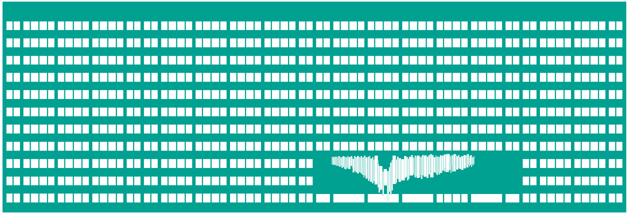
VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA

VSB TECHNICAL UNIVERSITY OF OSTRAVA



www.vsb.cz

Numerická lineární algebra 1

Řešení soustav lineárních rovnic - iterační metody (metoda největšího spádu, metoda sdružených gradientů, předpodmínění)

Michal Merta

VŠB – Technická univerzita Ostrava

michal.merta@vsb.cz

6. dubna 2023

VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA | IT4INNOVATIONS NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ CENTRUM

Geometrická interpretace řešení soustav lineárních rovnic

- Řešení soustavy

$$
\begin{aligned}
a_{1,1}x_1 + \ldots + a_{1,n}x_n &= b_1 \\
&\vdots \\
a_{n,1}x_1 + \ldots + a_{n,n}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

lze interpretovat jako hledání průsečíku n nadrovin v $\mathbb{R}^n$.

Geometrická interpretace řešení soustav lineárních rovnic

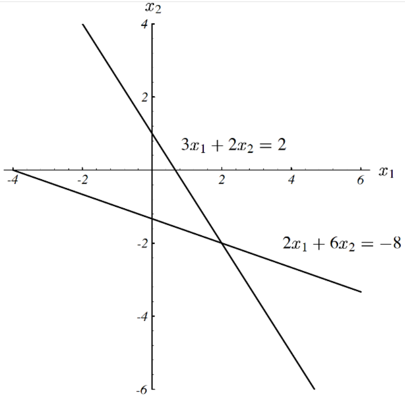
- Řešení soustavy

$$\begin{aligned} a_{1,1}x_1 + \ldots + a_{1,n}x_n &= b_1 \\ &\vdots \\ a_{n,1}x_1 + \ldots + a_{n,n}x_n &= b_n \end{aligned}$$

lze interpretovat jako hledání průsečíku n nadrovin v $\mathbb{R}^n$.

- Např.

$$\begin{aligned} 3x_1 + 2x_2 &= 2 \\ 2x_1 + 6x_2 &= -8 \end{aligned}$$



- Pokud je matice soustavy symetrická pozitivně definitní, můžeme řešení interpretovat jiným způsobem.

Věta

Řešení soustavy $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ se symetrickou pozitivně definitní maticí A je ekvivalentní s minimalizací kvadratické formy $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{x}.$$

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$f(\boldsymbol{p}) \quad = \quad f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c})$$

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$f(\boldsymbol{p}) \quad = \quad f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})^T\mathsf{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})$$

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{p}) &= f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})^T\mathsf{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \\
&= \tfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}}_{=\boldsymbol{b}} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c}
\end{aligned}
$$

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$\begin{aligned}
f(\boldsymbol{p}) &= f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})^T\mathsf{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \\
&= \tfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}}_{=\boldsymbol{b}} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c} = \\
&= \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}}_{=f(\boldsymbol{x})} + \underbrace{\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c}}_{=0} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c}
\end{aligned}$$

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{p}) &= f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})^T\mathsf{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \\
&= \tfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}}_{=\boldsymbol{b}} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c} = \\
&= \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}}_{=f(\boldsymbol{x})} + \underbrace{\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c}}_{=0} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} = f(\boldsymbol{x}) + \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c}}_{>0}.
\end{aligned}
$$

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{p}) &= f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})^T\mathsf{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \\ &= \tfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}}_{=\boldsymbol{b}} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c} = \\ &= \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}}_{=f(\boldsymbol{x})} + \underbrace{\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c}}_{=0} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} = f(\boldsymbol{x}) + \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c}}_{>0}. \end{aligned}$$

2. $\boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v}) \Rightarrow \mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$
   Využijeme nutnou podmínku minima $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, tedy nulovost gradientu.

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{p}) &= f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})^T\mathsf{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \\ &= \tfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}}_{=\boldsymbol{b}} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c} = \\ &= \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}}_{=f(\boldsymbol{x})} + \underbrace{\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c}}_{=0} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} = f(\boldsymbol{x}) + \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c}}_{>0}. \end{aligned}$$

2. $\boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v}) \Rightarrow \mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$
   Využijeme nutnou podmínku minima $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, tedy nulovost gradientu.

$$\boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v}) \Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{o}.$$

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{p}) &= f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})^T\mathsf{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \\ &= \tfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}}_{=\boldsymbol{b}} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c} = \\ &= \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}}_{=f(\boldsymbol{x})} + \underbrace{\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c}}_{=0} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} = f(\boldsymbol{x}) + \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c}}_{>0}. \end{aligned}$$

2. $\boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v}) \Rightarrow \mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$
   Využijeme nutnou podmínku minima $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, tedy nulovost gradientu.

$$\boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v}) \Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{o}.$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x})\right]^T = \frac{1}{2}\mathsf{A}^T\boldsymbol{x} + \frac{1}{2}\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}.$$

Dk.

1. $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v})$

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{p}) &= f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c})^T\mathsf{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}) = \\
&= \tfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}}_{=\boldsymbol{b}} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c} = \\
&= \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}}_{=f(\boldsymbol{x})} + \underbrace{\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{c}}_{=0} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c} = f(\boldsymbol{x}) + \underbrace{\frac{1}{2}\boldsymbol{c}^T\mathsf{A}\boldsymbol{c}}_{>0}.
\end{aligned}
$$

2. $\boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v}) \Rightarrow \mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$

   Využijeme nutnou podmínku minima $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, tedy nulovost gradientu.

$$\boldsymbol{x} = \arg\min_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{v}) \Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{o}.$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x})\right]^T = \frac{1}{2}\mathsf{A}^T\boldsymbol{x} + \frac{1}{2}\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}.$$

   Tedy $\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{o}$.

$\square$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{x}$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \dots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1} =$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1\right.$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i\right.$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i + x_2 a_{2,1} + \ldots + x_n a_{n,1}\right)$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i + x_2 a_{2,1} + \ldots + x_n a_{n,1}\right) - b_1$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i + x_2 a_{2,1} + \ldots + x_n a_{n,1}\right) - b_1$$

$$= \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1\right.$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1\sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2\sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n\sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i + x_2 a_{2,1} + \ldots + x_n a_{n,1}\right) - b_1$$

$$= \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i\right.$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i + x_2 a_{2,1} + \ldots + x_n a_{n,1}\right) - b_1$$

$$= \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{i,1}x_i\right) - b_1$$

- Ukažme, že $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

$$= \frac{1}{2}\left(x_1 \sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + x_2 \sum_{i=1}^n a_{2,i}x_i + \ldots + x_n \sum_{i=1}^n a_{n,i}x_i\right) - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

- Gradient je vektor parciálních derivací. Vypočtěme tedy:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i + x_2 a_{2,1} + \ldots + x_n a_{n,1}\right) - b_1$$

$$= \frac{1}{2}\left(2a_{1,1}x_1 + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{1,i}x_i + \sum_{i=1, i\neq 1}^n a_{i,1}x_i\right) - b_1 = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^n a_{1,i}x_i + \sum_{i=1}^n a_{i,1}x_i\right) - b_1$$

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{1,i}x_i + \sum_{i=1}^{n} a_{i,1}x_i\right) - b_1$$

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{1,i}x_i + \sum_{i=1}^{n} a_{i,1}x_i\right) - b_1 = \frac{1}{2}\left(2\sum_{i=1}^{n} a_{1,i}x_i\right) - b_1$$

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{1,i}x_i + \sum_{i=1}^{n} a_{i,1}x_i\right) - b_1 = \frac{1}{2}\left(2\sum_{i=1}^{n} a_{1,i}x_i\right) - b_1$$

- Obecně

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{n} a_{j,i}x_i - b_j$$

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{1,i}x_i + \sum_{i=1}^{n} a_{i,1}x_i\right) - b_1 = \frac{1}{2}\left(2\sum_{i=1}^{n} a_{1,i}x_i\right) - b_1$$

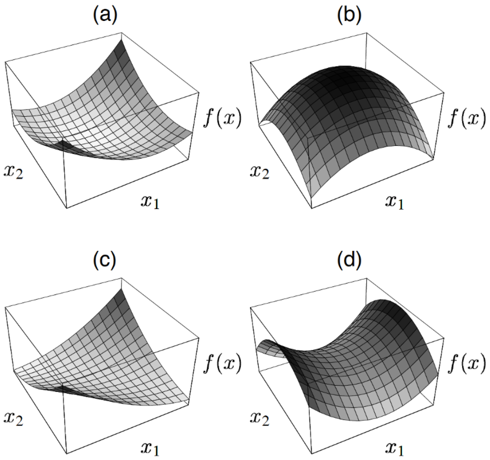
- Obecně

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{n} a_{j,i}x_i - b_j$$

- tedy

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} a_{1,i}x_i \\ \sum_{i=1}^{n} a_{2,i}x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} a_{n,i}x_i \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$$

- V případě soustavy se symetrickou pozitivně definitní maticí můžeme řešení interpretovat jako hledání minima pozitivně definitní kvadratické formy.



Metoda největšího spádu

- Metoda největšího spádu je iterační metoda s předpisem

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{v}^k.$$

Metoda největšího spádu

- Metoda největšího spádu je iterační metoda s předpisem

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{v}^k.$$

- Směr $\boldsymbol{v}^k$ volíme jako směr největšího poklesu funkce f.

Metoda největšího spádu

- Metoda největšího spádu je iterační metoda s předpisem

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{v}^k.$$

- Směr $\boldsymbol{v}^k$ volíme jako směr největšího poklesu funkce f.
- Pro gradient (směr největšího růstu) funkce f platí

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^k) = \mathsf{A}\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{b} = -(\boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^k) = -\boldsymbol{r}^k.$$

Metoda největšího spádu

- Metoda největšího spádu je iterační metoda s předpisem

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{v}^k.$$

- Směr $\boldsymbol{v}^k$ volíme jako směr největšího poklesu funkce f.
- Pro gradient (směr největšího růstu) funkce f platí

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^k) = \mathsf{A}\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{b} = -(\boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^k) = -\boldsymbol{r}^k.$$

- Směr $\boldsymbol{v}^k$ zvolíme opačný ke gradientu, tzn. směr největšího poklesu:

$$\boldsymbol{v}^k = -\nabla f(\boldsymbol{x}^k) = \boldsymbol{r}^k.$$

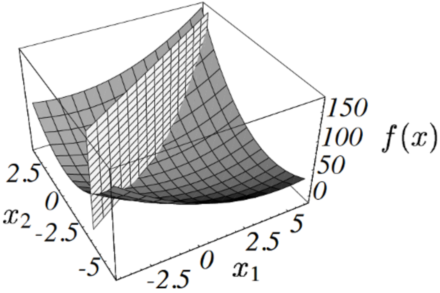
- Délku kroku α_k zvolíme tak, abychom dosáhli minima f ve směru rezidua $\boldsymbol{r}^k$.

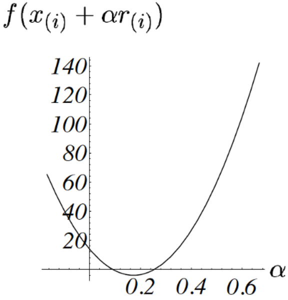
- Délku kroku α_k zvolíme tak, abychom dosáhli minima f ve směru rezidua $\boldsymbol{r}^k$.
- Definujme pomocnou funkci $F\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$F(\alpha) = f(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{r}^k) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{r}^k) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{r}^k) =$$
$$= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{x}^k + \alpha(\boldsymbol{x}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k + \frac{1}{2}\alpha^2(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}^k - \alpha \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{r}^k$$

- Délku kroku α_k zvolíme tak, abychom dosáhli minima f ve směru rezidua $\boldsymbol{r}^k$.
- Definujme pomocnou funkci $F\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$
\begin{aligned}
F(\alpha) = f(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{r}^k) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{r}^k) - \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{r}^k) = \\
&= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{x}^k + \alpha(\boldsymbol{x}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k + \frac{1}{2}\alpha^2(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}^k - \alpha\boldsymbol{b}^T\boldsymbol{r}^k
\end{aligned}
$$





- Hledáme α, ve kterém funkce F dosahuje minima $\Rightarrow$ její derivace tedy musí být nulová.

- Hledáme α, ve kterém funkce F dosahuje minima $\Rightarrow$ její derivace tedy musí být nulová.

$$F'(\alpha) = \alpha(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k + (\boldsymbol{r}^k)^T \underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}^k}_{=(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{r}^k)} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{r}^k = \alpha(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k - (\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r} = 0$$

- Hledáme α, ve kterém funkce F dosahuje minima $\Rightarrow$ její derivace tedy musí být nulová.

$$F'(\alpha) = \alpha(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k + (\boldsymbol{r}^k)^T \underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{x}^k}_{=(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{r}^k)} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{r}^k = \alpha(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k - (\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k}$$

- Stejný předpis získáme, pokud položíme derivaci funkce f ve směru $\boldsymbol{r}^k$ rovnu nule.

- Stejný předpis získáme, pokud položíme derivaci funkce f ve směru $\boldsymbol{r}^k$ rovnu nule.
- Nejdříve si uvědomme, že $\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k) = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k$.

- Stejný předpis získáme, pokud položíme derivaci funkce f ve směru $\boldsymbol{r}^k$ rovnu nule.
- Nejdříve si uvědomme, že $\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k) = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k$.

$$\frac{\mathrm{d}f(x^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{r}^k} = 0$$

- Stejný předpis získáme, pokud položíme derivaci funkce f ve směru $\boldsymbol{r}^k$ rovnu nule.
- Nejdříve si uvědomme, že $\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k) = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k$.

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}f(x^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{r}^k} &= 0 \\ (\nabla f(\boldsymbol{x}^{k+1}))^T \boldsymbol{r}^k &= 0 \end{aligned}$$

- Stejný předpis získáme, pokud položíme derivaci funkce f ve směru $\boldsymbol{r}^k$ rovnu nule.
- Nejdříve si uvědomme, že $\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k) = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k$.

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}f(x^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{r}^k} &= 0 \\
(\nabla f(\boldsymbol{x}^{k+1}))^T \boldsymbol{r}^k &= 0 \\
(-\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^k &= 0
\end{aligned}$$

- Stejný předpis získáme, pokud položíme derivaci funkce f ve směru $\boldsymbol{r}^k$ rovnu nule.
- Nejdříve si uvědomme, že $\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k) = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k$.

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}f(x^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{r}^k} &= 0 \\
(\nabla f(\boldsymbol{x}^{k+1}))^T \boldsymbol{r}^k &= 0 \\
(-\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^k &= 0 \\
(-\boldsymbol{r}^k + \alpha_k \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k &= 0
\end{aligned}
$$

- Stejný předpis získáme, pokud položíme derivaci funkce f ve směru $\boldsymbol{r}^k$ rovnu nule.
- Nejdříve si uvědomme, že $\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k) = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k$.

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}f(x^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{r}^k} &= 0 \\
(\nabla f(\boldsymbol{x}^{k+1}))^T \boldsymbol{r}^k &= 0 \\
(-\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^k &= 0 \\
(-\boldsymbol{r}^k + \alpha_k \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k &= 0 \\
\alpha_k &= \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k}
\end{aligned}
$$

- Algoritmus tedy počítá jednotlivé aproximace pomocí následujících předpisů:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}^k &= \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^{k-1} + \alpha^{k-1}\boldsymbol{r}^{k-1}) = \underbrace{\boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{k-1}}_{\boldsymbol{r}^{k-1}} - \alpha^{k-1}\mathsf{A}\boldsymbol{r}^{k-1} = \\
&= \boldsymbol{r}^{k-1} - \alpha^{k-1}\mathsf{A}\boldsymbol{r}^{k-1} \\
\alpha^k &= \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k} \\
\boldsymbol{x}^{k+1} &= \boldsymbol{x}^k + \alpha^k\boldsymbol{r}^k
\end{aligned}
$$

function steepestd_descent(A, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x}^0$)

$\boldsymbol{r}^0 = b - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^0$

$k = 0$

while $\|\boldsymbol{r}^k\|/\|\boldsymbol{r}^0\| > \varepsilon$ **do**

$\alpha_k = ((\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k)/((\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k)$

$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k$

$\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k$

$k = k + 1$

end while

end function

- Konvergenci budeme dokazovat v tzv. energetické normě $\|\cdot\|_A$, tedy normě indukované skalárním součinem $(\mathsf{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}$: $\|\boldsymbol{x}\|_A = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}}$.

- Konvergenci budeme dokazovat v tzv. energetické normě $\|\cdot\|_A$, tedy normě indukované skalárním součinem $(\mathsf{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}$: $\|\boldsymbol{x}\|_A = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}}$.
- Platí $\boldsymbol{e}^{k+1} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k$

- Konvergenci budeme dokazovat v tzv. energetické normě $\|\cdot\|_A$, tedy normě indukované skalárním součinem $(\mathsf{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x}$: $\|\boldsymbol{x}\|_A = \sqrt{\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x}}$.
- Platí $\boldsymbol{e}^{k+1} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k$
- Pro normu chyby $\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A$ platí

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A^2 = (\boldsymbol{e}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1}$$

- Konvergenci budeme dokazovat v tzv. energetické normě $\|\cdot\|_A$, tedy normě indukované skalárním součinem $(\mathsf{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}$: $\|\boldsymbol{x}\|_A = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}}$.
- Platí $\boldsymbol{e}^{k+1} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k$
- Pro normu chyby $\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A$ platí

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A^2 \quad = \quad (\boldsymbol{e}^{k+1})^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1} = (\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}(\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k) =$$

- Konvergenci budeme dokazovat v tzv. energetické normě $\|\cdot\|_A$, tedy normě indukované skalárním součinem $(\mathsf{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}$: $\|\boldsymbol{x}\|_A = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}}$.
- Platí $\boldsymbol{e}^{k+1} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k$
- Pro normu chyby $\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A$ platí

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A^2 &= (\boldsymbol{e}^{k+1})^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1} = (\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}(\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k) = \\
&= (\boldsymbol{e}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k + 2\alpha_k(\boldsymbol{r}^k)^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k}_{=-\boldsymbol{r}^k} + (\alpha_k)^2(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k =
\end{aligned}$$

- Konvergenci budeme dokazovat v tzv. energetické normě $\|\cdot\|_A$, tedy normě indukované skalárním součinem $(\mathsf{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}$: $\|\boldsymbol{x}\|_A = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}}$.
- Platí $\boldsymbol{e}^{k+1} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k$
- Pro normu chyby $\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A$ platí

$$
\begin{aligned}
\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A^2 &= (\boldsymbol{e}^{k+1})^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1} = (\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}(\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k) = \\
&= (\boldsymbol{e}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k + 2\alpha_k(\boldsymbol{r}^k)^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k}_{=-\boldsymbol{r}^k} + (\alpha_k)^2(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k = \\
&= \|\boldsymbol{e}^k\|_A^2 - 2\underbrace{\frac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k}}_{=\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k + \left(\tfrac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k}\right)^2(\boldsymbol{r}^k)\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k =
\end{aligned}
$$

- Konvergenci budeme dokazovat v tzv. energetické normě $\|\cdot\|_A$, tedy normě indukované skalárním součinem $(\mathsf{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}$: $\|\boldsymbol{x}\|_A = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}}$.
- Platí $\boldsymbol{e}^{k+1} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{r}^k$
- Pro normu chyby $\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A$ platí

$$
\begin{aligned}
\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A^2 &= (\boldsymbol{e}^{k+1})^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1} = (\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}(\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k) = \\
&= (\boldsymbol{e}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k + 2\alpha_k(\boldsymbol{r}^k)^T \underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k}_{=-\boldsymbol{r}^k} + (\alpha_k)^2(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k = \\
&= \|\boldsymbol{e}^k\|_A^2 - 2\underbrace{\frac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k}}_{=\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k + \left(\tfrac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k}\right)^2(\boldsymbol{r}^k)\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k = \\
&= \|\boldsymbol{e}^k\|_A^2 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k)^2}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k} =
\end{aligned}
$$

- Konvergenci budeme dokazovat v tzv. energetické normě $\|\cdot\|_A$, tedy normě indukované skalárním součinem $(\mathsf{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x} : \|\boldsymbol{x}\|_A = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}}$.
- Platí $\boldsymbol{e}^{k+1} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k$
- Pro normu chyby $\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A$ platí

$$
\begin{aligned}
\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A^2 &= (\boldsymbol{e}^{k+1})^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1} = (\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}(\boldsymbol{e}^k + \alpha_k\boldsymbol{r}^k) = \\
&= (\boldsymbol{e}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k + 2\alpha_k(\boldsymbol{r}^k)^T\underbrace{\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k}_{=-\boldsymbol{r}^k} + (\alpha_k)^2(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k = \\
&= \|\boldsymbol{e}^k\|_A^2 - 2\underbrace{\frac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k}}_{=\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k + \left(\tfrac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k}\right)^2(\boldsymbol{r}^k)\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k = \\
&= \|\boldsymbol{e}^k\|_A^2 - \tfrac{((\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k)^2}{(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k} = \\
&= \|\boldsymbol{e}^k\|_A^2\left(1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k)^2}{((\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k)\underbrace{((\boldsymbol{e}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k)}_{=(\mathsf{A}^{-1}\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}(\mathsf{A}^{-1}\boldsymbol{r}^k)=(\boldsymbol{r}^k)^T\mathsf{A}^{-1}\boldsymbol{r}^k}}\right).
\end{aligned}
$$

- Chyba v kroku $k+1$ je tedy nějakým násobkem chyby v kroku k.

- Chyba v kroku $k+1$ je tedy nějakým násobkem chyby v kroku k.
- Dle Cauchyho-Schwarzovy nerovnosti a definice maticové normy indukované vektorovou normou platí

$$|(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^k| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k\| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\| \cdot \|\boldsymbol{r}^k\| = \|\boldsymbol{r}^k\|^2 \|\mathsf{A}\|$$

- Chyba v kroku $k+1$ je tedy nějakým násobkem chyby v kroku k.
- Dle Cauchyho-Schwarzovy nerovnosti a definice maticové normy indukované vektorovou normou platí

$$|(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^k| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k\| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\| \cdot \|\boldsymbol{r}^k\| = \|\boldsymbol{r}^k\|^2 \|\mathsf{A}\|$$

- Podívejme se na koeficient z předchozího odhadu podrobněji

$$1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^k)((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}^{-1} \boldsymbol{r}^k)}$$

- Chyba v kroku $k+1$ je tedy nějakým násobkem chyby v kroku k.
- Dle Cauchyho-Schwarzovy nerovnosti a definice maticové normy indukované vektorovou normou platí

$$|(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k\| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\| \cdot \|\boldsymbol{r}^k\| = \|\boldsymbol{r}^k\|^2 \|\mathsf{A}\|$$

- Podívejme se na koeficient z předchozího odhadu podrobněji

$$1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k)((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}^{-1}\boldsymbol{r}^k)} \quad \leq \quad 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{\|\mathsf{A}\| \cdot \|r^k\|^2 \cdot \|\mathsf{A}^{-1}\| \cdot \|r^k\|^2}$$

- Chyba v kroku $k+1$ je tedy nějakým násobkem chyby v kroku k.
- Dle Cauchyho-Schwarzovy nerovnosti a definice maticové normy indukované vektorovou normou platí

$$|(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k\| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\| \cdot \|\boldsymbol{r}^k\| = \|\boldsymbol{r}^k\|^2 \|\mathsf{A}\|$$

- Podívejme se na koeficient z předchozího odhadu podrobněji

$$\begin{aligned} 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k)((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}^{-1}\boldsymbol{r}^k)} \quad &\leq \quad 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{\|\mathsf{A}\| \cdot \|r^k\|^2 \cdot \|\mathsf{A}^{-1}\| \cdot \|r^k\|^2} = \\ &= \quad 1 - \frac{1}{\|\mathsf{A}\| \|\mathsf{A}^{-1}\|} \end{aligned}$$

- Chyba v kroku $k+1$ je tedy nějakým násobkem chyby v kroku k.
- Dle Cauchyho-Schwarzovy nerovnosti a definice maticové normy indukované vektorovou normou platí

$$|(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^k| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k\| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\| \cdot \|\boldsymbol{r}^k\| = \|\boldsymbol{r}^k\|^2 \|\mathsf{A}\|$$

- Podívejme se na koeficient z předchozího odhadu podrobněji

$$\begin{aligned} 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^k)((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}^{-1} \boldsymbol{r}^k)} \quad &\leq \quad 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{\|\mathsf{A}\| \cdot \|r^k\|^2 \cdot \|\mathsf{A}^{-1}\| \cdot \|r^k\|^2} = \\ &= \quad 1 - \frac{1}{\|\mathsf{A}\| \|\mathsf{A}^{-1}\|} = q. \end{aligned}$$

- Chyba v kroku $k+1$ je tedy nějakým násobkem chyby v kroku k.
- Dle Cauchyho-Schwarzovy nerovnosti a definice maticové normy indukované vektorovou normou platí

$$|(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k\| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\| \cdot \|\boldsymbol{r}^k\| = \|\boldsymbol{r}^k\|^2 \|\mathsf{A}\|$$

- Podívejme se na koeficient z předchozího odhadu podrobněji

$$\begin{aligned} 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k)((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}^{-1}\boldsymbol{r}^k)} \quad &\leq \quad 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{\|\mathsf{A}\| \cdot \|r^k\|^2 \cdot \|\mathsf{A}^{-1}\| \cdot \|r^k\|^2} = \\ &= \quad 1 - \frac{1}{\|\mathsf{A}\| \|\mathsf{A}^{-1}\|} = q. \end{aligned}$$

- Výraz $\|\mathsf{A}\|\|\mathsf{A}^{-1}\|$ nazývýme číslem podmíněnosti a v případě symetrické pozitivně definitní matice jej vypočítáme jako podíl největšího a nejmenšího vlastního čísla $\kappa(\mathsf{A}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$.

- Chyba v kroku $k+1$ je tedy nějakým násobkem chyby v kroku k.
- Dle Cauchyho-Schwarzovy nerovnosti a definice maticové normy indukované vektorovou normou platí

$$|(\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\boldsymbol{r}^k\| \leq \|\boldsymbol{r}^k\| \cdot \|\mathsf{A}\| \cdot \|\boldsymbol{r}^k\| = \|\boldsymbol{r}^k\|^2 \|\mathsf{A}\|$$

- Podívejme se na koeficient z předchozího odhadu podrobněji

$$\begin{aligned} 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{r}^k)((\boldsymbol{r}^k)^T \mathsf{A}^{-1}\boldsymbol{r}^k)} \quad &\leq \quad 1 - \frac{((\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k)^2}{\|\mathsf{A}\| \cdot \|r^k\|^2 \cdot \|\mathsf{A}^{-1}\| \cdot \|r^k\|^2} = \\ &= \quad 1 - \frac{1}{\|\mathsf{A}\| \|\mathsf{A}^{-1}\|} = q. \end{aligned}$$

- Výraz $\|\mathsf{A}\| \|\mathsf{A}^{-1}\|$ nazývýme číslem podmíněnosti a v případě symetrické pozitivně definitní matice jej vypočítáme jako podíl největšího a nejmenšího vlastního čísla $\kappa(\mathsf{A}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$.
- Protože $\kappa(\mathsf{A}) = \lambda_{\max}/\lambda_{\min} \geq 1$, platí $q = 1 - 1/\kappa(\mathsf{A}) < 1$. Chyba se tedy v každém kroku zmenšuje a metoda konverguje k řešení.

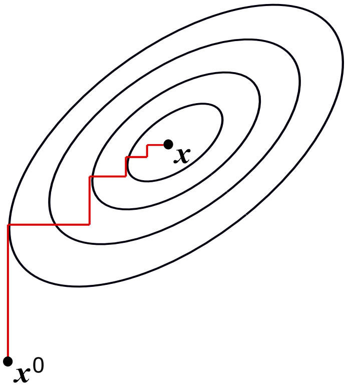
- O chybě metody největšího spádu tedy platí

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A^2 \leq \left(1 - \frac{1}{\kappa(\mathsf{A})}\right) \|\boldsymbol{e}^k\|_A^2.$$

- Dále lze ukázat

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A \leq \left(\frac{\kappa(\mathsf{A}) - 1}{\kappa(\mathsf{A}) + 1}\right)^k \|\boldsymbol{e}^0\|_A.$$

- Ze vztahu $(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^{k+1} = 0$ vyplývá, že směr, ve kterém se vydáme, je kolmý k předchozímu směru.
- Při nevhodně zvoleném počátečním vektoru se může stát, že se několikrát vydáme ve stejném směru a postupně zkracujeme délku kroku.
- Procházíme tedy "cik-cak" údolí tvořené grafem minimalizované kvadratické formy.
- Toto může vést k velkému počtu iterací potřebných k řešení soustavy.

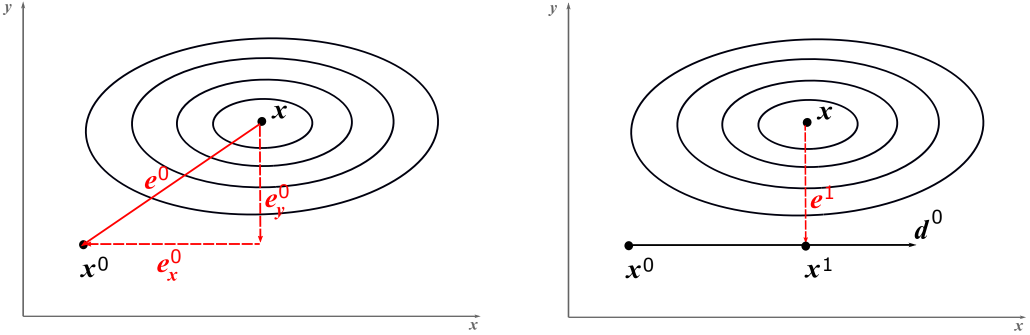


- Ideální by bylo najít metodu, která by minimalizovala celkovou chybu v daném směru vždy pouze jednou (v každé iteraci vynulovala chybu v daném směru).

- Ideální by bylo najít metodu, která by minimalizovala celkovou chybu v daném směru vždy pouze jednou (v každé iteraci vynulovala chybu v daném směru).
- Taková metoda by byla schopná vyřešit soustavu o n neznámých během n iterací.

- Ideální by bylo najít metodu, která by minimalizovala celkovou chybu v daném směru vždy pouze jednou (v každé iteraci vynulovala chybu v daném směru).
- Taková metoda by byla schopná vyřešit soustavu o n neznámých během n iterací.
- Zkusme si tedy pro $\mathsf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zvolit n navzájem ortogonálních směrů $\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}$ (např. rovnoběžných s osami souřadnic) a použít předpis: $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Je třeba vhodně zvolit α_k.

- Ideální by bylo najít metodu, která by minimalizovala celkovou chybu v daném směru vždy pouze jednou (v každé iteraci vynulovala chybu v daném směru).
- Taková metoda by byla schopná vyřešit soustavu o n neznámých během n iterací.
- Zkusme si tedy pro $\mathsf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ zvolit n navzájem ortogonálních směrů $\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}$ (např. rovnoběžných s osami souřadnic) a použít předpis: $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Je třeba vhodně zvolit α_k.



- Z obrázku je patrné, že abychom vynulovali chybu ve směru osy x, musíme bod $\boldsymbol{x}^1$ zvolit tak, aby vektor nové chyby $\boldsymbol{e}^1$ byl kolmý k $\boldsymbol{d}^0$.

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^{k+1} = 0.$$

- Z definice chyby dostaneme

$$0 = (\boldsymbol{d}^k)^T (\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x})$$

- Z obrázku je patrné, že abychom vynulovali chybu ve směru osy x, musíme bod $\boldsymbol{x}^1$ zvolit tak, aby vektor nové chyby $\boldsymbol{e}^1$ byl kolmý k $\boldsymbol{d}^0$.

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^{k+1} = 0.$$

- Z definice chyby dostaneme

$$0 = (\boldsymbol{d}^k)^T (\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T (\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k - \boldsymbol{x})$$

- Z obrázku je patrné, že abychom vynulovali chybu ve směru osy x, musíme bod $\boldsymbol{x}^1$ zvolit tak, aby vektor nové chyby $\boldsymbol{e}^1$ byl kolmý k $\boldsymbol{d}^0$.

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^{k+1} = 0.$$

- Z definice chyby dostaneme

$$0 = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k)$$

- Z obrázku je patrné, že abychom vynulovali chybu ve směru osy x, musíme bod $\boldsymbol{x}^1$ zvolit tak, aby vektor nové chyby $\boldsymbol{e}^1$ byl kolmý k $\boldsymbol{d}^0$.

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^{k+1} = 0.$$

- Z definice chyby dostaneme

$$0 = (\boldsymbol{d}^k)^T (\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T (\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T (\boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k)$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha_k = -\frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{d}^k}.$$

- Z obrázku je patrné, že abychom vynulovali chybu ve směru osy x, musíme bod $\boldsymbol{x}^1$ zvolit tak, aby vektor nové chyby $\boldsymbol{e}^1$ byl kolmý k $\boldsymbol{d}^0$.

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^{k+1} = 0.$$

- Z definice chyby dostaneme

$$0 = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k)$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha_k = -\frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{d}^k}.$$

- Pro výpočet α_k bychom potřebovali znát chybu $\boldsymbol{e}^k$ – takto tedy postupovat nemůžeme.

- Z obrázku je patrné, že abychom vynulovali chybu ve směru osy x, musíme bod $\boldsymbol{x}^1$ zvolit tak, aby vektor nové chyby $\boldsymbol{e}^1$ byl kolmý k $\boldsymbol{d}^0$.

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^{k+1} = 0.$$

- Z definice chyby dostaneme

$$0 = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k - \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{d}^k)^T(\boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k)$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha_k = -\frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{e}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{d}^k}.$$

- Pro výpočet α_k bychom potřebovali znát chybu $\boldsymbol{e}^k$ – takto tedy postupovat nemůžeme.
- Ukážeme si ale, že pokud požadavek na ortogonalitu nahradíme za požadavek na tzv. A-ortogonalitu, budeme schopní příslušné koeficienty α_k najít.

Metoda sdružených gradientů

Definice

Buď A symetrická pozitivně definitní matice. Nenulové vektory $\{\boldsymbol{p}_i\}_{i=0}^{n-1}$ nazveme sdružené (A-ortogonální), platí-li

$$\forall i, j \in \{0, 1, \dots, n-1\} : i \neq j \Rightarrow \boldsymbol{p}_i^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_j = 0.$$

Dva navzájem A-ortogonální vektory někdy označujeme $\boldsymbol{a} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{b}$.

Lemma

Prvky množiny sdružených vektorů jsou lineárně nezávislé.

Lemma

Prvky množiny sdružených vektorů jsou lineárně nezávislé.

Dk.

- Chceme ukázat

$$\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_1 + \ldots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1} = 0 \Rightarrow \forall i : \alpha_i = 0$$

Lemma

Prvky množiny sdružených vektorů jsou lineárně nezávislé.

Dk.

- Chceme ukázat

$$\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_1 + \ldots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1} = 0 \Rightarrow \forall i : \alpha_i = 0$$

- Přenásobme rovnici výrazem $(\mathsf{A}\boldsymbol{p}_k)^T, k \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ zleva:

$$\alpha_0 \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_1 + \ldots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_{n-1} = 0$$

Lemma

Prvky množiny sdružených vektorů jsou lineárně nezávislé.

Dk.

- Chceme ukázat

$$\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_1 + \ldots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1} = 0 \Rightarrow \forall i : \alpha_i = 0$$

- Přenásobme rovnici výrazem $(\mathsf{A}\boldsymbol{p}_k)^T, k \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ zleva:

$$\alpha_0 \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_1 + \ldots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_{n-1} = 0$$

- vektory sdružené $\Rightarrow$ všechny členy v této sumě až na jeden jsou nulové:

$$\alpha_k \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_k = 0.$$

Lemma

Prvky množiny sdružených vektorů jsou lineárně nezávislé.

Dk.

- Chceme ukázat

$$\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_1 + \ldots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1} = 0 \Rightarrow \forall i : \alpha_i = 0$$

- Přenásobme rovnici výrazem $(\mathsf{A}\boldsymbol{p}_k)^T, k \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ zleva:

$$\alpha_0 \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_1 + \ldots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_{n-1} = 0$$

- vektory sdružené $\Rightarrow$ všechny členy v této sumě až na jeden jsou nulové:

$$\alpha_k \boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_k = 0.$$

- A je symetrická pozitivně definitní, takže $\boldsymbol{p}_k^T \mathsf{A} \boldsymbol{p}_k > 0$. Tedy $\alpha_k = 0$. $\square$

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Požadavek na ortogonalitu chyby a směru nahraďme za jejich A-ortogonalitu, tzn. $\boldsymbol{e}^{k+1} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{d}^k$.

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Požadavek na ortogonalitu chyby a směru nahraďme za jejich A-ortogonalitu, tzn. $\boldsymbol{e}^{k+1} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{d}^k$. Toto nastane v minimu $f(\boldsymbol{x}) = 1/2\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$ ve směru $\boldsymbol{d}^k$:

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Požadavek na ortogonalitu chyby a směru nahraďme za jejich A-ortogonalitu, tzn. $\boldsymbol{e}^{k+1} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{d}^k$. Toto nastane v minimu $f(\boldsymbol{x}) = 1/2\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$ ve směru $\boldsymbol{d}^k$:

$$0 = \frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{d}^k}$$

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Požadavek na ortogonalitu chyby a směru nahraďme za jejich A-ortogonalitu, tzn. $\boldsymbol{e}^{k+1} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{d}^k$. Toto nastane v minimu $f(\boldsymbol{x}) = 1/2\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$ ve směru $\boldsymbol{d}^k$:

$$0 = \frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{d}^k} = \operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}^{k+1})^T \boldsymbol{d}^k$$

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Požadavek na ortogonalitu chyby a směru nahraďme za jejich A-ortogonalitu, tzn. $\boldsymbol{e}^{k+1} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{d}^k$. Toto nastane v minimu $f(\boldsymbol{x}) = 1/2\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$ ve směru $\boldsymbol{d}^k$:

$$0 = \frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{d}^k} = \operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}^{k+1})^T \boldsymbol{d}^k = -(\underbrace{\boldsymbol{r}^{k+1}}_{=-\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1}})^T \boldsymbol{d}^k$$

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \dots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Požadavek na ortogonalitu chyby a směru nahraďme za jejich A-ortogonalitu, tzn. $\boldsymbol{e}^{k+1} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{d}^k$. Toto nastane v minimu $f(\boldsymbol{x}) = 1/2\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$ ve směru $\boldsymbol{d}^k$:

$$0 = \frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{d}^k} = \mathrm{grad} f(\boldsymbol{x}^{k+1})^T \boldsymbol{d}^k = -(\underbrace{\boldsymbol{r}^{k+1}}_{=-\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1}})^T \boldsymbol{d}^k = (\boldsymbol{e}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k.$$

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \ldots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Požadavek na ortogonalitu chyby a směru nahraďme za jejich A-ortogonalitu, tzn. $\boldsymbol{e}^{k+1} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{d}^k$. Toto nastane v minimu $f(\boldsymbol{x}) = 1/2\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$ ve směru $\boldsymbol{d}^k$:

$$0 = \frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{d}^k} = \operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}^{k+1})^T \boldsymbol{d}^k = -(\underbrace{\boldsymbol{r}^{k+1}}_{=-\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1}})^T \boldsymbol{d}^k = (\boldsymbol{e}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k.$$

- Nyní snadno nalezneme koeficient α_k

$$(\boldsymbol{e}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = (\boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = 0$$

- Místo n ortogonálních směrů volme n A-ortogonálních směrů $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \dots, \boldsymbol{d}^{n-1}\}$ a pokusme se odvodit iterační metodu ve tvaru $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$.
- Požadavek na ortogonalitu chyby a směru nahraďme za jejich A-ortogonalitu, tzn. $\boldsymbol{e}^{k+1} \perp_{\mathsf{A}} \boldsymbol{d}^k$. Toto nastane v minimu $f(\boldsymbol{x}) = 1/2\boldsymbol{x}^T \mathsf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$ ve směru $\boldsymbol{d}^k$:

$$0 = \frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}^{k+1})}{\mathrm{d}\boldsymbol{d}^k} = \operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}^{k+1})^T \boldsymbol{d}^k = -(\underbrace{\boldsymbol{r}^{k+1}}_{=-\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1}})^T \boldsymbol{d}^k = (\boldsymbol{e}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k.$$

- Nyní snadno nalezneme koeficient α_k

$$(\boldsymbol{e}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = (\boldsymbol{e}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = 0 \Rightarrow \alpha_k = -\frac{(\boldsymbol{e}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k} = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k}$$

Věta

Algoritmus nalezne přesné řešení x v nejvýše n krocích.

Věta

Algoritmus nalezne přesné řešení $\boldsymbol{x}$ v nejvýše n krocích.

Dk.

- Vyjádříme $\boldsymbol{e}^0$ v bázi tvořené A-ortogonálními (tedy nezávislými) vektory $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$:

$$\boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j.$$

Věta

Algoritmus nalezne přesné řešení $\boldsymbol{x}$ v nejvýše n krocích.

Dk.

- Vyjádříme $\boldsymbol{e}^0$ v bázi tvořené A-ortogonálními (tedy nezávislými) vektory $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$:

$$\boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j.$$

- Přenásobme $(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A}, k \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ zleva

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j (\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j = \delta_k (\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k.$$

Věta

Algoritmus nalezne přesné řešení $\boldsymbol{x}$ v nejvýše n krocích.

Dk.

- Vyjádříme $\boldsymbol{e}^0$ v bázi tvořené A-ortogonálními (tedy nezávislými) vektory $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$:

$$\boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j.$$

- Přenásobme $(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A}, k \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ zleva

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j (\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j = \delta_k (\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k.$$

- Odtud

$$\delta_k = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{e}^0}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}$$

Věta

Algoritmus nalezne přesné řešení $\boldsymbol{x}$ v nejvýše n krocích.

Dk.

- Vyjádříme $\boldsymbol{e}^0$ v bázi tvořené A-ortogonálními (tedy nezávislými) vektory $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$:

$$\boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j.$$

- Přenásobme $(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}, k \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ zleva

$$(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j (\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = \delta_k (\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k.$$

- Odtud

$$\delta_k = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^0}{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k} = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}(\boldsymbol{e}^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i \boldsymbol{d}^i)}{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k}$$

Věta

Algoritmus nalezne přesné řešení $\boldsymbol{x}$ v nejvýše n krocích.

Dk.

- Vyjádříme $\boldsymbol{e}^0$ v bázi tvořené A-ortogonálními (tedy nezávislými) vektory $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$:

$$\boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j.$$

- Přenásobme $(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}, k \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ zleva

$$(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j (\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = \delta_k (\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k.$$

- Odtud

$$\delta_k = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^0}{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k} = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}(\boldsymbol{e}^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i \boldsymbol{d}^i)}{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k} = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{e}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k}$$

Věta

Algoritmus nalezne přesné řešení $\boldsymbol{x}$ v nejvýše n krocích.

Dk.

- Vyjádříme $\boldsymbol{e}^0$ v bázi tvořené A-ortogonálními (tedy nezávislými) vektory $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$:

$$\boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j.$$

- Přenásobme $(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A}, k \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$ zleva

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{e}^0 = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j (\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j = \delta_k (\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k.$$

- Odtud

$$\delta_k = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{e}^0}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k} = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} (\boldsymbol{e}^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i \boldsymbol{d}^i)}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k} = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{e}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k} = -\frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}.$$

- Porovnejme

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}} \qquad \text{vs.} \qquad \delta_k = -\frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}$$

- Porovnejme

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}} \qquad \text{vs.} \qquad \delta_k = -\frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}$$

- Vyjádřeme si tedy chybu v i-té iteraci jako

$$\boldsymbol{e}^i = \boldsymbol{e}^0 + \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_j \boldsymbol{d}^j$$

- Porovnejme

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}} \qquad \text{vs.} \qquad \delta_k = -\frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}$$

- Vyjádřeme si tedy chybu v i-té iteraci jako

$$\boldsymbol{e}^i = \boldsymbol{e}^0 + \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_j \boldsymbol{d}^j = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j + \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_j \boldsymbol{d}^j$$

- Porovnejme

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}} \qquad \text{vs.} \qquad \delta_k = -\frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}$$

- Vyjádřeme si tedy chybu v i-té iteraci jako

$$\boldsymbol{e}^i = \boldsymbol{e}^0 + \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_j \boldsymbol{d}^j = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j + \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_j \boldsymbol{d}^j = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j - \sum_{j=0}^{i-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j$$

- Porovnejme

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}} \qquad \text{vs.} \qquad \delta_k = -\frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{d}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}$$

- Vyjádřeme si tedy chybu v i-té iteraci jako

$$\boldsymbol{e}^i = \boldsymbol{e}^0 + \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_j \boldsymbol{d}^j = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j + \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_j \boldsymbol{d}^j = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j - \sum_{j=0}^{i-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j = \sum_{j=i}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j.$$

- V každé iteraci se odstraní jedna složka počáteční chyby $\boldsymbol{e}^0$. Po n iteracích je každá složka chyby v bázi $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$ vynulovaná $\Rightarrow \boldsymbol{e}^n = \boldsymbol{o}$.

$\square$

- Zbývá nalézt jednotlivé A-ortogonální směry.

- Zbývá nalézt jednotlivé A-ortogonální směry.
- Předpokládejme, že známe $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$ a hledejme $\boldsymbol{d}^{k+1}$.

- Zbývá nalézt jednotlivé A-ortogonální směry.
- Předpokládejme, že známe $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$ a hledejme $\boldsymbol{d}^{k+1}$.
- Vyjdeme z vektoru $\boldsymbol{r}^{k+1}$ a pomocí Gramova-Schmidtova procesu jej A-ortogonalizujeme vůči všem předchozím vektorům $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$

$$\boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} \boldsymbol{d}^j$$

- Zbývá nalézt jednotlivé A-ortogonální směry.
- Předpokládejme, že známe $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$ a hledejme $\boldsymbol{d}^{k+1}$.
- Vyjdeme z vektoru $\boldsymbol{r}^{k+1}$ a pomocí Gramova-Schmidtova procesu jej A-ortogonalizujeme vůči všem předchozím vektorům $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$

$$\boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} \boldsymbol{d}^j$$

$$(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^{k+1} = (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j, \quad i \in \{0, 1, \ldots, k\}$$

- Zbývá nalézt jednotlivé A-ortogonální směry.
- Předpokládejme, že známe $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$ a hledejme $\boldsymbol{d}^{k+1}$.
- Vyjdeme z vektoru $\boldsymbol{r}^{k+1}$ a pomocí Gramova-Schmidtova procesu jej A-ortogonalizujeme vůči všem předchozím vektorům $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$

$$\boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} \boldsymbol{d}^j$$

$$(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^{k+1} = (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j, \quad i \in \{0, 1, \ldots, k\}$$

$$0 = (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1} - \beta_{k,i} (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^i$$

- Zbývá nalézt jednotlivé A-ortogonální směry.
- Předpokládejme, že známe $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$ a hledejme $\boldsymbol{d}^{k+1}$.
- Vyjdeme z vektoru $\boldsymbol{r}^{k+1}$ a pomocí Gramova-Schmidtova procesu jej A-ortogonalizujeme vůči všem předchozím vektorům $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \ldots, \boldsymbol{d}^k\}$

$$\boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} \boldsymbol{d}^j$$

$$(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^{k+1} = (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j, \quad i \in \{0, 1, \ldots, k\}$$

$$0 = (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1} - \beta_{k,i} (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^i \Rightarrow \beta_{k,i} = \frac{(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1}}{(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^i}$$

- Zbývá nalézt jednotlivé A-ortogonální směry.
- Předpokládejme, že známe $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \dots, \boldsymbol{d}^k\}$ a hledejme $\boldsymbol{d}^{k+1}$.
- Vyjdeme z vektoru $\boldsymbol{r}^{k+1}$ a pomocí Gramova-Schmidtova procesu jej A-ortogonalizujeme vůči všem předchozím vektorům $\{\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1, \dots, \boldsymbol{d}^k\}$

$$\boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} \boldsymbol{d}^j$$

$$(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^{k+1} = (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_{k,j} (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j, \quad i \in \{0, 1, \dots, k\}$$

$$0 = (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1} - \beta_{k,i} (\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^i \Rightarrow \beta_{k,i} = \frac{(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1}}{(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^i}$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \frac{(\boldsymbol{d}^j)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1}}{(\boldsymbol{d}^j)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j} \boldsymbol{d}^j.$$

- Abychom pomocí tohoto vzorce vypočítali nový směr, museli bychom si pamatovat všechny předchozí směry. Ukážeme si nyní, že všechny koeficienty $\beta_{k,j}$ kromě $\beta_{k,k}$ jsou nulové.

Lemma

Reziduum $\boldsymbol{r}^{k+1}$ je ortogonální k $\boldsymbol{d}^0, \boldsymbol{d}^1 \ldots, \boldsymbol{d}^k$.

Dk.

- Přenásobme $\boldsymbol{r}^{k+1}$ vektory $\boldsymbol{d}^i, i \in \{0, 1, \ldots, k\}$.

$$(\boldsymbol{d}^i)^T \underbrace{\boldsymbol{r}^{k+1}}_{=-\mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1}} = -(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A}\boldsymbol{e}^{k+1} = -(\boldsymbol{d}^i)^T \mathsf{A} \sum_{j=k+1}^{n-1} \delta_j \boldsymbol{d}^j = 0,$$

$\square$

Lemma

Reziduum $\boldsymbol{r}^{k+1}$ je ortogonální k $\boldsymbol{r}^0, \boldsymbol{r}^1, \ldots, \boldsymbol{r}^k$.

Dk.

- Vyjádřeme $\boldsymbol{r}^i$ jako

$$\boldsymbol{r}^i = \boldsymbol{d}^i + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{i,j} \boldsymbol{d}^j.$$

- Pak pro všechna $i \leq k$ platí:

$$(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^i = (\boldsymbol{r}^{k+1})^T (\boldsymbol{d}^i + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{i,j} \boldsymbol{d}^j) = (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{d}^i + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{i,j} (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{d}^j = 0.$$

$\square$

Lemma

Nechť je dána množina reziduí $\{\boldsymbol{r}^i\}_{i=0}^{n-1}$ a sdružených směrů $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$. Potom platí:

$$j < k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = 0$$

$$j = k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j \neq 0$$

Lemma

Nechť je dána množina reziduí $\{\boldsymbol{r}^i\}_{i=0}^{n-1}$ a sdružených směrů $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$. Potom platí:

$$j < k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = 0$$

$$j = k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j \neq 0$$

Důkaz

- Pro reziduum platí

$$\boldsymbol{r}^{j+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{j+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^j + \alpha_j \boldsymbol{d}^j) = \boldsymbol{r}^j - \alpha_j \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j$$

Lemma

Nechť je dána množina reziduí $\{\boldsymbol{r}^i\}_{i=0}^{n-1}$ a sdružených směrů $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$. Potom platí:

$$j < k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j = 0$$

$$j = k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j \neq 0$$

Důkaz

- Pro reziduum platí

$$\boldsymbol{r}^{j+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{j+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^j + \alpha_j \boldsymbol{d}^j) = \boldsymbol{r}^j - \alpha_j \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j$$

- Odtud

$$\mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = -\frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^{j+1} - \boldsymbol{r}^j)$$

Lemma

Nechť je dána množina reziduí $\{\boldsymbol{r}^i\}_{i=0}^{n-1}$ a sdružených směrů $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$. Potom platí:

$$j < k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = 0$$

$$j = k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j \neq 0$$

Důkaz

- Pro reziduum platí

$$\boldsymbol{r}^{j+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{j+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^j + \alpha_j \boldsymbol{d}^j) = \boldsymbol{r}^j - \alpha_j \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j$$

- Odtud

$$\mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = -\frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^{j+1} - \boldsymbol{r}^j)$$

a

$$(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = (\boldsymbol{r}^{k+1})^T (\frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^j - \boldsymbol{r}^{j+1})) = \frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^j - \frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^{j+1}$$

Lemma

Nechť je dána množina reziduí $\{\boldsymbol{r}^i\}_{i=0}^{n-1}$ a sdružených směrů $\{\boldsymbol{d}^i\}_{i=0}^{n-1}$. Potom platí:

$$j < k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = 0$$

$$j = k : (\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j \neq 0$$

Důkaz

- Pro reziduum platí

$$\boldsymbol{r}^{j+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{j+1} = \boldsymbol{b} - \mathsf{A}(\boldsymbol{x}^j + \alpha_j \boldsymbol{d}^j) = \boldsymbol{r}^j - \alpha_j \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j$$

- Odtud

$$\mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = -\frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^{j+1} - \boldsymbol{r}^j)$$

  a

$$(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^j = (\boldsymbol{r}^{k+1})^T (\frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^j - \boldsymbol{r}^{j+1})) = \frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^j - \frac{1}{\alpha_j}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^{j+1}$$

- Pro $j < k$ je tento výraz díky ortogonalitě reziduí nulový. Pro $j = k$ dostaneme

$$(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^k - \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^{k+1} = -\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^{k+1}.$$

- Zjistili jsme tedy, že pro $j = 0, \dots, k-1$ jsou čitatelé v sumě

$$\boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \frac{(\boldsymbol{d}^j)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1}}{(\boldsymbol{d}^j)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^j} \boldsymbol{d}^j.$$

  rovni nule.

- Předpis se tedy zjednoduší na

$$\boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} - \underbrace{\frac{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{r}^{k+1}}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}}_{=\beta_k} \boldsymbol{d}^k.$$

- Protože všechny ostatní koeficienty v dané sumě jsou nulové, budeme pro jednoduchost psát místo $\beta_{k,k}$ jen β_k.

- Využijme rovnosti $\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1})$ a upravme čitatele ve výrazu β_k

$$(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1}) = -\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T\boldsymbol{r}^{k+1}.$$

- Využijme rovnosti $\mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1})$ a upravme čitatele ve výrazu β_k

$$(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1}) = -\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T\boldsymbol{r}^{k+1}.$$

a jmenovatele

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = (\boldsymbol{r}^k - \beta_{k-1}\boldsymbol{d}^{k-1})^T \mathsf{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k)^T(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1}) = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k.$$

- Využijme rovnosti $\mathrm{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1})$ a upravme čitatele ve výrazu β_k

$$(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \mathrm{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1}) = -\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{k+1})^T\boldsymbol{r}^{k+1}.$$

  a jmenovatele

$$(\boldsymbol{d}^k)^T \mathrm{A}\boldsymbol{d}^k = (\boldsymbol{r}^k - \beta_{k-1}\boldsymbol{d}^{k-1})^T \mathrm{A}\boldsymbol{d}^k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k)^T(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1}) = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k.$$

- Po dosazení do předpisu pro β_k dostaneme

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

- Podobně můžeme upravit předpis pro α_k

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{d}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathrm{A}\boldsymbol{d}^k} = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T\boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T\mathrm{A}\boldsymbol{d}^k}.$$

function conjuate_gradient(A, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x}^0$)

$\boldsymbol{d}^0 = \boldsymbol{r}^0 = b - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^0$

$k = 0$

while $\|\boldsymbol{r}^k\|/\|\boldsymbol{r}^0\| > \varepsilon$ **do**

$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k}{(\boldsymbol{d}^k)^T \mathsf{A} \boldsymbol{d}^k}$

$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{d}^k$

$\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k \mathsf{A} \boldsymbol{r}^k$

$\beta_k = \frac{(\boldsymbol{r}^{k+1})^T \boldsymbol{r}^{k+1}}{(\boldsymbol{r}^k)^T \boldsymbol{r}^k}$

$\boldsymbol{d}^{k+1} = \boldsymbol{r}^{k+1} + \beta_k \boldsymbol{d}^k$

$k = k + 1$

end while

end function

- Chybu můžeme odhadnout pomocí vztahů

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_{\mathsf{A}} \leq \frac{\kappa(\mathsf{A}) - 1}{\kappa(\mathsf{A}) + 1}\|\boldsymbol{e}^{k}\|_{\mathsf{A}}$$

a

$$\|\boldsymbol{e}^{k}\|_{\mathsf{A}} \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa(\mathsf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathsf{A})} + 1}\right)^{k}\|\boldsymbol{e}^{0}\|_{\mathsf{A}}.$$

- Chybu můžeme odhadnout pomocí vztahů

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_{\mathsf{A}} \leq \frac{\kappa(\mathsf{A}) - 1}{\kappa(\mathsf{A}) + 1} \|\boldsymbol{e}^{k}\|_{\mathsf{A}}$$

  a

$$\|\boldsymbol{e}^{k}\|_{\mathsf{A}} \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa(\mathsf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathsf{A})} + 1} \right)^{k} \|\boldsymbol{e}^{0}\|_{\mathsf{A}}.$$

- Můžeme také odhadnout maximální počet iterací nutných k dosažení relativní přesnosti ε (tedy $\|\boldsymbol{e}^{k}\| \leq \varepsilon \|\boldsymbol{e}^{0}\|$):

$$k \leq \lceil \frac{1}{2} \sqrt{\kappa(\mathsf{A})} \ln \frac{2}{\varepsilon} \rceil.$$

- Chybu můžeme odhadnout pomocí vztahů

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_{\mathsf{A}} \leq \frac{\kappa(\mathsf{A}) - 1}{\kappa(\mathsf{A}) + 1}\|\boldsymbol{e}^{k}\|_{\mathsf{A}}$$

  a

$$\|\boldsymbol{e}^{k}\|_{\mathsf{A}} \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa(\mathsf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathsf{A})} + 1}\right)^{k}\|\boldsymbol{e}^{0}\|_{\mathsf{A}}.$$

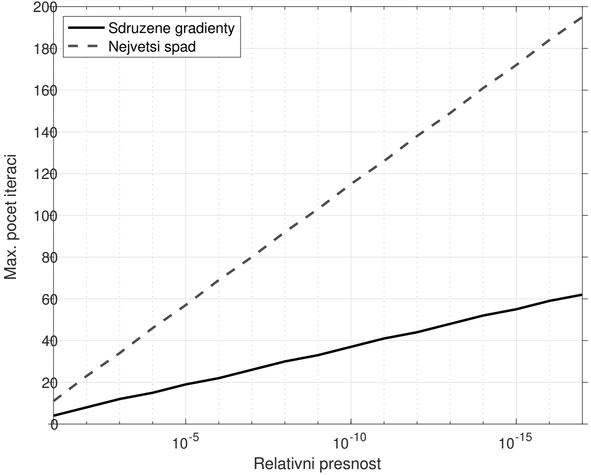
- Můžeme také odhadnout maximální počet iterací nutných k dosažení relativní přesnosti ε (tedy $\|\boldsymbol{e}^{k}\| \leq \varepsilon\|\boldsymbol{e}^{0}\|$):

$$k \leq \lceil \frac{1}{2}\sqrt{\kappa(\mathsf{A})}\ln\frac{2}{\varepsilon}\rceil.$$

- Porovnejme to s metodou největšího spádu, pro kterou platí

$$k \leq \lceil \frac{1}{2}\kappa(\mathsf{A})\ln\frac{1}{\varepsilon}\rceil.$$

- Porovnejme maximální počet iterací nutných k dosažení dané relativní přesnosti pomocí metody největšího spádu a metody sdružených gradientů.



Na závěr poznamenejme, že metoda sdružených gradientů patří mezi tzv. Krylovovské metody. Tyto metody generují posloupnost Krylovových podprostorů ve tvaru $\mathcal{K}^k(\mathsf{A}, \boldsymbol{b}) = \operatorname{span}\left\{\boldsymbol{b}, \mathsf{A}\boldsymbol{b}, \mathsf{A}^2\boldsymbol{b}, \dots, \mathsf{A}^k\boldsymbol{b}\right\}$ a v každé iteraci minimalizují chybu v energetické normě na daném podprostoru, tedy

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \operatorname*{arg\,min}_{\overline{\boldsymbol{x}} \in \boldsymbol{x}^0 + \mathcal{K}^k(\mathsf{A}, \boldsymbol{r}^0)} \|\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}\|_{\mathsf{A}},$$

kde $\boldsymbol{x}$ je přesné řešení.

Předpodmínění

- Rychlost konvergence iteračních metod závisí na čísle podmíněnosti $\kappa(\mathsf{A})$ matice soustavy.

Předpodmínění

- Rychlost konvergence iteračních metod závisí na čísle podmíněnosti $\kappa(A)$ matice soustavy.
- Cílem předpodmínění je snížení čísla podmíněnosti soustavy a tedy i počtu iterací potřebných k řešení.

Předpodmínění

- Rychlost konvergence iteračních metod závisí na čísle podmíněnosti $\kappa(\mathsf{A})$ matice soustavy.
- Cílem předpodmínění je snížení čísla podmíněnosti soustavy a tedy i počtu iterací potřebných k řešení.
- Buď M taková matice, že platí $\kappa(\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}) \ll \kappa(\mathsf{A})$, pak místo původní soustavy

$$\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

můžeme řešit předpodmíněnou soustavu

$$\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}.$$

Předpodmínění

- Rychlost konvergence iteračních metod závisí na čísle podmíněnosti $\kappa(\mathsf{A})$ matice soustavy.
- Cílem předpodmínění je snížení čísla podmíněnosti soustavy a tedy i počtu iterací potřebných k řešení.
- Buď M taková matice, že platí $\kappa(\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}) \ll \kappa(\mathsf{A})$, pak místo původní soustavy

$$\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

  můžeme řešit předpodmíněnou soustavu

$$\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}.$$

- Matici M nazýváme levým předpodmiňovačem.

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.
- Sestavme Choleského rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$ a využijme toho, že $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ a $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ mají stejná vlastní čísla (tzn. stejné číslo podmíněnosti)

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.
- Sestavme Choleského rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$ a využijme toho, že $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ a $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ mají stejná vlastní čísla (tzn. stejné číslo podmíněnosti)– je-li $\boldsymbol{v}$ vlastní vektor matice $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ s vlastním číslem λ, pak $\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}$ je vlastní vektor $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ se stejným vlastním číslem λ:

$$(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^T\boldsymbol{v})$$

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.
- Sestavme Choleského rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$ a využijme toho, že $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ a $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ mají stejná vlastní čísla (tzn. stejné číslo podmíněnosti)– je-li $\boldsymbol{v}$ vlastní vektor matice $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ s vlastním číslem λ, pak $\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}$ je vlastní vektor $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ se stejným vlastním číslem λ:

$$(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}) \quad = \quad \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{v}$$

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.
- Sestavme Choleského rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$ a využijme toho, že $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ a $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ mají stejná vlastní čísla (tzn. stejné číslo podmíněnosti)– je-li $\boldsymbol{v}$ vlastní vektor matice $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ s vlastním číslem λ, pak $\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}$ je vlastní vektor $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ se stejným vlastním číslem λ:

$$(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}) = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{v} = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v}$$

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.
- Sestavme Choleského rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$ a využijme toho, že $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ a $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ mají stejná vlastní čísla (tzn. stejné číslo podmíněnosti)– je-li $\boldsymbol{v}$ vlastní vektor matice $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ s vlastním číslem λ, pak $\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}$ je vlastní vektor $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ se stejným vlastním číslem λ:

$$(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}) = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{v} = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v} = (\underbrace{\mathsf{L}^T\mathsf{L}^{-T}}_{=\mathsf{I}})\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v}$$

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.
- Sestavme Choleského rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$ a využijme toho, že $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ a $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ mají stejná vlastní čísla (tzn. stejné číslo podmíněnosti)– je-li $\boldsymbol{v}$ vlastní vektor matice $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ s vlastním číslem λ, pak $\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}$ je vlastní vektor $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ se stejným vlastním číslem λ:

$$
\begin{aligned}
(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}) &= \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{v} = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v} = (\underbrace{\mathsf{L}^T\mathsf{L}^{-T}}_{=\mathsf{I}})\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v} \\
&= \mathsf{L}^T\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{-1}}_{=\mathsf{M}^{-1}}\mathsf{A}\boldsymbol{v}
\end{aligned}
$$

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.
- Sestavme Choleského rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$ a využijme toho, že $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ a $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ mají stejná vlastní čísla (tzn. stejné číslo podmíněnosti)– je-li $\boldsymbol{v}$ vlastní vektor matice $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ s vlastním číslem λ, pak $\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}$ je vlastní vektor $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ se stejným vlastním číslem λ:

$$
\begin{aligned}
(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}) &= \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{v} = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v} = (\underbrace{\mathsf{L}^T\mathsf{L}^{-T}}_{=\mathsf{I}})\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v} \\
&= \mathsf{L}^T\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{-1}}_{=\mathsf{M}^{-1}}\mathsf{A}\boldsymbol{v} = \mathsf{L}^T\underbrace{\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v}}_{=\lambda\boldsymbol{v}}
\end{aligned}
$$

- Je-li A symetrická pozitivně definitní je výhodné použít např. metodu největšího spádu nebo metodu sdružených gradientů.
- V takovém případě chceme, aby i předpodmiňovač M byl SPD matice (poté je i M^{-1} SPD).
- Součin $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ nemusí obecně být SPD matice $\Rightarrow$ na systém $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ nemůžeme použít metodu největšího spádu ani sdružených gradientů.
- Sestavme Choleského rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$ a využijme toho, že $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ a $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ mají stejná vlastní čísla (tzn. stejné číslo podmíněnosti)– je-li $\boldsymbol{v}$ vlastní vektor matice $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}$ s vlastním číslem λ, pak $\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}$ je vlastní vektor $\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ se stejným vlastním číslem λ:

$$
\begin{aligned}
(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}) &= \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{v} = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v} = (\underbrace{\mathsf{L}^T\mathsf{L}^{-T}}_{=\mathsf{I}})\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v} \\
&= \mathsf{L}^T\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{-1}}_{=\mathsf{M}^{-1}}\mathsf{A}\boldsymbol{v} = \mathsf{L}^T\underbrace{\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{v}}_{=\lambda\boldsymbol{v}} = \lambda\mathsf{L}^T\boldsymbol{v}
\end{aligned}
$$

- Přenásobme nyní původní soustavu $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ zleva maticí L^{-1}:

$$\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}$$

- Přenásobme nyní původní soustavu $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ zleva maticí L^{-1}:

$$\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}$$

- Abychom zachovali symetrii a pozitivní definitnost, musíme matici A přenásobit L^{-T} zprava.

$$\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{T}}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{x} = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}.$$

- Přenásobme nyní původní soustavu $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ zleva maticí L^{-1}:

$$\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}$$

- Abychom zachovali symetrii a pozitivní definitnost, musíme matici A přenásobit L^{-T} zprava.

$$\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{T}}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{x} = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}.$$

- Místo původní soustavy $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ a místo soustavy $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ řešme ekvivalentní systém

$$(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^{T}\boldsymbol{x}) = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}.$$

- Přenásobme nyní původní soustavu $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ zleva maticí L^{-1}:
$$\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}$$

- Abychom zachovali symetrii a pozitivní definitnost, musíme matici A přenásobit L^{-T} zprava.
$$\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\underbrace{\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{T}}_{=\mathsf{I}}\boldsymbol{x} = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}.$$

- Místo původní soustavy $\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ a místo soustavy $\mathsf{M}^{-1}\mathsf{A}\boldsymbol{x} = \mathsf{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ řešme ekvivalentní systém
$$(\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T})(\mathsf{L}^{T}\boldsymbol{x}) = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}.$$

- Zaveďme značení $\hat{\mathsf{A}} = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}, \hat{\boldsymbol{x}} = \mathsf{L}^{T}\boldsymbol{x}, \hat{\boldsymbol{b}} = \mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b}$. Soustavu pak můžeme zapsat jako
$$\hat{\mathsf{A}}\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{b}}. \tag{1}$$

- Matice $\hat{\mathsf{A}} = \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}$ je symetrická a pozitivně definitní, k řešení tedy můžeme použít metodu největšího spádu či metodu sdružených gradientů.
- Po nalezení $\hat{\boldsymbol{x}}$ získáme řešení původní soustavy jako $\boldsymbol{x} = \mathsf{L}^{-T}\hat{\boldsymbol{x}}$.

- Nevýhoda předchozího přístupu – potřebujeme znát rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$.

- Nevýhoda předchozího přístupu – potřebujeme znát rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$.
- Vhodnou manipulací s předpisy iteračních metod se této nutnosti zbavíme.

- Nevýhoda předchozího přístupu – potřebujeme znát rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$.
- Vhodnou manipulací s předpisy iteračních metod se této nutnosti zbavíme.
- Aplikujme např. předpis Richardsonovy metody na soustavu $\hat{\mathsf{A}}\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{b}}$:

$$\hat{\boldsymbol{x}}^{k+1} = \hat{\boldsymbol{x}}^k + \omega(\hat{\boldsymbol{b}} - \hat{\mathsf{A}}\hat{\boldsymbol{x}}^k),$$

- Nevýhoda předchozího přístupu – potřebujeme znát rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$.
- Vhodnou manipulací s předpisy iteračních metod se této nutnosti zbavíme.
- Aplikujme např. předpis Richardsonovy metody na soustavu $\hat{\mathsf{A}}\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{b}}$:

$$\hat{\boldsymbol{x}}^{k+1} = \hat{\boldsymbol{x}}^{k} + \omega(\hat{\boldsymbol{b}} - \hat{\mathsf{A}}\hat{\boldsymbol{x}}^{k}),$$

Tedy

$$\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^{k+1} = \mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^{k} + \omega(\mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b} - \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^{k}).$$

Přenásobme zleva maticí L^{-T}:

$$\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^{k+1} = \mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^{k} + \omega(\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b} - \mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^{k}).$$

- Nevýhoda předchozího přístupu – potřebujeme znát rozklad $\mathsf{M} = \mathsf{L}\mathsf{L}^T$.
- Vhodnou manipulací s předpisy iteračních metod se této nutnosti zbavíme.
- Aplikujme např. předpis Richardsonovy metody na soustavu $\hat{\mathsf{A}}\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{b}}$:

$$\hat{\boldsymbol{x}}^{k+1} = \hat{\boldsymbol{x}}^k + \omega(\hat{\boldsymbol{b}} - \hat{\mathsf{A}}\hat{\boldsymbol{x}}^k),$$

Tedy

$$\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^{k+1} = \mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^k + \omega(\mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b} - \mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^k).$$

Přenásobme zleva maticí L^{-T}:

$$\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^{k+1} = \mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^k + \omega(\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{-1}\boldsymbol{b} - \mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{L}^{-T}\mathsf{L}^T\boldsymbol{x}^k).$$

$$\Downarrow$$

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \omega\mathsf{M}^{-1}(\boldsymbol{b} - \mathsf{A}\boldsymbol{x}^k).$$

- Jak zvolit M:
  - inverze M by měla aproximovat inverzi A ($M^{-1} \approx A^{-1}$),
  - řešení soustavy s M by mělo být snadné a efektivní,
  - pokud je matice A symetrická a pozitivně definitní, měl by i předpodmiňovač být symetrický pozitivně definitní.

- Jak zvolit M:
  - inverze M by měla aproximovat inverzi A ($M^{-1} \approx A^{-1}$),
  - řešení soustavy s M by mělo být snadné a efektivní,
  - pokud je matice A symetrická a pozitivně definitní, měl by i předpodmiňovač být symetrický pozitivně definitní.
- $M = A$ – v takovém případě inverze M aproximuje inverzi A přesně, ale aplikace samotného předpodmínění je stejně náročná jako řešení původní úlohy;
- $M = I$ – v tomto případě je sice aplikace předpodmiňovače triviální, nedosáhneme ale žádného zlepšení čísla podmíněnosti (získáme původní nepředpodmíněný algoritmus).

- diagonální předpodmiňovač – volíme $\mathsf{M} = \operatorname{diag} \mathsf{A}$. V tomto případě je výpočet inverze M velmi snadný. Tento předpodmiňovač je efektivní např. pro soustavy s diagonálně dominantní maticí.
- neúplný LU/Choleského rozklad – je vhodný pro soustavy s řídkou maticí. Problémem klasického LU/Choleského rozkladu je, že přestože je matice A řídká, mohou být její faktory L, U plné nebo více zaplněné. Princip neúplného LU/Choleského rozkladu je jednoduchý - použijeme stejný algoritmus jako u klasického LU/Choleského rozkladu, ale nenulový prvek do matice L nebo U uložíme pouze tehdy, existuje-li nenulový prvek na stejné pozici v rozkládané matici A. Dostaneme neúplné faktory $\tilde{\mathsf{L}}, \tilde{\mathsf{U}}$ a příslušné předpodmíňovače definujeme jako $\mathsf{M} = \tilde{\mathsf{L}}\tilde{\mathsf{U}}$ nebo $\mathsf{M} = \tilde{\mathsf{L}}\tilde{\mathsf{L}}^T$. Řešit soustavu s M je pak snadné, protože známe její rozklad na součin trojúhelníkových matic a můžeme použít dopřednou a zpětnou substituci.

Děkuji za pozornost

Michal Merta

VŠB – Technická univerzita Ostrava

michal.merta@vsb.cz

6. dubna 2023

VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA | IT4INNOVATIONS NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ CENTRUM