NUMERICKÉ METÓDY LINEÁRNEJ ALGEBRY

09. Základné algoritmy pre výpočet vlastných čísiel a vektorov, 10. Spôsoby prepodmienenia pri riešní sústav lineárnych rovníc.

Ing. Marek Macák, PhD.

Konzultácie: podľa potreby/dohody

22. Apríl 2024

Opakovanie?

- Nech $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Potom λ je vlastné číslo matice A, ak existuje nenulový vektor x taký, že platí
$$Ax = \lambda x \leftrightarrow (A - \lambda I)x = 0. \tag{1}$$
- Množina vlastných čísiel sa nazýva **spektrum** matice A.
- Vektor $x \neq 0$ sa nazýva (pravý) vlastný vektor matice A prislúchajúci k vlastnému číslu λ.
- Vektor $y \neq 0$, ktorý vyhovuje rovnici $y^T A = \lambda y^T$ sa nazýva ľavý vlastný vektor matice A prislúchajúci k vlastnému číslu λ.
- Homogénny systém rovníc $(A - \lambda I)x = 0$ má nenulové riešenie práve vtedy, ak $det(A - \lambda I) = 0$.

Opakovanie?

- Polynóm premennej λ definovaný ako

$$P_\lambda = det(A - \lambda I) \qquad (2)$$

má stupeň n a nazýva sa charakteristický polynóm matice A. Takže vlastné čísla matice A sú korene jej charakteristického polynómu.

- Regulárna matica A má nenulové vlastné čísla. Ak (λ, x) je vlastný pár regulárnej matice A, potom $(1/\lambda, x)$ je korešpondujúci vlastný pár matice A^{-1}. $(\lambda - \sigma, x)$ je vlastný pár matice $A - \sigma I$ a (λ^k, x) je vlastný pár matice A^k.
- Vlastné čísla trojuholníkovej matice sú jej diagonálne prvky.
- Nech T je regulárna matica. Potom matice A a TAT^{-1} majú rovnaké vlastné čísla (matica TAT^{-1} je podobná matici A).

Opakovanie??

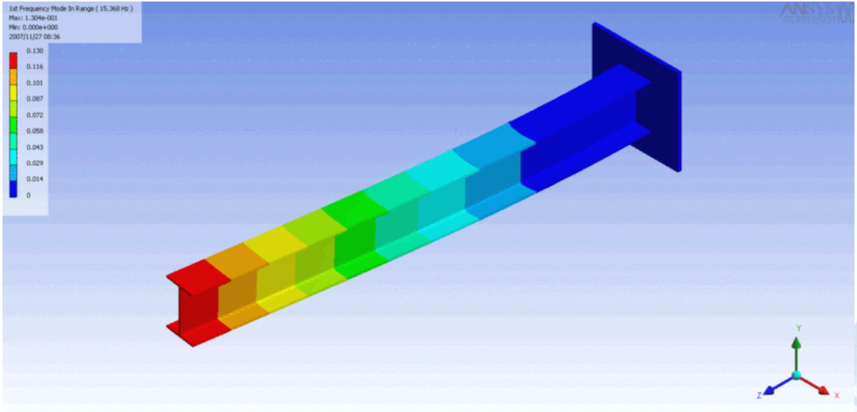
- Z Abel-Ruffiniho vety plyne, že nie je možne zostrojiť priamu metódu pre výpočet kompletného spektra matice pro $n \geq 5$.
- Všetky metódy výpočtu spektier matíc sú preto iteračné.
- Potrebné je poznať nejaký odhad chyby, aby bolo možné určiť vhodné kritérium zastavenia pri výpočte iterácií.
- Nech $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je hermitovská matica a nech $\tilde{\lambda}$ a $\tilde{x} \neq 0$ sú pripísané aproximácie vlastnej hodnoty a vlastného čísla λ vektora x. Pre rezíduum

$$r = A\tilde{x} - \tilde{\lambda}\tilde{x} \tag{3}$$

potom

$$min_{\lambda_i \in \rho(A)} |\tilde{\lambda} - \lambda_i| \leq \frac{||r||}{||x||} \tag{4}$$

Úvod



Modelovanie a analýza vibrácii.

Úvod

Modelovanie a analýza vibracii - Tacoma bridge.

Tacoma bridge

Lokalizacia

- V niektorých aplikáciách (napr. stabilita dynamických systémov, konvergencia iteračných metód a pod.) nie sú dôležité hodnoty vlastných čísiel, ale ich lokalizácia v komplexnej rovine ($Re(\lambda) < 0, |\lambda| < 1$).
- Geršgorin (1931): Nech $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Položme

$$r_i = \sum_{i=j, j \neq i}^{n} |a_{ij}|, \; i = 1, 2, ..., n. \tag{5}$$

Potom každé vlastné číslo λ splna aspoň jednu z nasledujúcich nerovností:

$$|\lambda - a_{ij}| \leq r_i, \; i = 1, 2, ..., n. \tag{6}$$

t.j. spektrum matice A leží v zjednotení n Geršgorinových diskov
$z \in \mathbb{C} : |\lambda - a_{ii}| \leq r_i, i = 1, 2, ..., n$.

Lokalizacia

- Nech r Geršgorinových diskov je disjunktných vzhľadom na zostávajúcich $n - r$ diskov ($r < n$). Potom zjednotenie týchto r diskov obsahuje presne r vlastných čísiel matice A.
- Príklad:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0.2 & 0.1 \\ 0.2 & 4 & 0.3 \\ 0.4 & 0.5 & 8 \end{pmatrix} \tag{7}$$

- Riesenie ....
- Všetky 3 disky sú navzájom disjunktné, takže každý z nich obsahuje práve jedno vlastné číslo ($\lambda_1 = 0.9834, \lambda_2 = 3.9671, \lambda_3 = 8.0495$).

Ako na to?

Mocninová metóda (MM)

- Príklad:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{8}$$

....

- Ak by A nebolo diagonálna ale všeobecná výpočet by A^k by bol náročný
- Výpočet k-tej mocniny môžeme nahradiť

$$x^{(k+1)} = Ax^{(k)} \tag{9}$$

čo možno prepísať

$$x^{(k)} = A^k x^{(0)} \tag{10}$$

Mocninová metóda (MM)

- Videli sme že je doležíte aby hlavná zložka vektora bola nenulová, to znamená $x^{(0)}$ musí mat nenulový priemet do smeru najväčšieho vlastného čísla.
- Delením 3^k sme urobili tak, že výsledný postupnosť $x^{(k)}$ konverguje. Inak by sme dostali postupnosť vektora, ktorá síce konvergujú do smeru najväčšieho vlastného vektora, ale by rástli do nekonečna.
- Vo všeobecnosti môžeme deliť najväčšou zložku výsledného vektora. Potom dostaneme tzv. mocninovu metódu

Mocninová metóda (MM)

- Nech A má VC : $|\lambda_1| > |\lambda_2| \leq |\lambda_3| \leq |\lambda_n|$ a nech v_1 je VV prislúchajúci k λ_1. Nech je A diagonalizovateľná.
- Tato metóda konštruuje postupnosť

$$y^{(k+1)} = Ax^{(k)} \tag{11}$$

$$\alpha_k = max(x^{(k+1)}) \tag{12}$$

$$x^{(k+1)} = y^{(k+1)}/\alpha_k \tag{13}$$

za vhodnych predpokladov $x^{(k)}$ konverguje k najväčšiemu vlastnému vektoru a α_k k najväčšiemu číslo.

Mocninová metóda (MM)

- Nech je A diagonalizovateľná

Zvol $x^{(0)} \neq 0, tol, k = 0$

Do $\quad k = k + 1$

$\tilde{x}^{(k)} = Ax^{(k-1)}.$

$\lambda_m = max(\tilde{x}^{(k)}).$

$x^{(k)} = \frac{1}{\lambda_m}\tilde{x}^{(k)}.$

$r^{(k)} = Ax^{(k)} - \lambda_m x^{(k)}.$

until $k \geq maxit$ or $||r^{(k)}|| \geq |tol.$

Mocninová metóda (MM)

- Príklad 1:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad x^{(0)} = (1, 1)^T \tag{14}$$

potom

k	$y^{(k+1)}$	α_k	$x^{(k+1)}$
0	$(3, 2)^T$	3	$(1, \frac{2}{3})^T$
1	$(3, \frac{4}{3})^T$	3	$(1, \frac{4}{9})^T$
2	$(3, \frac{8}{9})^T$	3	$(1, \frac{8}{27})^T$
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.
i	$(3, \frac{2^{i+1}}{3^i})^T$	3	$(1, (\frac{2}{3})^{i+1})^T$

Mocninová metóda (MM)

- Príklad 2:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad x^{(0)} = (0,1)^T \tag{15}$$

potom

k	$y^{(k+1)}$	α_k	$x^{(k+1)}$
0	$(0,2)^T$	2	$(0,1)^T$
1	$(0,2)^T$	2	$(0,1)^T$
2	$(0,2)^T$	2	$(0,1)^T$
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.
i	$(0,2)^T$	2	$(0,1)^T$

Mocninová metóda (MM)

- Príklad 3:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad x^{(0)} = (\epsilon, 1)^T \tag{16}$$

potom

k	$y^{(k+1)}$	α_k	$x^{(k+1)}$
0	$(3\epsilon, 2)^T$	2	$(\frac{3}{2}\epsilon, 1)^T$
1	$(\frac{9}{2}\epsilon, 2)^T$	2	$(\frac{9}{4}\epsilon, 1)^T$
.	.	.	.
i-1	$(\frac{3^i}{2^{i-1}}\epsilon, 2)^T$	2	$(\frac{3^i}{2^i}\epsilon, 1)^T$
i	$(\frac{3^{i+1}}{2^i}\epsilon, 2)^T$	$\frac{3^{i+1}}{2^i}\epsilon$	$(1, \frac{2^i}{3^{i+1}}\epsilon)^T$
i+1	$(3, \frac{2^{i+1}}{3^{i+1}}\epsilon)^T$	3	$(1, \frac{2^{i+1}}{3^{i+2}}\epsilon)^T$
.	.	.	.

Mocninová metóda (MM)

- Ak chceme nájsť najmenšie vlastné číslo v absolútnej hodnote matice A, môžeme použiť mocninovú metódu na maticu A^{-1}.
- Najmenšia hodnota vlastného čísla potom bude $1/\lambda$.
- Krok $y^{(k+1)} = A^{-1}x^{(k)}$ potom riešime ako $Ay^{(k+1)} = x^{(k)}$
  Týmto trikom sa zbavíte výpočtu inverzie matice a používa v numerike používa veľmi často.

Mocninová metóda (MM)

- Pokial budeme $x^{(0)}$ voliť náhodne, potom je nulová pravdepodobnosť trafiť vektor s nulovým priemetom do najväčšieho vlastného vektora.
- V praxi je u reálnych ulož zaistene že zaokrúhľovacie chyby vnesú do výpočtu potrebne ϵ.
- Rýchlosť konvergencie metódy je daná podielom $|\lambda_2|/|\lambda_1|$

Princíp deflácie (Redukčná metóda)

- Deflácia je metóda na výpočet subdominantného vlastného čísla (VC) a vlastného vektora (VV): $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq ... \geq |\lambda_n|$. Pritom sa predpokladá, že k dispozícii je kvalitný odhad dominantného páru (λ_1, x_1).
- Householderova matica H (elementárna reflexia): Nech $e_1 = (1, 0, ..., 0)^T$ a nech $x = (x_1, x_2, ...x_n)^T \neq \alpha e_1$..
  potom existuje vektor u

$$u = x + sgn(x_1)||x||_2 e_1 \tag{17}$$

  Taký že

$$H = I - 2\frac{uu^T}{u^T u}, \quad Hx = -sgn(x_1)||x||_2 e_1. \tag{18}$$

  je symetrická, ortogonálna.

Princíp deflácie (Redukčná metóda)

- Nech (λ_1, x_1) je dominantný vlastný pár matice A a nech H je taká HM, že $Hv_1 = \lambda e_1$. Potom
$$A_1 = H^{-1}AH = \begin{pmatrix} \lambda_1 & c^T \\ 0 & A_2 \end{pmatrix} \tag{19}$$
kde A_2 je rádu $n-1$ a má tie isté vlastné čísla ako A okrem λ_1. Matica H je maticou prechodu medzi bazami.
- Dokaz ...
- Ak teda $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq ... \geq |\lambda_n|$, potom po deflačnom kroku $A_1 = HAH$ je λ_2 dominantné VC matice A_2.

Princíp deflácie (Redukčná metóda)

- Tvar H je taký že stĺpce tvoria bázické vektory

$$H = \begin{pmatrix} x_1 & & & 0 \\ x_2 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ x_n & 0 & & 1 \end{pmatrix} \tag{20}$$

- Inverznú maticu dostaneme tak že prvý stĺpce podelíme x_1

$$H^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{x_1} & & & 0 \\ -\frac{x_2}{x_1} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -\frac{x_n}{x_1} & 0 & & 1 \end{pmatrix} \tag{21}$$

Princíp deflácie (Redukčná metóda)

- Roznásobením dostaneme maticu A_2

$$A_2 = \begin{pmatrix} a_{22} - \frac{x_2}{x_1}a_{12} & a_{23} - \frac{x_2}{x_1}a_{13} & \cdots & a_{2n} - \frac{x_2}{x_1}a_{1n} \\ a_{32} - \frac{x_3}{x_1}a_{12} & a_{33} - \frac{x_3}{x_1}a_{13} & \cdots & a_{3n} - \frac{x_3}{x_1}a_{1n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n2} - \frac{x_n}{x_1}a_{12} & a_{n3} - \frac{x_n}{x_1}a_{13} & \cdots & a_{nn} - \frac{x_n}{x_1}a_{1n} \end{pmatrix} \tag{22}$$

- Podobne ide napisat

$$c^T = \frac{1}{x_1}(a_{12}, a_{13}, ..., a_{1n}) \tag{23}$$

- Teraz vieme pre maticu A_2 nájsť vlastne číslo λ_2 a vlastný vektor napr. $\vec{z} = (z_2, ... z_n)^T$.

Princíp deflácie (Redukčná metóda)

- Ako dopočítať odpovedajúci vlastný vektor matice A?
- Logicky ako lineárna kombinácia bázového vektora daného stĺpcami matice H. Na to však potrebujeme vypočítať zložku z1.
- Musí byť platiť

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & c^T \\ 0 & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ \vec{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 z_1 + c^T \vec{z} \\ A_2 \vec{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 z_1 + c^T \vec{z} \\ \lambda_2 \vec{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_2 z_1 \\ \lambda_2 \vec{z} \end{pmatrix} \tag{24}$$

odtiaľ dostávame

$$\lambda_1 z_1 + c^T = \lambda_2 z_1 \rightarrow z_1 = \frac{c^T \vec{z}}{\lambda_2 - \lambda_1} \tag{25}$$

- Teraz vieme pre maticu A_2 nájsť vlastne číslo λ_2 a vlastný vektor napr. $\vec{z} = (z_2, \ldots z_n)^T$.

Princíp deflácie (Redukčná metóda)

- Výpočet počtu najväčších, resp. najmenších vlastných čísel. matice A, sa používa nasledujúca kombinácia MM, MII a deflace:
  - 1) Použi mocninou metódu aplikovanú na A (resp. mocninou metódu aplikovanú na A^{-1}) na výpočet dobrej aproximácie v absolútnej hodnote najväčšieho (resp. najmenšieho) VC a príslušného VV.
  - 2) Aplikuj metódu inverzných iterácií s aproximovaným VC (zostáva nemenné) a s aproximovaným VV z kroku 1 ako počiatočným vektorom. Takto sa získa spravidla veľmi spresnený odhad VV
  - 3) Aplikuj defláciu na výpočet ďalšieho vlastného páru
  - 4) Opakuj kroky 1-3 pre požadovaný počet vlastných párov

Metóda inverzných iterácií (MII)

- Ak je k dispozícii kvalitná aproximácia σ dominantného VC λ_1, potom MII efektívne počíta prislúchajúci VV.
- Kvalitná aproximácia: $|\lambda_1 - \sigma| << |\lambda_i - \sigma|, i = 2, ...n$.
- Presnosť počítača: konštanta ϵ; pri dvojitej presnosti je $\epsilon \approx 1.11 \times 10^{-16}$.

Zvol $x^{(0)} \neq 0, \sigma, k = 0$
Do $k = k + 1$
Najdi $x^{(k)}$ riesenim $(A - \sigma I)\tilde{x}^{(k)} = x^{(k-1)}$.
$\lambda_m = max(\tilde{x}^{(k)})$.
$x^{(k)} = \frac{1}{\lambda_m}\tilde{x}^{(k)}$.
$x^{(k)} = x^{(k)}/||x^{(k)}||$.
$r^{(k)} = Ax^{(k)} - \sigma x^{(k)}$.
until $k \geq maxit$ or $||r^{(k)}|| \geq ||A||\epsilon$.

Metóda inverzných iterácií (MII)

- MII je vlastne mocninová metóda aplikovaná na maticu $(A - \sigma I)^{-1}$, pričom je k dispozícii kvalitná aproximácia σ VC λ_1, ktorá sa počas iterácií nemení.
- Kombinácia MM a MII, kde MII slúži na spresnenie odhadu VV. Obvykle totiž MM dáva omnoho presnejší odhad VC než korešpondujúceho VV.
- Ak máme k dispozícii kvalitný odhad σ ľubovoľného VC λ_j potom MII spravidla veľmi rýchlo konverguje k VV prislúchajúcemu k λ_j.

NUMERICKÉ METÓDY LINEÁRNEJ ALGEBRY

09. Základné algoritmy pre výpočet vlastných čísiel a vektorov, 10. Spôsoby prepodmienenia pri riešní sústav lineárnych rovníc.

Ing. Marek Macák, PhD.

Konzultácie: podľa potreby/dohody

22. Apríl 2024

Prečo?

- Nedostatočná robustnosť je všeobecne uznávanou slabinou iteratívnych metod v porovnaní s priamym metódami.
- Tento nedostatok bráni prijatiu iteračných metód napriek ich vhodnosti pre veľmi veľké lineárne systémy.
- Obidve stránky účinnosť aj robustnosť iteračných techník možno zlepšiť použitím predpodmienenia.
- Predpodmienenie je jednoducho prostriedok na transformáciu pôvodného lineárneho systému na systém, ktorý má rovnaké riešenie, ale ktorý sa bude pravdepodobne ľahšie riešiť iteračnou metódou.
- Vo všeobecnosti je spoľahlivosť iteračných techník pri riešení rôznych aplikácií veľmi závislá viac na kvalite predpodmienenia ako na použitých konkrétnych akcelerátoroch Krylovovho podpriestoru.

Ako?

- Prvým krokom pri predpodmienení je nájsť maticu predpodmienenia (preconditioning matrix) M.
- Matica M môže byť definovaná rôznymi spôsobmi, ale musí spĺňať niekoľko minimálnych požiadaviek:
  - Z praktického hľadiska je najväčšou požiadavkou na M to, aby bola nenáročná na riešenie lineárnych systémov $Mx = b$.
  - Taktiež M by mala byť v určitom zmysle blízka A a mala by byť jednoznačne nesingulárna.
- Keď je k dispozícii matica predpodmienenia M, sú známe tri spôsoby použitia predpodmienenia.

Ako?

- Predpodmienenie sa môže aplikovať zľava, čo vedie k predpodmienenému systému:

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b. \tag{26}$$

- Prípadne sa môže použiť aj vpravo:

$$AM^{-1}u = b, \quad u = Mx, \quad x = M^{-1}u. \tag{27}$$

- Nakoniec, keď je prepodmienenie k dispozícii vo faktorovanej forme $M = M_L M_U$ kde M_L a M_U sú trojuholníkové matice, predpodmienie môžeme napísať ako:

$$M_L^{-1}AM_U^{-1}u = M_L^{-1}b, \quad x = M_U^{-1}u, alebo\ u = M_U x. \tag{28}$$

Ako dostanem maticu M?

Jacobi Preconditioning

- Najjednoduchší predpodmienovač je zostavený len z diagonály matice:

$$m_{i,j} = \begin{cases} a_{i,j} & if\ i = j \\ 0 & inak \end{cases} \tag{29}$$

- Je možné použiť bez použitia akéhokoľvek ďalšieho úložiska nad rámec samotnej matice.

Gauss-Seidel a SOR Preconditioning

- Gauss-Seidel predpodmienenie je zostavene len z prvkov matice:

$$M_{GS} = (D - L)D^{-1}(D - U). \tag{30}$$

- SOR predpodmienenie je zostavene len z prvkov matice:

$$M_\omega = \frac{1}{2-\omega}(\frac{1}{\omega}D - L)(\frac{1}{\omega}D^{-1})(\frac{1}{\omega}D - U). \tag{31}$$

- Optimálna hodnota parametra ω, podobne ako parameter v metóde SOR, zníži počet iterácií.

Cholesky Preconditioning

- Zalozene na Choleskyho faktorizácii matice A:

$$\boxed{\begin{array}{l}
\textbf{for } k = 0, 1, \ldots, n-1 \\
\quad \textbf{for } i = 0, 1, \ldots, k-1 \\
\qquad h_{ki} = \left(a_{ki} - \sum_{j=0}^{i-1} h_{ij} * h_{kj}\right) / h_{ii} \\
\quad \textbf{end} \\
\quad h_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=0}^{k-1} h_{kj}^2} \\
\textbf{end}
\end{array}}$$

V tomto algoritme $\sum_{j=0}^{-1}() = 0$ a $h^{00} = \sqrt{a_{00}}$.

LU Preconditioning

- Zalozene na LU rozklade matice A:

for $k = 2, \ldots, n$
    for $k = 1, \ldots, i - 1$
        $a_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$
        for $j = k + 1, \ldots, n$
            $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} * a_{k,j}$
        end
    end
end

Incomplete LU Preconditioning

- Zalozene na LU rozklade riedkej matice A:

```
for k = 2, ..., n
    for k = 1, ..., i − 1 a if(i, k) ∈ nnz(A)
        a_ik = a_ik / a_kk
        for j = k + 1, ..., n a if(i, k) ∈ nnz(A)
            a_ij = a_ij − a_ik ∗ a_k,j
        end
    end
end
```

Metóda združených gradientov.
Conjugate Gradient method.

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- Pôvodná verzia algoritmu CG ktorá funguje pre *SPD* maticu A

$$p^{(0)} = r^{(0)} = b - Ax^{(0)} \tag{32}$$

pre $i = 1, 2, \ldots..$ platia nasledujúce vzťahy

$$\begin{aligned}
\alpha_{i-1} &= \frac{(r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(Ap^{(i-1)}, p^{(i-1)})}, && (33)\\
x^{(i)} &= x^{(i-1)} + \alpha_{i-1} p^{(i-1)}, && (34)\\
r^{(i)} &= r^{(i-1)} - \alpha_{i-1} A p^{(i-1)}, && (35)\\
\beta_{i-1} &= \frac{(r^{(i)}, r^{(i)})}{(r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}, && (36)\\
p^{(i)} &= r^{(i)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}, && (37)
\end{aligned}$$

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- Ak je M k dispozícii vo forme napr. Choleského faktorizácie

$$M = LL^T \tag{38}$$

- potom jednoduchým spôsobom, ako zachovať symetriu, je použiť "rozdelenie" predkontácie (3), čím získame symetrickú pozitívne definitnú maticu,

$$L^{-1}AL^{-T}u = L^{-1}b, \quad x = L^{-T}u. \tag{39}$$

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- Nie je však potrebné, pre SDP maticu, rozdeliť predmienenie týmto spôsobom, aby sa zachovala symetria. Pre M-skalárny súčin je $M^{-1}A$ je samoadjungovaný

$$
\begin{aligned}
(x,y)_M = (Mx,y) &= (x,My) && (40)\\
(M^{-1}Ax,y)_M = (Ax,y) &= (x,Ay) = (x,M(M^{-1}A)y) = (x,M^{-1}Ay)_M && (41)
\end{aligned}
$$

- Preto je možné nahradiť euklidovský skalárny súčin za konjugovaný M skalárny súčinom.

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- CG prepíše pre tento nový skalarny súčin. Pre jednoduchosť zápisu označíme pôvodné rezíduum $r^{(j)} = b - Ax^{(j)}$ a predpormienené reziduum $z^{(j)} = M^{-1}r^{(j)}$ získame nasledujúcu postupnosť operácií

$$
\begin{aligned}
\alpha_{i-1} &= \frac{(z^{(i-1)}, z^{(i-1)})_M}{(M^{-1}Ap^{(i-1)}, p^{(i-1)})_M}, &(42)\\
x^{(i)} &= x^{(i-1)} + \alpha_{i-1}p^{(i-1)}, &(43)\\
r^{(i)} &= r^{(i-1)} - \alpha_{i-1}Ap^{(i-1)},\ z^{(j)} = M^{-1}r^{(j)}, &(44)\\
\beta_{i-1} &= \frac{(z^{(i)}, z^{(i)})_M}{(z^{(i-1)}, z^{(i-1)})_M}, &(45)\\
p^{(i)} &= z^{(i)} + \beta_{i-1}p^{(i-1)}, &(46)
\end{aligned}
$$

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- Predpodmienenu verziu CG môžeme potom zapísať

$$r^{(0)} = b - Ax^{(0)},\ z^{(0)} = M^{-1}r^{(0)},\ p^{(0)} = z^{(0)} \tag{47}$$

pre $i = 1, 2, \ldots..$ platia nasledujúce vzťahy

$$\alpha_{i-1} = \frac{(r^{(i-1)}, z^{(i-1)})}{(Ap^{(i-1)}, p^{(i-1)})}, \tag{48}$$

$$x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_{i-1}p^{(i-1)}, \tag{49}$$

$$r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_{i-1}Ap^{(i-1)}, \tag{50}$$

$$z^{(i)} = M^{-1}r^{(i)}, \tag{51}$$

$$\beta_{i-1} = \frac{(r^{(i)}, z^{(i)})}{(r^{(i-1)}, z^{(i-1)})}, \tag{52}$$

$$p^{(i)} = z^{(i)} + \beta_{i-1}p^{(i-1)}, \tag{53}$$

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- V pripade praveho predpodmienenia AM^{-1} prepíšeme CG podľa (2)

$$
\begin{aligned}
\alpha_{i-1} &= \frac{(r^{(i-1)}, r^{(i-1)})_{M^{-1}}}{(AM^{-1}p^{(i-1)}, p^{(i-1)})_{M^{-1}}}, && (54)\\
u^{(i)} &= u^{(i-1)} + \alpha_{i-1} p^{(i-1)}, && (55)\\
r^{(i)} &= r^{(i-1)} - \alpha_{i-1} A p^{(i-1)}, && (56)\\
\beta_{i-1} &= \frac{(r^{(i)}, r^{(i)})_{M^{-1}}}{(r^{(i-1)}, r^{(i-1)})_{M^{-1}}}, && (57)\\
p^{(i)} &= r^{(i)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}, && (58)
\end{aligned}
$$

kde $x = M^{-1}u$.

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- Vektor u ale nie je nikde potrebný preto vieme prepísať $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_{i-1} M^{-1} p^{(i-1)}$.
- Nahradime $q^{(i)} = M^{-1} p^{(i)}$ a $z^{(i)} = M^{-1} r^{(i)}$.

$$\alpha_{i-1} = \frac{(z^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(Aq^{(i-1)}, q^{(i-1)})}, \tag{59}$$

$$x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_{i-1} q^{(i-1)}, \tag{60}$$

$$r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_{i-1} A q^{(i-1)}, \; z^{(i)} = M^{-1} r^{(i)}, \tag{61}$$

$$\beta_{i-1} = \frac{(z^{(i)}, r^{(i)})}{(z^{(i-1)}, r^{(i-1)})}, \tag{62}$$

$$q^{(i)} = z^{(i)} + \beta_{i-1} q^{(i-1)}, \tag{63}$$

- Ľavo predpodmienený CG algoritmus s M-skalárnym súčinom je matematicky ekvivalentný v pravo predpodmienenemu algoritmu CG s M^{-1}-skalárnym súčinom.

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- V prípade rozdeleného predpodmienenia môžeme napísať

$$\hat{p}^{(i)} = L^T p^{(i)}, \tag{64}$$

$$u^{(i)} = L^T x^{(i)}, \tag{65}$$

$$\hat{r}^{(i)} = L^T z^{(i)} = L^{-1} r^{(i)}, \tag{66}$$

$$\hat{A} = L^{-1} A L^{-T}. \tag{67}$$

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- Kroky CG algoritmu, ktoré riešia $\hat{A}u = L^{-1}b$, vieme pre nove premenne napísať

$$\alpha_{i-1} = \frac{(\hat{r}^{(i-1)}, \hat{r}^{(i-1)})}{(\hat{A}\hat{p}^{(i-1)}, \hat{p}^{(i-1)})}, \tag{68}$$

$$u^{(i)} = u^{(i-1)} + \alpha_{i-1}\hat{p}^{(i-1)}, \tag{69}$$

$$\hat{r}^{(i)} = \hat{r}^{(i-1)} - \alpha_{i-1}\hat{A}\hat{p}^{(i-1)}, \tag{70}$$

$$\beta_{i-1} = \frac{(\hat{r}^{(i)}, \hat{r}^{(i)})}{(\hat{r}^{(i-1)}, \hat{r}^{(i-1)})}, \tag{71}$$

$$\hat{p}^{(i)} = \hat{r}^{(i)} + \beta_{i-1}\hat{p}^{(i-1)}, \tag{72}$$

kde $u = L^T x$.

Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

- Rozdelene predpodmienenu verziu CG môžeme potom zapísať

$$r^{(0)} = b - Ax^{(0)},\ \hat{r}^{(0)} = L^{-1} r^{(0)},\ p^{(0)} = L^{-T} \hat{r}^{(0)} \tag{73}$$

pre $i = 1, 2, \ldots..$ platia nasledujúce vzťahy

$$\alpha_{i-1} = \frac{(\hat{r}^{(i-1)}, \hat{r}^{(i-1)})}{(Ap^{(i-1)}, p^{(i-1)})}, \tag{74}$$

$$x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_{i-1} p^{(i-1)}, \tag{75}$$

$$\hat{r}^{(i)} = \hat{r}^{(i-1)} - \alpha_{i-1} L^{-1} A p^{(i-1)}, \tag{76}$$

$$\beta_{i-1} = \frac{(\hat{r}^{(i)}, \hat{r}^{(i)})}{(\hat{r}^{(i-1)}, \hat{r}^{(i-1)})}, \tag{77}$$

$$p^{(i)} = L^{-T} \hat{r}^{(i)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}, \tag{78}$$