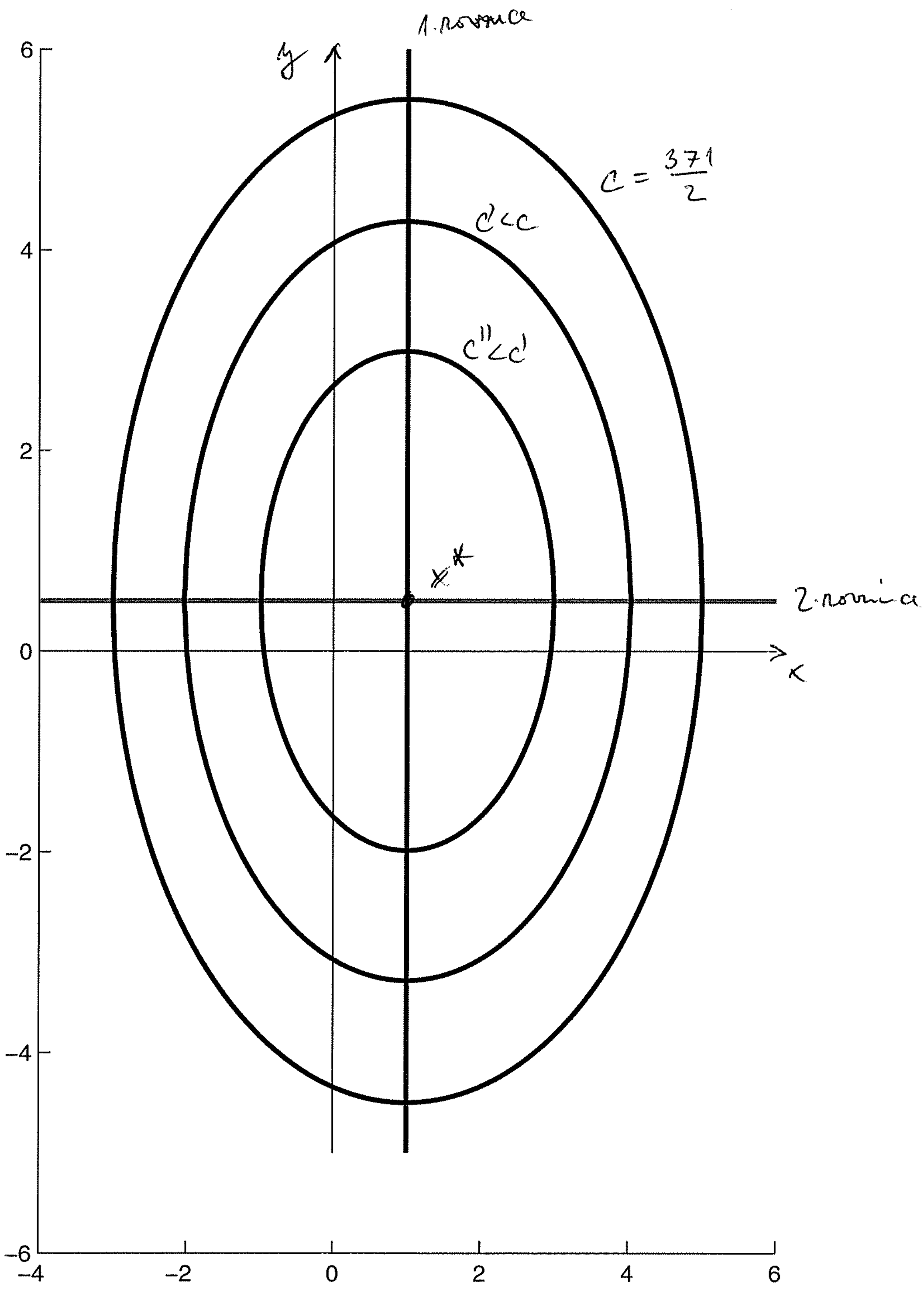
$$\frac{1}{2}(25x^2 + 16y^2) - 25x - 8y = c$$

$$25x^2 + 16y^2 - 50x - 16y = 2c$$

$$25(x-1)^2 - 25 + 16\left(y - \frac{1}{2}\right)^2 - 4 = 2c$$

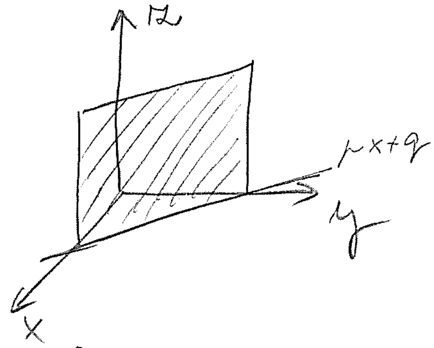
$$25(x-1)^2 + 16\left(y - \frac{1}{2}\right)^2 = 2c + 29 \qquad \boxed{\text{např. pro } c = \frac{371}{2}}$$

$$\frac{(x-1)^2}{4^2} + \frac{\left(y - \frac{1}{2}\right)^2}{5^2} = \frac{2c+29}{400} = 1$$


1. rovnice
y
C = 371/2
c' < c
c'' < c'
x*
2. rovnice
x
6
4
2
0
−2
−4
−6
−4
−2
0
2
4
6

Řezy svislou rovinou

$$y = px + q$$

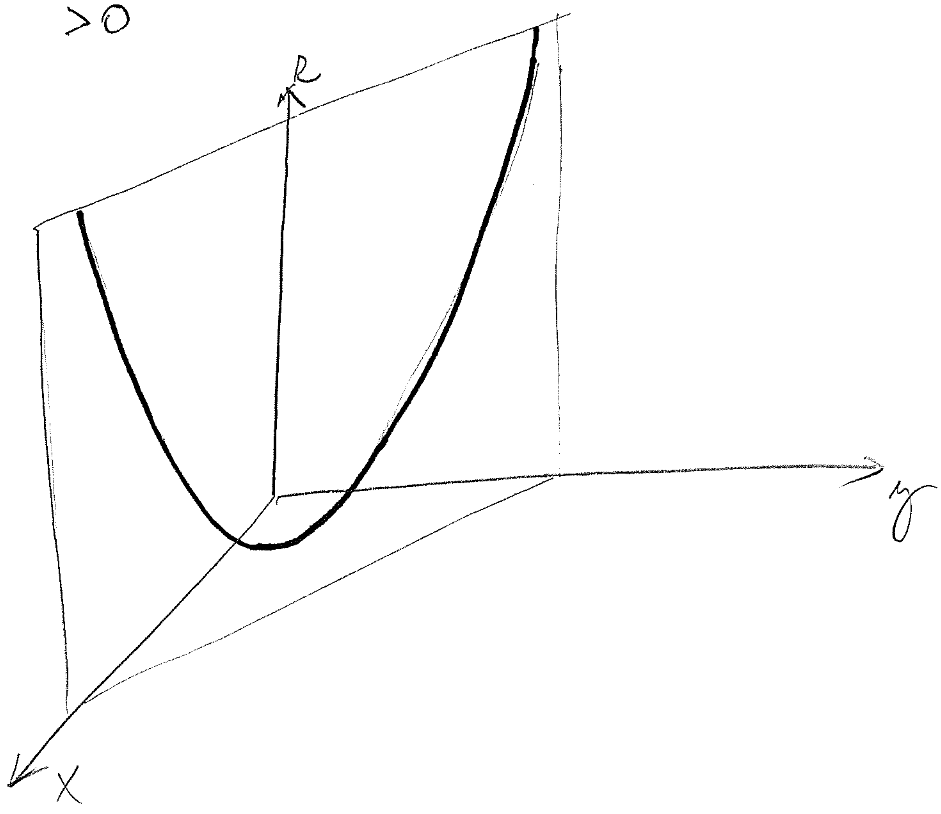


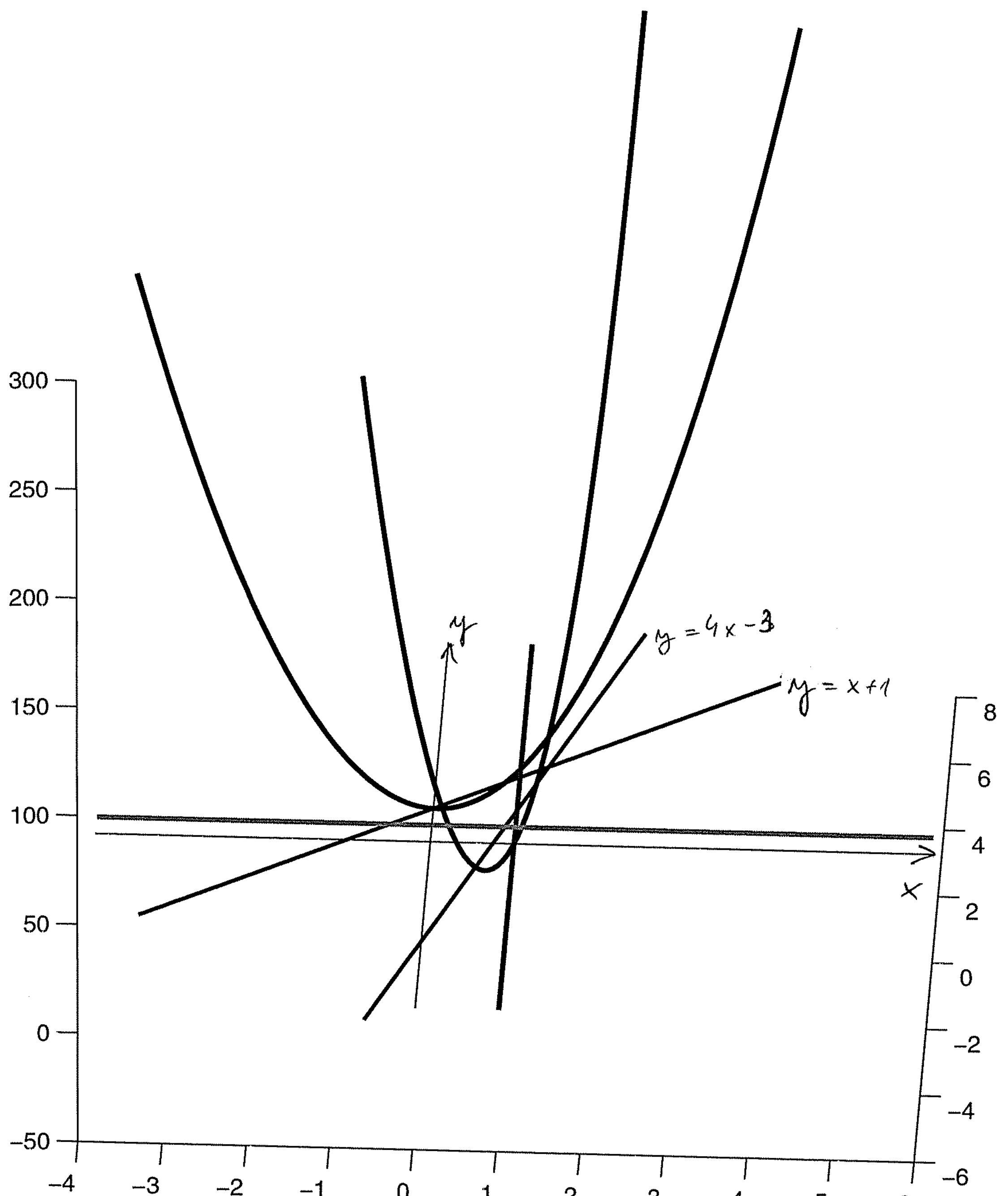
$$F(x) = \frac{1}{2}\left(25x^2 + 16y^2\right) - 25x - 8y$$

$$= \frac{1}{2}\left(25x^2 + 16(px+q)^2\right) - 25x - 8(px+q)$$

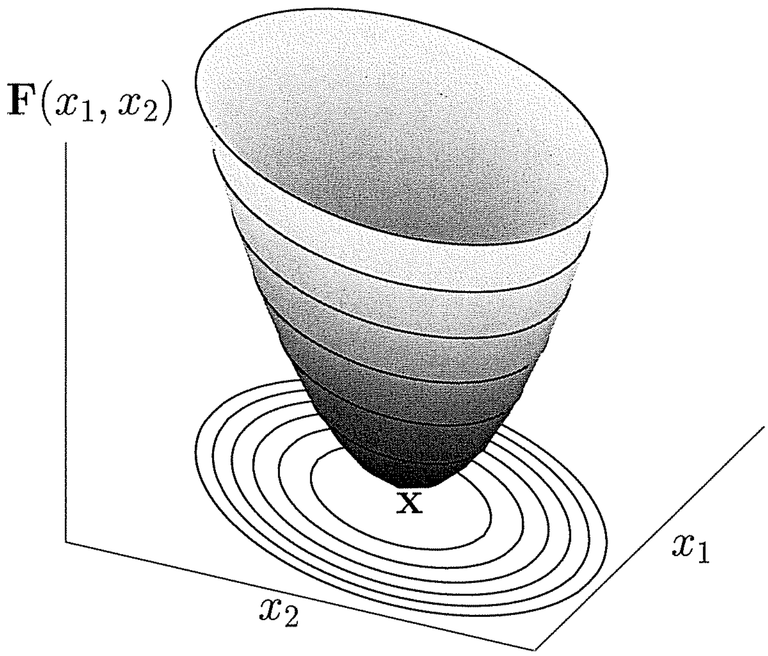
$$= \frac{1}{2}\left(25x^2 + 16(p^2x^2 + 2pqx + q^2)\right) - 25x - 8px - 8q$$

$$= \underbrace{\left(\frac{25}{2} + \frac{16}{2}p^2\right)}_{>0} x^2 + \left(16pq - 25 - 8p\right) x + 8q^2 - 8q$$

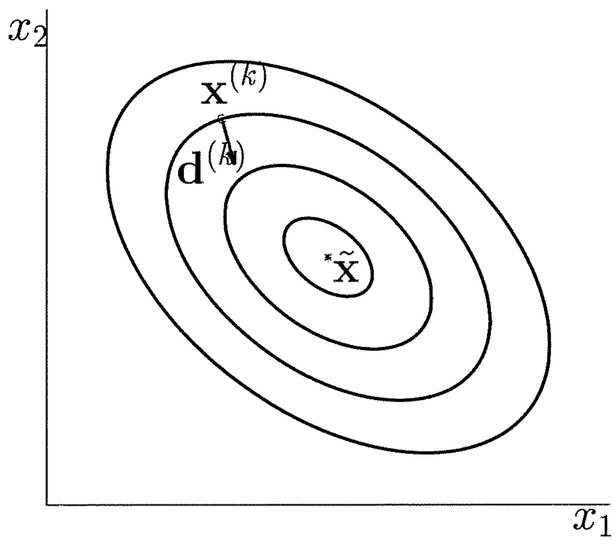




y
x
y = 4x - 3
y = x + 1
300
250
200
150
100
50
0
−50
−4
−3
−2
−1
0
1
2
3
4
5
6
8
6
4
2
0
−2
−4
−6



Stejně jako u každé iterační metody nejprve zvolíme počáteční aproximaci řešení $\mathbf{x}^{(0)}$. Princip gradientních metod spočívá v tom, že zvolíme směr a v tomto směru se budeme chtít co nejvíce přiblížit k přesnému řešení. Gradientní metoda je tedy dána volbou směrů, ve kterých minimalizujeme funkci $\mathbf{F}$.



V případě soustavy dvou rovnic získáme promítnutím grafu funkce $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ do roviny proměnných x_1, x_2 systém soustředných elips - hladin (vrstevnic).

První možností je za směrový vektor volit směr největšího spádu, tj. vektor

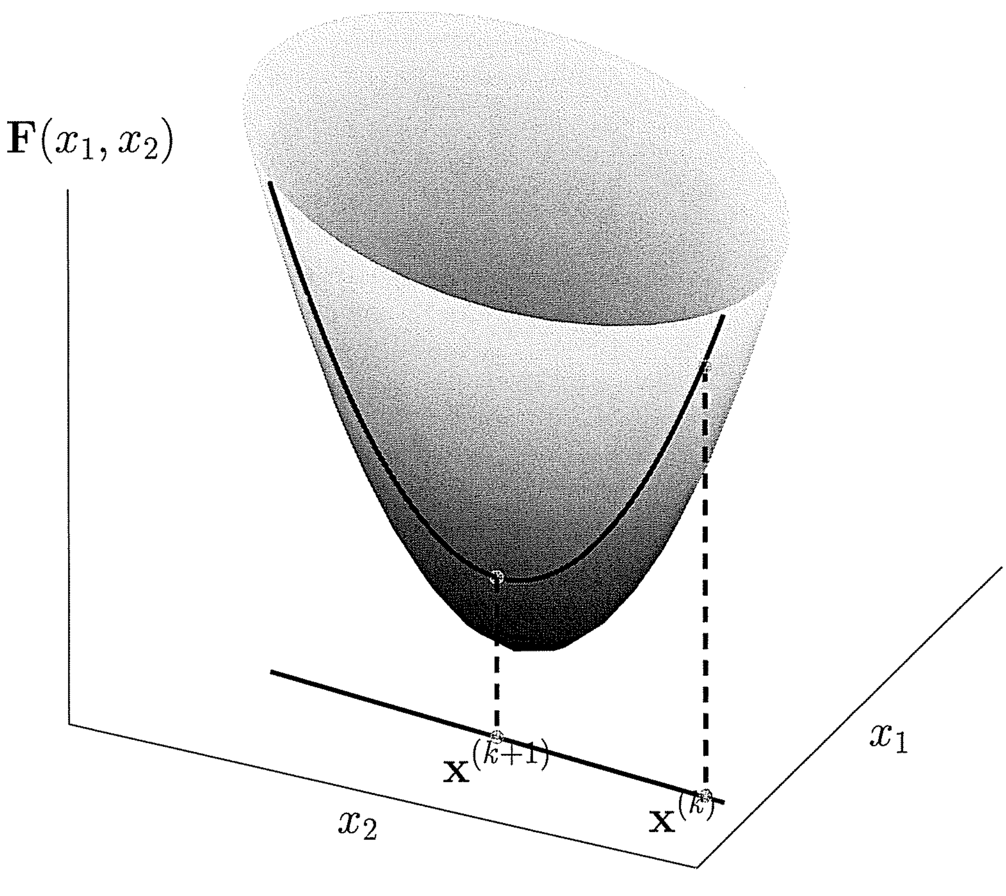
$$\mathbf{d}^{(k)} = -\operatorname{grad} \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}) = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}.$$

Získáme tzv. **metodu největšího spádu**. Iterační formuli volíme ve tvaru

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + t^{(k)}.\, \mathbf{d}^{(k)},$$

v každém kroku metody určíme směr největšího spádu $\mathbf{d}^{(k)}$ a provedeme jednorozměrnou minimalizaci v tomto směru, tj.

$$\min_{t>0} \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)} + t\,\mathbf{d}^{(k)}).$$



Minimalizovanou funkci proměnné t označíme $\Psi(t)$. Potom platí:

$$\underbrace{\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}+t\,\mathbf{d}^{(k)})}_{\Psi(t)} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}^{(k)}+t\,\mathbf{d}^{(k)})^T\mathbf{A}(\mathbf{x}^{(k)}+t\,\mathbf{d}^{(k)})-\mathbf{b}^T(\mathbf{x}^{(k)}+t\,\mathbf{d}^{(k)}).$$

$$\frac{d\Psi(t)}{dt} = t\,\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{A}\mathbf{d}^{(k)} + \underbrace{\mathbf{x}^{(k)^T}\mathbf{A}\mathbf{d}^{(k)} - \mathbf{b}^T\mathbf{d}^{(k)}}_{\underbrace{(\mathbf{x}^{(k)^T}\mathbf{A}-\mathbf{b}^T)}_{-\mathbf{d}^{(k)^T}}\,\mathbf{d}^{(k)}}$$

$$\frac{d\Psi(t)}{dt} = t\,\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{A}\mathbf{d}^{(k)} - \mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k)} = 0$$

$$t^{(k)} = \frac{\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k)}}{\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{A}\,\mathbf{d}^{(k)}}$$

Poznámka:
Ve výrazu pro derivaci $\Psi(t)$ jsme využili symetrii matice $\mathbf{A}$.

$$\frac{d}{dt}\left(x^{(k)^T} A\, t\, d^{(k)}\right) = x^{(k)^T} A\, d^{(k)} \quad \ldots \text{ skalár}$$

$$\frac{d}{dt}\left(t\, d^{(k)^T} A\, x^{(k)}\right) = \underbrace{d^{(k)^T} A\, x^{(k)}}\quad \ldots \text{ skalár}$$

$$= \left(d^{(k)^T} A\, x^{(k)}\right)^T = \left(A x^{(k)}\right)^T \cdot d^{(k)} = x^{(k)^T} A^T d^{(k)}$$

Platí-li $A^T = A$, potom

$$x^{(k)^T} A\, d^{(k)} + d^{(k)^T} A\, x^{(k)} = \underline{\underline{2\, x^{(k)^T} A\, d^{(k)}}}$$

Algoritmus metody největšího spádu potom můžeme zapsat takto:

1) volba $\mathbf{x}^{(0)}$, ε

2) výpočet směru spádu $\mathbf{d}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}$

3) výpočet koeficientu $t^{(k)} = \dfrac{\mathbf{d}^{(k)T}\,\mathbf{d}^{(k)}}{\mathbf{d}^{(k)T}\mathbf{A}\,\mathbf{d}^{(k)}}$

4) výpočet nové iterace $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + t^{(k)}\mathbf{d}^{(k)}$

5) $k = k+1$ a zpět na 2) pokud $\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| > \varepsilon$

Poznámka: Abychom ušetřili operace násobení matice a vektoru, určíme $d^{(k+1)}$ takto:

$$d^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)} = b - A\left(x^{(k)} + t^{(k)}d^{(k)}\right) =$$

$$= d^{(k)} - t^{(k)}\underbrace{A\,d^{(k)}}$$

toto se počítalo
v kroku 3
v předchozí iteraci

$\boxed{\text{Věta}}$: Metoda největšího spádu konverguje (pro symetrickou, pozitivně definitní matici) pro libovolnou volbu počáteční aproximace k přesnému řešení soustavy $\mathbb{A}x = b$.

$\boxed{\text{Věta}}$ Nechť x^* je bodem minima kvadratické funkce $F(x)$ a $x^{(k)}$ je aproximace získaná metodou největšího spádu. Potom

$$\boxed{\| x^{(k)} - x^* \|_A = \left(\frac{\varkappa(A) - 1}{\varkappa(A) + 1} \right)^k \cdot \| x^{(0)} - x^* \|_A , \quad x^{(0)} \in \mathbb{R}^N}$$

kde $\varkappa(A) = \dfrac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$, $\quad \|.\|_A = \sqrt{(Ax, x)} = \sqrt{x^T A x}$

.... energetická norma

Důkaz: dokážeme konvergenci v normě $\|\cdot\|_A$.

$\|\cdot\|_A$ je s euklidovskou normou ekvivalentní, tj z toho již plyne i konvergence v $\|\cdot\|_2$

(Def: X.. lin prostor, $\|\cdot\|_1$ a $\|\cdot\|_2$ .. normy na X

$\|\cdot\|_1$ a $\|\cdot\|_2$ jsou ekvivalentní, existují-li čísla $c, C > 0$: $\forall x \in X$

$$c\|x\|_1 \leq \|x\|_2 \leq C\|x\|_1$$)

x^* ... přesné řešení $Ax = b$

$e^{(k)} = x^{(k)} - x^*$ ... chyba k-té iterace

$$\boxed{F(x^{(k)}) - F(x^*) = F(x^* + e^{(k)}) - F(x^*) = \frac{1}{2} e^{(k)T} A e^{(k)}}$$

(pro 2 body $x, x + \lambda d$ platí:

$$\boxed{F(x+\lambda d) - F(x)} = \frac{1}{2}(x+\lambda d)^T A (x+\lambda d) - b^T(x+\lambda d) - \frac{1}{2}x^T A x + b^T x =$$

$$= \lambda x^T A d + \frac{1}{2}\lambda^2 d^T A d - \lambda b^T d =$$

$$= \boxed{\lambda \cdot d^T (Ax - b) + \frac{1}{2}\lambda^2 d^T A d}$$

[pro náš případ $x = x^*, \lambda = 1, d = e^{(k)}$

$\Rightarrow$ —"— $= 0$])

$$\boxed{F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)}) = \frac{1}{2} e^{(k+1)T} A e^{(k+1)} - \frac{1}{2} e^{(k)T} A e^{(k)}}$$

$\hookrightarrow x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^{(k)} r^{(k)}$

$$F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)}) = \lambda^{(k)} r^{(k)T} \overbrace{(Ax^{(k)} - b)}^{-r^{(k)}} + \frac{1}{2} \lambda^{(k)2} r^{(k)T} A r^{(k)} =$$

$\lambda^{(k)}$ jsme počítali podle

$$\boxed{\lambda^{(k)} = \frac{r^{(k)T} r^{(k)}}{r^{(k)T} A r^{(k)}}}$$

$$= -\frac{\left(r^{(k)T} \cdot r^{(k)}\right)^2}{r^{(k)T} A r^{(k)}} + \frac{1}{2} \frac{\left(r^{(k)T} r^{(k)}\right)^2}{\left(r^{(k)T} A r^{(k)}\right)^2} \cdot r^{(k)T} A r^{(k)}$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\left(r^{(k)T} \cdot r^{(k)}\right)^2}{r^{(k)T} A r^{(k)}}$$

$$\boxed{-\frac{1}{2} \frac{\left(r^{(k)T} \cdot r^{(k)}\right)^2}{r^{(k)T} A r^{(k)}} = \frac{1}{2} e^{(k+1)T} A e^{(k+1)} - \frac{1}{2} e^{(k)T} A e^{(k)}}$$

a) $\cdot 2$

b) posl. člen převedeme

c) vydělíme tím

$$\boxed{\frac{e^{(k+1)T} A e^{(k+1)}}{e^{(k)T} A e^{(k)}} = 1 - \frac{\left(r^{(k)T} \cdot r^{(k)}\right)^2}{r^{(k)T} A r^{(k)} \cdot e^{(k)T} \underbrace{A e^{(k)}}_{r^{(k)}}}}$$

platí $\boxed{A e^{(k)} = r^{(k)}}$, protože

$$A x^* - b = 0$$

$$r^{(k)} = b - \underbrace{A x^{(k)} + A x^*}_{A\underbrace{(x^* - x^{(k)})}_{e^{(k)}}} - b$$

$$\Downarrow$$

$$e^{(k)} = A^{-1} r^{(k)}$$

$$\| e^{(k)} \| \le \| A^{-1} \| \cdot \| r^{(k)} \|$$

Dostáváme odhad:

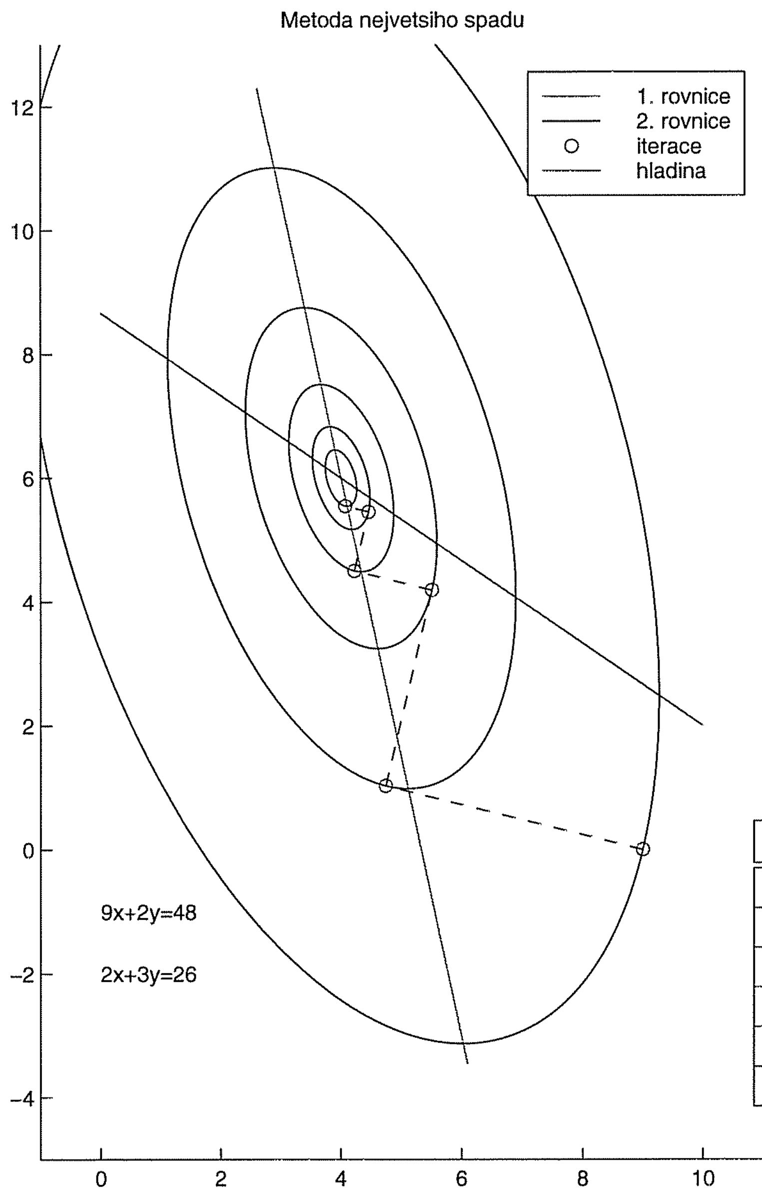
$$\frac{e^{(k+1)T} A e^{(k+1)}}{e^{(k)T} A e^{(k)}} \leq 1 - \frac{\cancel{\|r^{(k)}\|^4}}{\|A\| \cdot \cancel{\|r^{(k)}\|^2}\, \|A^{-1}\| \cdot \cancel{\|r^{(k)}\|^2}} =$$

$$\leq 1 - \frac{1}{\|A\| \cdot \|A^{-1}\|} = q < 1$$

$$e^{(k+1)T} A e^{(k+1)} \leq q \cdot e^{(k)T} A e^{(k)} \quad \forall k$$

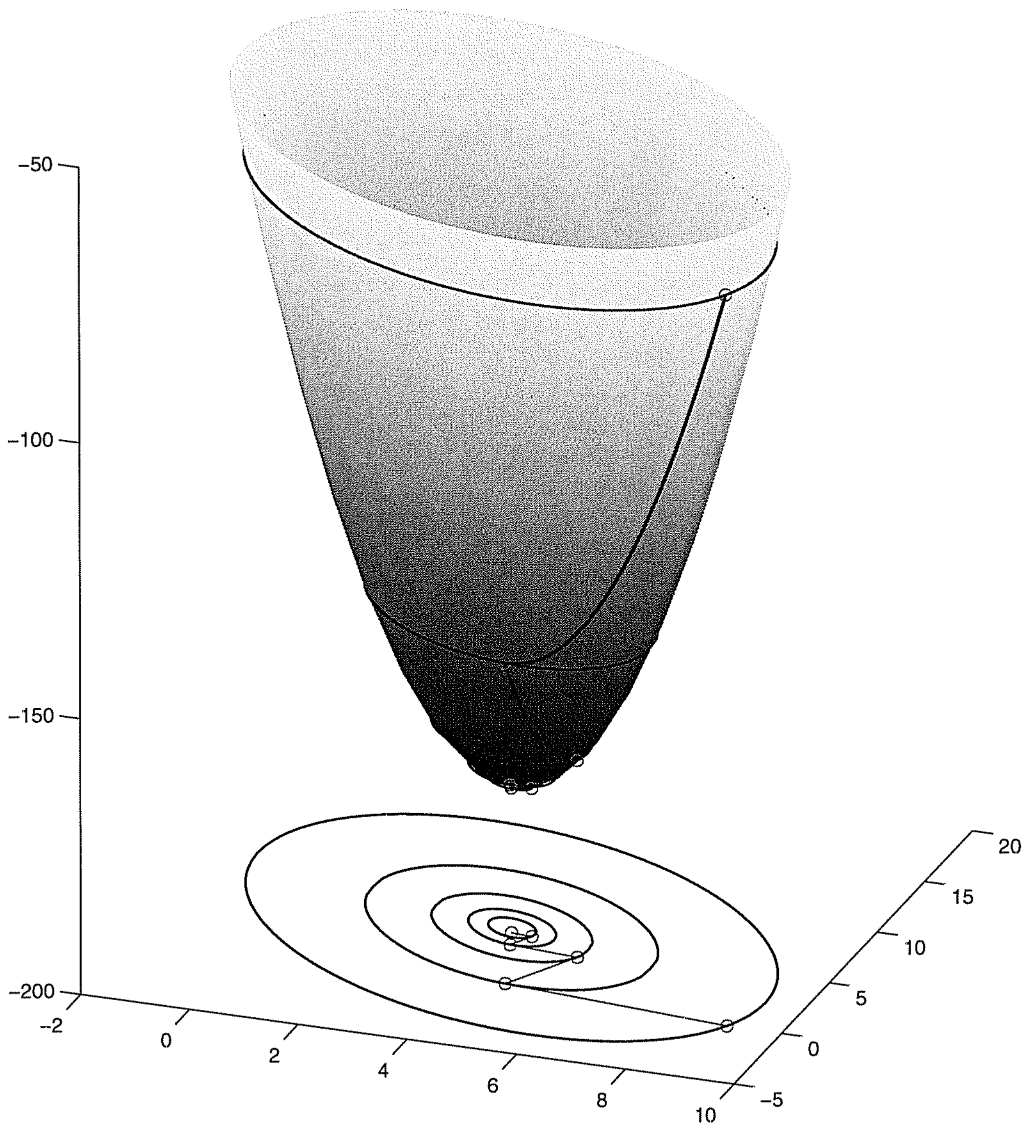
$$\Rightarrow \lim_{k \to \infty} e^{(k+1)T} A e^{(k+1)} = 0 \Rightarrow \boxed{\lim_{k\to\infty} \|e^{(k)}\| = 0}$$

GEOMETRICKÝ VÝZNAM METODY NEJVĚTŠÍHO SPÁDU



k	$x^{(k)}$	$y^{(k)}$
0	9.0000	0
1	4.7425	1.0321
2	5.5081	4.1902
3	4.2240	4.5015
4	4.4549	5.4541
5	4.0676	5.5480

GEOMETRICKÝ VÝZNAM METODY NEJVĚTŠÍHO SPÁDU VE 3D



Pro soustavu dvou rovnic si opět lze udělat geometrickou představu. Všimněme si faktu, že vždy po sobě jdoucí iterace směru spádu, tj. $\mathbf{d}^{(k)}$ a $\mathbf{d}^{(k+1)}$ jsou na sebe kolmé.

Cvičení: Dokažte, že platí $\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k+1)} = 0$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k+1)} &= \mathbf{d}^{(k)^T}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)}) = \\
&= \mathbf{d}^{(k)^T}(\mathbf{b} - \mathbf{A}(\mathbf{x}^{(k)} + t^{(k)}\mathbf{d}^{(k)})) = \\
&= \mathbf{d}^{(k)^T}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} - t^{(k)}\mathbf{A}\,\mathbf{d}^{(k)}) = \\
&= \mathbf{d}^{(k)^T}(\mathbf{d}^{(k)} - t^{(k)}\mathbf{A}\,\mathbf{d}^{(k)}) = \\
&= \mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k)} - t^{(k)}\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{A}\,\mathbf{d}^{(k)} = \\
&= \mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k)} - \frac{\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k)}}{\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{A}\,\mathbf{d}^{(k)}}\mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{A}\,\mathbf{d}^{(k)} = \\
&= \mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k)} - \mathbf{d}^{(k)^T}\mathbf{d}^{(k)} = 0
\end{aligned}
$$

Poznámka: V případě, že budou hladiny (elipsy) „velmi protáhlé“, bude metoda největšího spádu konvergovat velmi pomalu, nastane tzv. *cik-cak efekt.* Na druhou stranu, pokud budou hladiny (elipsy) „skoro kružnice“, bude metoda největšího spádu konvergovat velmi rychle. Nevýhodu cik-cak efektu odstraňuje nová metoda, tzv. **metoda sdružených gradientů**, která využívá důmyslnější volby směrů minimalizace, a sice tak, aby se neopakovali, jak k tomu docházelo u metody největšího spádu.

viz první příklad

$$A = \begin{bmatrix} 25 & 0 \\ 0 & 16 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 25 \\ 8 \end{bmatrix}$$

jedna z vrstevnic:

$$\boxed{\frac{(x-1)^2}{4^2} + \frac{(y-\frac{1}{2})^2}{5^2} = 1}$$

poměr poloos: $4 : 5$

$$\sqrt{\lambda_2} = \sqrt{16} \qquad \sqrt{25} = \sqrt{\lambda_1}$$

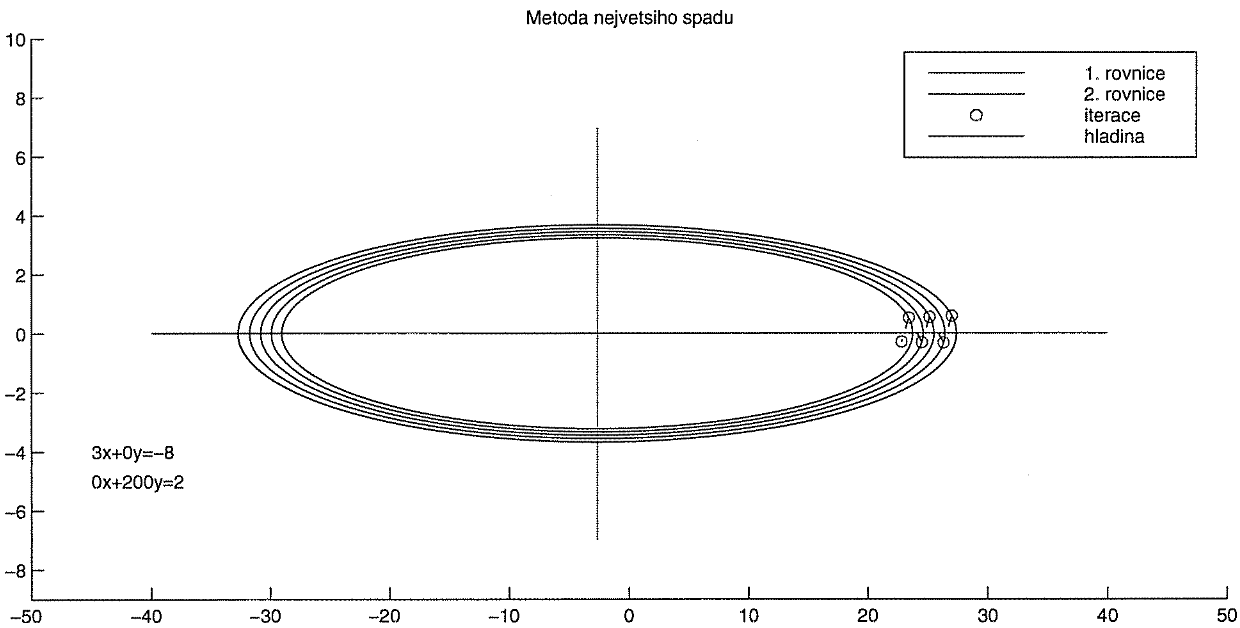
$$\boxed{\sqrt{\lambda_2} : \sqrt{\lambda_1}}$$

Pozn.:
- Pro případ $\lambda_2 \gg \lambda_1$ získáme protáhlé elipsy
- Pro případ $\lambda_2 \approx \lambda_1$ získáme skoro kružnice

Příklad 1. Pomocí metody největšího spádu řešte soustavu

$$3x + 0y = -8$$
$$0x + 200y = 2$$

Jako počáteční aproximaci volte $x^{(0)} = 27$, $y^{(0)} = 0.6$.



k	$x^{(k)}$	$y^{(k)}$
0	27.000000	0.600000
1	26.307758	-0.317804
2	25.139940	0.563008
3	24.491101	-0.297251
4	23.396504	0.528335
5	22.788346	-0.277987
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
250	-2.657606	0.010180

(Přesné řešení soustavy je $[\tilde{x}, \tilde{y}] = \left[-\frac{8}{3}, \frac{1}{100}\right]$.)

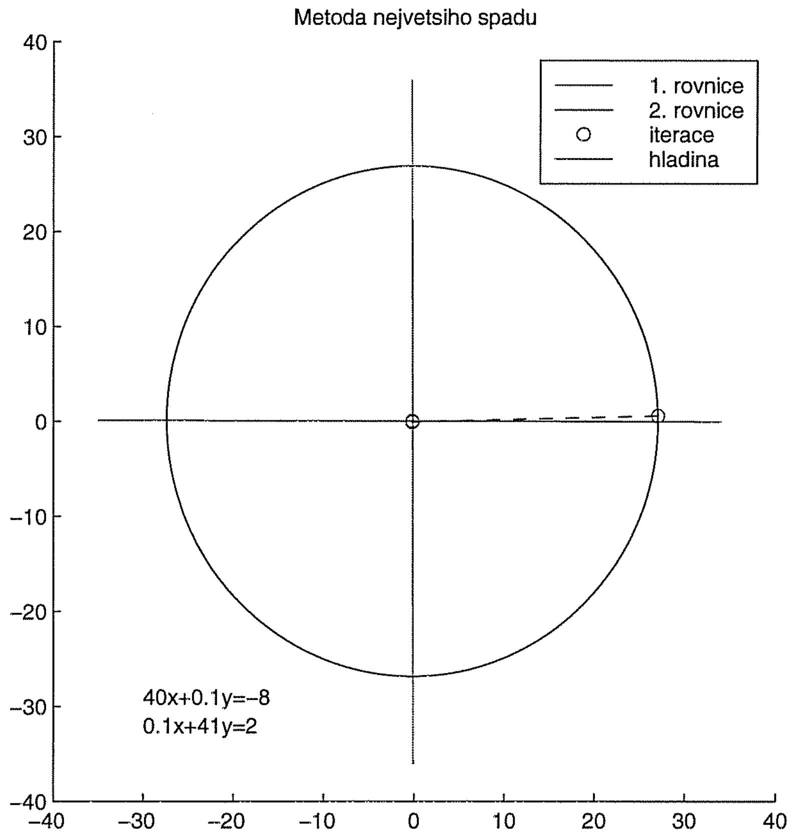
$\lambda_1 = 3$

$\lambda_2 = 200$

Příklad 2. Pomocí metody největšího spádu řešte soustavu

$$40x + 0.1y = -8$$
$$0.1x + 41y = 2$$

Jako počáteční aproximaci volte $x^{(0)} = 27$, $y^{(0)} = 0.6$.



k	$x^{(k)}$	$y^{(k)}$
0	27.000000	0.600000
1	-0.197972	-0.032418
2	-0.199872	0.049274
3	-0.200123	0.049268

(Přesné řešení se na 6 desetiných míst shoduje s $[x^{(3)}, y^{(3)}]$.)

$\lambda_1 \doteq 39{,}99$

$\lambda_2 \doteq 41{,}01$

Poznámky:

$$\boxed{\|x^{(k)} - x^*\|_A = \left(\frac{\varkappa(A) - 1}{\varkappa(A) + 1}\right)^k \cdot \|x^{(0)} - x^*\|_A}$$

- je-li $\underline{\underline{\varkappa(A) \gg 1}}$, tj. $\underline{\underline{\lambda_{max} \gg \lambda_{min}}}$, pak metoda největšího spádu konverguje pomalu

$$\frac{\varkappa(A) - 1}{\varkappa(A) + 1} = \frac{\varkappa(A) - 1 + 1 - 1}{\varkappa(A) + 1} = 1 - \frac{2}{\varkappa(A) + 1} \lesssim 1$$

$$\frac{2}{\varkappa(A)+1} \to 0 \quad (\varkappa(A) \to \infty)$$

- je-li $\underline{\underline{\varkappa(A) \gtrsim 1}}$, tj. $\underline{\underline{\lambda_{max} \approx \lambda_{min}}}$, pak metoda největšího spádu konverguje rychle

$$\frac{\varkappa(A) - 1}{\varkappa(A) + 1} = 1 - \underbrace{\frac{2}{\varkappa(A) + 1}}_{\lesssim 1} \approx 0$$

- Pokud jsou vrstevnice sféry (v R^2 kružnice), potom metoda největšího spádu nalezne řešení (přesné) v jednom kroku.

Poznámka: Směr, ve kterém provádíme minimalizaci v rámci jednoho kroku můžeme volit i jinak než směr největšího spádu. Označme ho $s^{(k)}$

$$\boxed{x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda \cdot s^{(k)}}$$

$$\boxed{\min_{\lambda>0} \underbrace{F(x^{(k)} + \lambda\, s^{(k)})}_{\Phi(\lambda)}}$$

$$\Phi(\lambda) = \frac{1}{2}(x^{(k)} + \lambda\, s^{(k)})^T A (x^{(k)} + \lambda\, s^{(k)}) - b^T (x^{(k)} + \lambda\, s^{(k)})$$

$$\frac{d\Phi(\lambda)}{d\lambda} = \lambda\, s^{(k)T} A s^{(k)} + \underbrace{x^{(k)T} A s^{(k)} - b^T s^{(k)}}_{\underbrace{(x^{(k)T} A - b^T)}_{(A x^{(k)} - b)^T \ldots \text{ reziduum } r^{(k)}} s^{(k)}} = 0$$

$$\boxed{\lambda^{(k)} = \frac{-r^{(k)T} s^{(k)}}{s^{(k)T} A s^{(k)}}}$$

- Volíme-li za vektory $s^{(k)}$ postupně jednotkové vektory souřadných os, získáme Gauss-Seidelovu metodu !!!

```
>> gs_gm;

A =
     8     3     2
     3     6     1
     2     1     7

b =
    20
    18
    25

x0 =
     0
     0
     0

vysledky_gs =

         0         0         0
    2.5000    1.7500    2.6071
    1.1920    1.9695    2.9495
    1.0241    1.9964    2.9936
    1.0029    1.9996    2.9992
    1.0004    2.0000    2.9999
    1.0000    2.0000    3.0000
    1.0000    2.0000    3.0000
    1.0000    2.0000    3.0000

vysledky_gm =

         0         0         0
    2.5000    1.7500    2.6071
    1.1920    1.9695    2.9495
    1.0241    1.9964    2.9936
    1.0029    1.9996    2.9992
    1.0004    2.0000    2.9999
    1.0000    2.0000    3.0000
    1.0000    2.0000    3.0000
    1.0000    2.0000    3.0000

>> vysledky_gs-vysledky_gm

   1.0e-15 *

         0         0         0
         0         0         0
         0    0.2220         0
   -0.4441    0.2220   -0.4441
    0.2220   -0.4441    0.4441
    0.2220   -0.4441    0.4441
         0   -0.2220         0
    0.2220         0         0
         0         0         0

>>
```

ÚVAHA: Při vhodné volbě směrových vektorů $s^{(k)}$ je možné dojít do přesného řešení za konečný počet kroků $\leq n$

Musí existovat n vektorů $s^{(k)}$ tak, že

$$\boxed{x^* - x^{(0)} = \sum_{k=1}^{n} t^{(k)} s^{(k)}} \qquad (\circledast)$$

? Jak volit směry $s^{(k)}$?

- Zkusíme takto: nechť $s^{(k)}$ tvoří bázi (ortogonální) n-rozměrného euklidovského prostoru, potom vynásobením $(\circledast)$ skalárně s $s^{(k)}$ a úpravou získáme

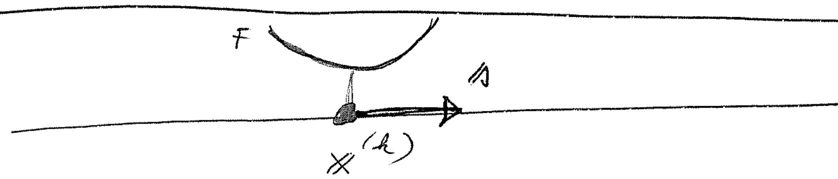
$$s^{(k)T}\left(x^* - x^{(0)}\right) = t^{(k)} s^{(k)T} \cdot s^{(k)}$$

$$\boxed{t^{(k)} = \frac{s^{(k)T}\left(x^* - x^{(0)}\right)}{s^{(k)T} s^{(k)}}} \quad \text{.... nesčítovné!}$$

- je třeba zvolit lepší strategii volby vektorů $s^{(k)}$

Definice $x^{(k)}$ je optimální vzhledem ke směru $s \neq 0$, jestliže

$$\boxed{F(x^{(k)}) \leq F(x^{(k)} + \lambda \cdot s) \qquad \forall \lambda \in \mathbb{R}}$$



Pozn: je-li $x^{(k)}$ optimální vzhledem k libovolnému směru z vektorového prostoru V, říkáme, že je $x^{(k)}$ optimální vzhledem k V.

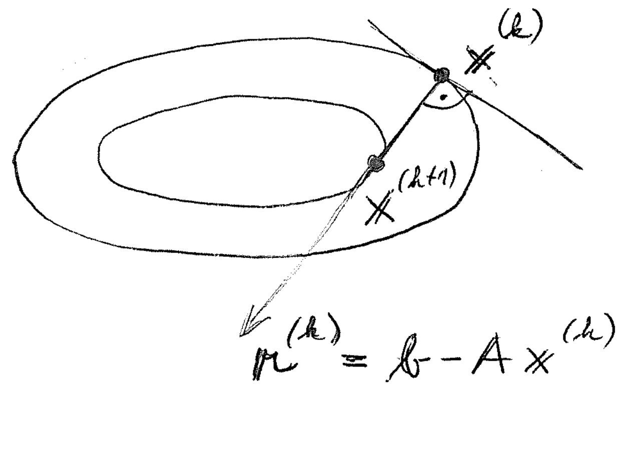
→ minima se nabývá pro $\lambda = 0$, tzn. že derivace F podle λ je v minimu $(\lambda = 0)$ rovna 0:

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda}(x^{(k)} + \lambda s) = \lambda s^T A s + s^T (A x^{(k)} - b)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda}(x^{(k)}) = s^T \underbrace{(A x^{(k)} - b)}_{r^{(k)} \ldots \text{ reziduum}} = 0$$

$$\boxed{s \perp r^{(k)}}$$

Poznámka: Iterace $x^{(k+1)}$ metody největšího spádu je optimální vzhledem k reziduu $r^{(k)}$ .... směry, ve kterých minimalizujeme



Naším cílem je, aby se i v dalších iteracích zachovávala optimalita k již použitým směrům. To pro metodu největšího spádu bohužel neplatí!

(např. pro soustavu ve 2D jsme ukazovali, že směry největšího spádu (reziduí) jsou na sebe kolmé, tj. $r^{(k)} \perp r^{(k+1)}$ a $r^{(k+1)} \perp r^{(k+2)}$

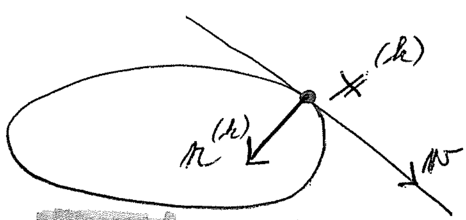
$\Rightarrow \boxed{r^{(k)} \parallel r^{(k+2)}}$!!!

$x^{(k+2)}$ je optimální vzhledem k $r^{(k+1)}$, ale již není optimální vzhledem k $r^{(k)}$)

? Existuje směry, které udrží optimalitu k předchozím?

Nechť $\boxed{x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta}$

Předpokládejme, že $x^{(k)}$ je optimální vzhledem k v (tj. $r^{(k)} \perp v$)



Chceme-li, aby bylo i $x^{(k+1)}$ optimální vzhledem k v, (tj. $r^{(k+1)} \perp v$), musí platit:

$$\boxed{0 = v^T r^{(k+1)}} = v^T\left(b - A x^{(k+1)}\right) = v^T\left(b - A\left(x^{(k)} + \Delta\right)\right) =$$

$$= v^T\big(\underbrace{b - A x^{(k)}}_{r^{(k)}} - A\Delta\big) = v^T\left(r^{(k)} - A\Delta\right) = \boxed{-v^T A \Delta}$$

Závěr: Chceme-li zachovat optimalitu vzhledem ke všem použitým směrům, musí tyto směry splňovat podmínky tzv. A-ortogonality, tj. pro 2 různé směry s a v musí platit:

$$\boxed{v^T A s = 0}$$

Pozn: Vektorům, které jsou A-ortogonální se také říká A-sdružené.

Metoda sdružených gradientů

Za směry, ve kterých minimalizujeme budeme brát A-ortogonální vektory $s^{(k)}$. Platí tedy:

$$\boxed{s^{(k)T} A \, s^{(l)} = 0 \qquad k \neq l}$$

Chceme, aby platilo:

$$s^{(k)T} A \, . / \quad \boxed{x^* - x^{(0)} = \sum_{k=1}^{n} \lambda^{(k)} s^{(k)}} \qquad (\bullet)$$

$$s^{(k)T} \underbrace{A\left(x^* - x^{(0)}\right)} = \lambda^{(k)} \cdot s^{(k)T} A \, s^{(k)}$$

$$A x^* - A x^{(0)} = \underbrace{A x^* - b}_{=0} \underbrace{- A x^{(0)} + b}_{-r^{(0)}}$$

$$\boxed{\lambda^{(k)} = - \frac{s^{(k)T} r^{(0)}}{s^{(k)T} A \, s^{(k)}}}$$

Strategie volby směrů

- máme-li ortogonální bázi R^n, lze z ní procesem A-ortogonalizace získat A-ortogonální bázi.
- za ortogonální bázi budeme volit reziduové vektory (aby proces ortogonalizace vedl k cíli, musíme zaručit, že reziduové vektory tvoří bázi. Ortogonalitu ukážeme zápětí; může se stát, že se některé reziduum anuluje. Potom ovšem iterační proces končí – dosáhli jsme přesného řešení.)

- Provádíme tedy současně 2 procesy!
  - iterační proces
  - proces A-ortogonalizace

- vektory reziduí budeme značit $r^{(k)}$

  získané sdružené směry označíme $s^{(k)}$

  - pro zadané $x^{(0)}$ určíme $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$
  - $s^{(0)}$ položíme rovno $r^{(0)}$
  - určíme $x^{(1)}$ optimální vzhledem k $s^{(0)}$
  - určíme $r^{(1)}$
  - $s^{(1)}$ určujeme z $r^{(1)}$ tak, aby $\underline{s^{(1)T} A s^{(0)} = 0}$

  $\vdots$

Proces A-ortogonalizace:

$$\boxed{s^{(k)} = r^{(k)} + \sum_{i=1}^{k-1} \beta_{ki} s^{(i)}} \qquad (\circ\circ)$$

(Při určení $s^{(k)}$ vyjdeme z $r^{(k)}$. Přičítáme násobky předchozích $s^{(i)}$ tak, aby chom zaručili A-ortogonalitu)

β_{ki} volíme tak, aby $\boxed{s^{(k)T} A s^{(i)} = 0 \quad (i<k)}$

$(\circ\circ)$ vynásobíme $s^{(i)T} A$ /

$$\underbrace{s^{(i)T} A s^{(k)}}_{=0} = s^{(i)T} A r^{(k)} + \beta_{ki} s^{(i)T} A s^{(i)}$$

$$\Rightarrow \boxed{\beta_{ki} = - \frac{s^{(i)T} A r^{(k)}}{s^{(i)T} A s^{(i)}}}$$

➡ Z vlastností A-ortogonality vyplývá řada skutečností:

Věta ① Platí:
$$\boxed{\begin{array}{ll} r^{(k)T} \cdot s^{(j)} = r^{(0)T} \cdot s^{(j)} & k \le j \\ r^{(k)T} \cdot s^{(j)} = 0 & k > j \end{array}}$$

Dk:

$-b$ / A / $\quad x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^{(k)} s^{(k)}$

$$\Rightarrow r^{(k+1)} = r^{(k)} + \lambda^{(k)} A s^{(k)}$$

$$\Rightarrow r^{(k)} = r^{(0)} + \sum_{j=1}^{k-1} \lambda^{(j)} A s^{(j)}$$

vynásobíme skalárně s $s^{(j)}$

$$\boxed{r^{(k)T} \cdot s^{(j)} = r^{(0)T} s^{(j)} + \lambda^{(j)} s^{(j)T} A s^{(j)}}$$

počítáme podle $\lambda^{(j)} = \dfrac{r^{(0)T} \cdot s^{(j)}}{s^{(j)T} A s^{(j)}}$ viz dříve

<u>Věta</u> ② Platí:

$$\boxed{\begin{aligned} s^{(j)T} A r^{(k)} &= 0 \qquad j > k \\ s^{(j)T} A r^{(j)} &= s^{(j)T} A s^{(j)} \end{aligned}}$$

<u>Dk:</u> vztah (●●) vynásobíme skalárně s $A s^{(j)}$

$$s^{(j)T} A s^{(k)} = s^{(j)T} A r^{(k)} + \sum_{i=1}^{k-1} \beta_{ki}\, s^{(j)T} A s^{(i)}$$

pokud $k < j$: $=0$ $\qquad =0$

pokud $k = j$: $\qquad =0$

■

Věta Vektory $r^{(k)}$ jsou vzájemně ortogonální.

<u>Dk:</u> úplnou indukcí ukážeme, že $\boxed{r^{(j)T} \cdot r^{(k)} = 0 \text{ pro } j > k}$

1) <u>$j=1$</u> $\quad r^{(1)T} \cdot r^{(0)} = (r^{(0)} + \lambda^{(0)} A s^{(0)})^T \cdot r^{(0)} = r^{(0)T} \cdot r^{(0)} + \lambda^{(0)} s^{(0)T} A r^{(0)}$

$$= r^{(0)T} r^{(0)} - \frac{r^{(0)T} s^{(0)}}{s^{(0)T} A s^{(0)}}\, s^{(0)T} A r^{(0)} = 0 \qquad (r^{(0)} = s^{(0)})$$

2) a) <u>$\forall k < j$</u> platí: ? $\boxed{r^{(j+1)T} r^{(k)} = 0}$?

$$r^{(j+1)T} r^{(k)} = (r^{(j)} + \lambda^{(j)} A s^{(j)})^T r^{(k)} = \underbrace{r^{(j)T} r^{(k)}}_{\substack{=0 \\ \text{(předpoklad)}}} + \lambda^{(j)} \underbrace{s^{(j)T} A r^{(k)}}_{\substack{=0 \\ \text{(věta ②)}}}$$

b) ? $\boxed{r^{(j+1)T} \cdot r^{(j)} = 0}$?

$$r^{(j+1)T} r^{(j)} = (r^{(j)} + \lambda^{(j)} A s^{(j)})^T r^{(j)} = r^{(j)T} r^{(j)} + \lambda^{(j)} s^{(j)T} A r^{(j)}$$

věta ① $=$

$$= r^{(j)T} r^{(j)} - \frac{r^{(0)T} s^{(j)}}{s^{(j)T} A s^{(j)}}\, s^{(j)T} A r^{(j)} = 0$$

$=$ věta ②

■

Věta ③ Pro koeficienty β_{ki} z A-ortogonalizace platí, že

$$\boxed{\begin{aligned} &\beta_{ki} = 0 \quad \forall i < k-1 \\ &\beta_{k,k-1} \neq 0 \end{aligned}}$$

(tj. při ortogonalizaci stačí k $r^{(k)}$ přičítat pouze $\beta_{k,k-1}$ násobek $s^{(k-1)}$, A-ortogonalita k předchozím $s^{(i)}$, $i < k-1$ je automaticky zaručena.)

Dk: platí:

$$\beta_{ki} = -\frac{s^{(i)T} A r^{(k)}}{s^{(i)T} A s^{(i)}}$$

$$= r^{(k)T} A s^{(i)} = r^{(k)T} \cdot \frac{1}{\lambda^{(i)}} \cdot \left(r^{(i+1)} - r^{(i)}\right)$$

$\neq 0$ pro $r^{(i)} \neq 0$

$$\underline{r^{(i+1)} = r^{(i)} + \lambda^{(i)} A s^{(i)}}$$

pro $i < k-1$:

$$\text{čitatel } \beta_{ki} = r^{(k)T}\left(r^{(i+1)} - r^{(i)}\right) \cdot \frac{1}{\lambda^{(i)}} = 0$$

pro $i = k-1$:

$$\text{čitatel } \beta_{k,k-1} = r^{(k)T}\left(r^{(k)} - r^{(k-1)}\right) \frac{1}{\lambda^{(k-1)}} \neq 0$$

pro $r^{(k)} \neq 0$

∎

ALGORITMUS METODY SDRUŽENÝCH GRADIENTŮ

1) $x^{(0)}$

2) $r^{(0)} = A x^{(0)} - b \,, \quad s^{(0)} = r^{(0)}$

3) $$\alpha^{(k)} = - \frac{s^{(k)T} \cdot r^{(k)}}{s^{(k)T} A s^{(k)}}$$

4) $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} s^{(k)}$

5) $r^{(k+1)} = r^{(k)} + \alpha^{(k)} A s^{(k)}$

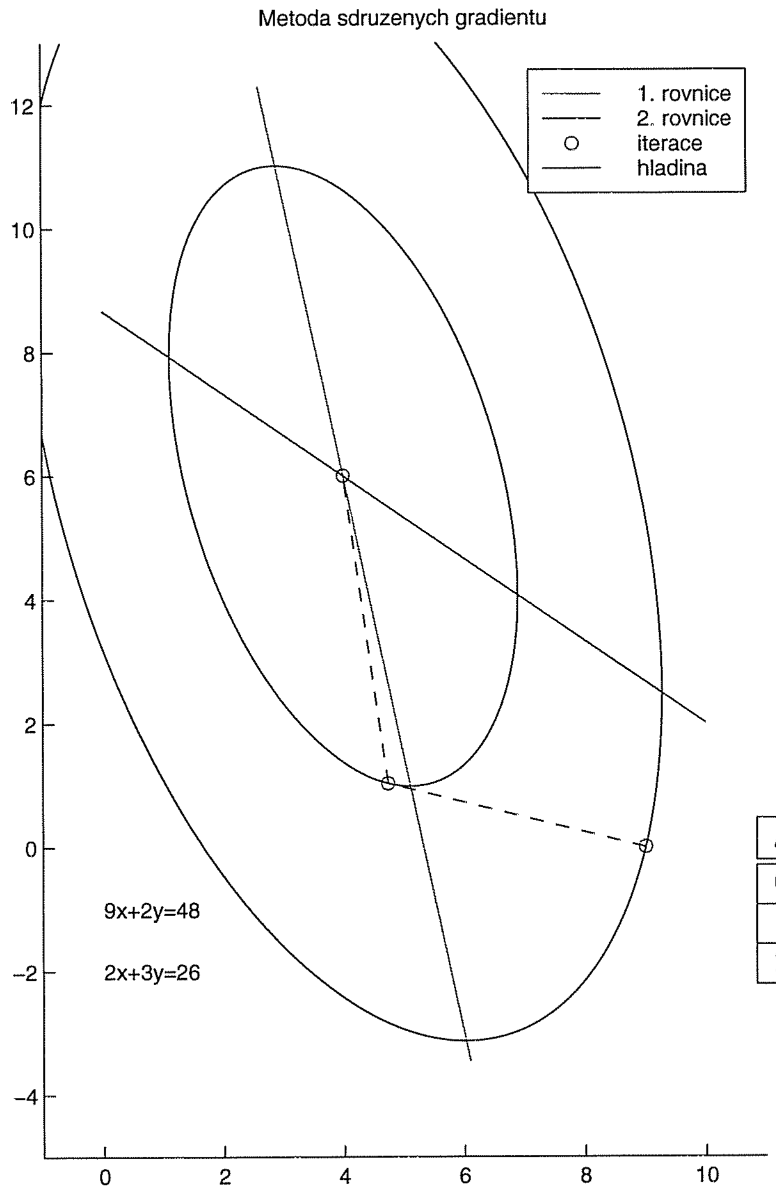
6) $$\beta_k = - \frac{s^{(k)T} A r^{(k+1)}}{s^{(k)T} A s^{(k)}}$$

7) $s^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k \cdot s^{(k)}$

8) IF $\| x^{(k+1)} - x^{(k)} \| < \varepsilon$ THEN KONEC

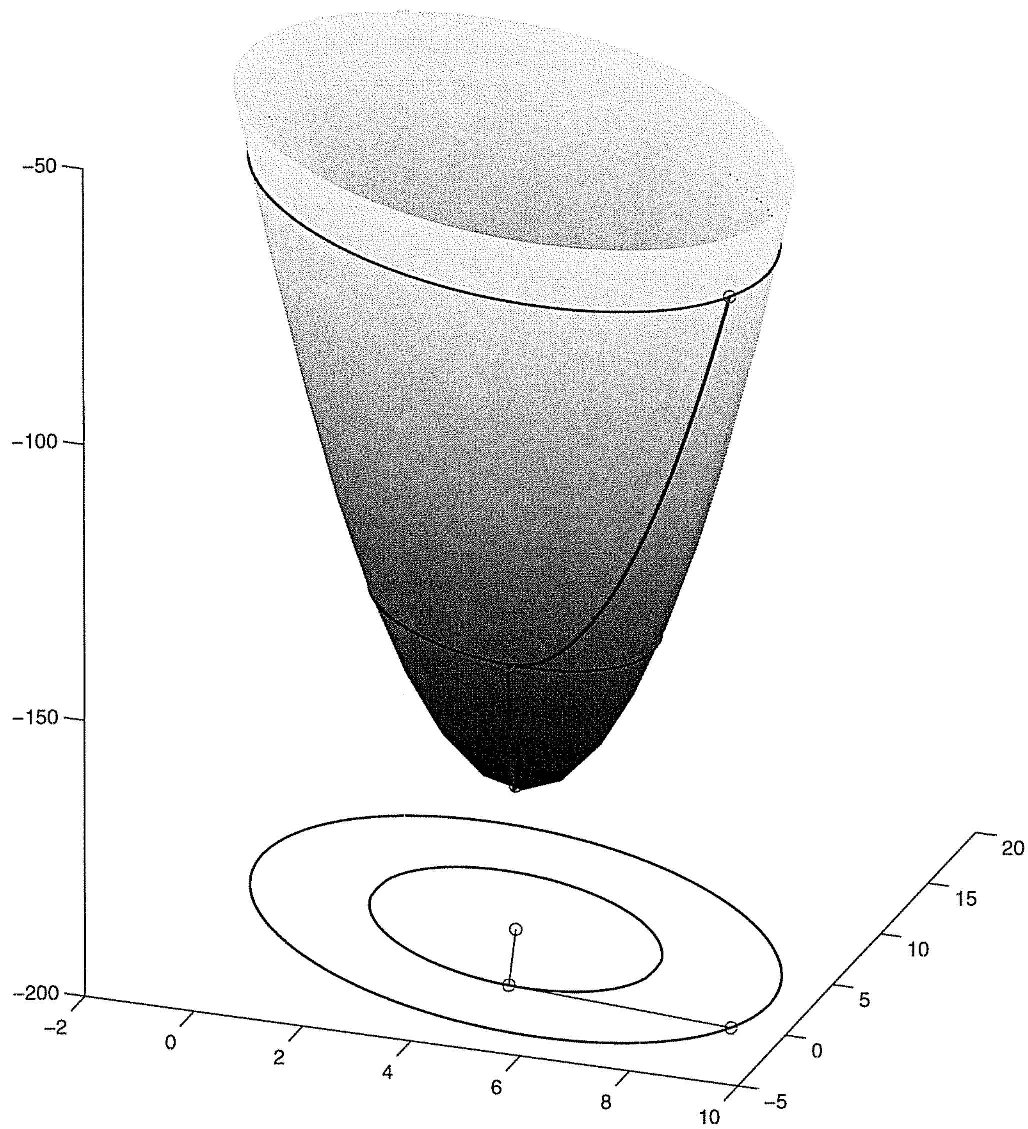
ELSE

GEOMETRICKÝ VÝZNAM METODY SDRUŽENÝCH GRADIENTŮ



k	$x^{(k)}$	$y^{(k)}$
0	9.0000	0
1	4.7425	1.0321
2	4.0000	6.0000

GEOMETRICKÝ VÝZNAM METODY SDRUŽENÝCH GRADIENTŮ VE 3D



Poznámka Gradientní metody patří mezi **nestacionární metody**

např. pro metodu největšího spádu:

$$
\begin{aligned}
\boxed{x^{(k+1)}} &= x^{(k)} + \lambda^{(k)} d^{(k)} = \\
&= x^{(k)} + \lambda^{(k)} \left(b - A x^{(k)}\right) = \\
&= \underbrace{\left(I - \lambda^{(k)} A\right)}_{H^{(k)}} x^{(k)} + \underbrace{\lambda^{(k)} b}_{g^{(k)}}
\end{aligned}
$$

V každém kroku se mění matice $H^{(k)}$.

Platí-li $\|H^{(k)}\| \to 0$ (pro $k \to \infty$), dostaneme metody se superlineární rychlostí konvergence.

Věta Nechť A je symetrická pozitivně definitní. Potom metoda sdružených gradientů konverguje nejvýše po n krocích.
<u>Navíc chyba k-té iterace ($k < n$) je ortogonální na směry $s^{(j)}$, $j = 0, 1, \dots k-1$</u> a platí:

$$\boxed{\| x^{(k)} - x^* \|_A \leq \frac{2C^k}{1 + C^{2k}} \| x^{(0)} - x^* \|_A}$$

kde

$$C = \frac{\sqrt{\varkappa(A)} - 1}{\sqrt{\varkappa(A)} + 1}, \quad \varkappa(A) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$$

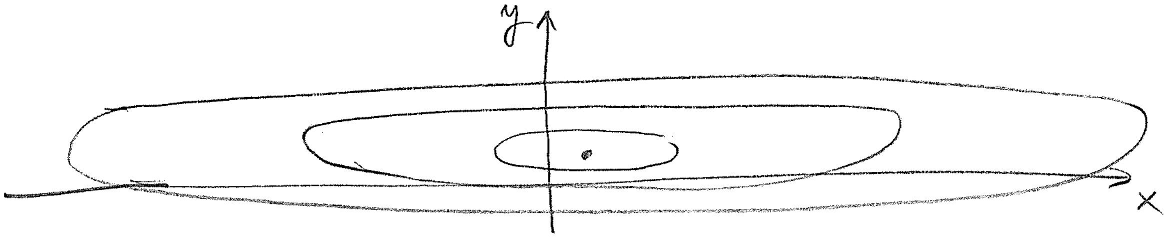
<u>Pozn</u> V metodě největšího spádu vystupuje ve vztahu pro chybu k-té iterace koeficient

$$\left(\frac{\varkappa(A) - 1}{\varkappa(A) + 1} \right)^k.$$

Je zřejmé, že na rychlost konvergence má vliv číslo $\varkappa(A)$, tj λ_{max} a λ_{min}
Čím blíže je λ_{max} a λ_{min}, tím rychleji metody konvergují.

Příklad: $A = \begin{bmatrix} 10000 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad b = \begin{bmatrix} 10000 \\ 1 \end{bmatrix}$ $\quad x^* = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

$\boxed{Ax = b}$



→ poměr poloos elips $= \sqrt{10000} : \sqrt{1} = 100 : 1$!!!

→ $\varkappa(A) = \dfrac{10000}{1} = 10000 \Rightarrow$ pomalá konvergence!

Vezměme si matici $P^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{10000} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad (\det(P^{-1}) \neq 0)$

a řešme soustavu $\boxed{\underbrace{P^{-1}A}\, x = P^{-1}b}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

→ $\varkappa(P^{-1}A) = \dfrac{1}{1} = 1 \Rightarrow$ rychlá konvergence (1. iterace)

Mluvíme o tzv. předpodmiňování

Chceme-li ovšem i novou soustavu řešit metodou sdružených gradientů, musí být její matice symetrická pozitivně definitní. Místo matice $P^{-1}A$ vezmeme matici (podobnou A) $P^{-\frac{1}{2}} A P^{-\frac{1}{2}}$ (P ... symetrická pozitivně definitní) a řešíme soustavu

$$\boxed{\bar{A}\,\bar{x} = \bar{b}}$$

$$\bar{A} = P^{-\frac{1}{2}} A P^{-\frac{1}{2}} \qquad \bar{x} = P^{\frac{1}{2}} x \qquad \bar{b} = P^{-\frac{1}{2}} b$$

? Jak volit matici předpodmínění P?

řada možností, např. $P = \mathrm{diag}(A)$

```
A =

      100000          200          30           4
         200        10000          30           4
          30           30         100           5
           4            4           5          10

Vlastni cisla matice A

   1.0e+05 *

   0.00009722475595
   0.00100176199725
   0.09999647672574
   1.00000453652105


Cislo podminenosti matice A

     1.028549289437760e+04

Predpodminovaci matice

P =
      100000            0           0           0
           0        10000           0           0
           0            0         100           0
           0            0           0          10

P^(1/2) =

   1.0e+02 *

   3.16227766016838                  0                  0                  0
                  0   1.00000000000000                  0                  0
                  0                  0   0.10000000000000                  0
                  0                  0                  0   0.03162277660168

P^(-1/2) =

   0.00316227766017                  0                  0                  0
                  0   0.01000000000000                  0                  0
                  0                  0   0.10000000000000                  0
                  0                  0                  0   0.31622776601684

Matice predpodminene soustavy

new_A =

   1.00000000000000   0.00632455532034   0.00948683298051   0.00400000000000
   0.00632455532034   1.00000000000000   0.03000000000000   0.01264911064067
   0.00948683298051   0.03000000000000   1.00000000000000   0.15811388300842
   0.00400000000000   0.01264911064067   0.15811388300842   1.00000000000000


Vlastni cisla matice predpodminene soustavy

   1.16436435763202
   0.84084776216427
   0.99222963783997
   1.00255824236374


Cislo podminenosti pro matici predpodminene soustavy



   1.38475049827695

>>
```