

Metody numeryczne

Metody iteracyjne

Algebraiczna metoda gradientów sprzężonych

P. F. Góra

https://zfs.fais.uj.edu.pl/pawel_gora

31 października 2023

Metody iteracyjne

Rozwiązanie układu równań liniowych, uzyskane za pomocą którejś z dotąd poznanych metod, byłoby dokładne (ściśle), gdyby nie błędy zaokrąglania (które, dodajmy, dla układów źle uwarunkowanych mogą być *znaczne*). Dlatego metody te nazywa się *metodami dokładnymi*.

W metodach iteracyjnych rozwiązanie dokładne otrzymuje się, teoretycznie, w granicy nieskończenie wielu kroków — w praktyce liczymy na to, że po skończonej (i niewielkiej) liczbie kroków zbliżymy się do wyniku ścisłego w granicach błędu zaokrąglania.

Metod iteracyjnych używa się *najczęściej*, choć nie wyłącznie, gdy zastosowanie faktoryzacji prowadziło do **wypełnienia** macierzy rzadkiej.

Rozpatrzmy układ równań:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \quad (1a)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \quad (1b)$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \quad (1c)$$

Przepiszmy ten układ w postaci

$$x_1 = (b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3)/a_{11} \quad (2a)$$

$$x_2 = (b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3)/a_{22} \quad (2b)$$

$$x_3 = (b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2)/a_{33} \quad (2c)$$

Gdyby po prawej stronie (2) były “stare” elementy x_j , a po lewej “nowe”, dostalibyśmy metodę iteracyjną

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii} \quad (3)$$

Górny indeks $x^{(k)}$ oznacza, że jest to przybliżenie w k -tym kroku. Jest to tak zwana **metoda Jacobiego**.

Zauważmy, że w metodzie (3) nie wykorzystuje się najnowszych przybliżeń: Powiedzmy, obliczając $x_2^{(k+1)}$ korzystamy z $x_1^{(k)}$, mimo iż znane jest już wówczas $x_1^{(k+1)}$. **Za to metodę tę łatwo można zrównoleglić.** Sugeruje to następujące ulepszenie:

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii} \quad (4)$$

Jest to tak zwana **metoda Gaussa-Seidela**.

Jeżeli macierz $A = \{a_{ij}\}$ jest rzadka, obie te metody iteracyjne będą efektywne *tylko i wyłącznie* wówczas, gdy we wzorach (3), (4) uwzględnimy ich strukturę, to jest uniknie redundantnych mnożeń przez zera.

Powtórzmy: Dla numerycznej efektywności metod iteracyjnych jest **nie-słychanie** ważne, aby metodę zaprogramować w ten sposób, aby uwzględnić strukturę macierzy rzadkiej.

Przykład: Niech macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ma strukturę

$$\begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \dots \\ \bullet & \bullet & & & & \\ \bullet & & \bullet & & & \\ \bullet & & & \bullet & & \\ \bullet & & & & \bullet & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (5)$$

Taka macierz jest rzadka, ma tylko $\sim 3N$ niezerowych elementów, domyślamy się więc, że układ równań z taką macierzą można rozwiązać w czasie liniowym. Zakładając, że macierz ta jest symetryczna i dodatnio określona, można by próbować zastosować do niej faktoryzację Cholesky'ego. Prowadziłoby to jednak do **wypełnienia** i okazałoby się, że cały algorytm “zyskałby” złożoność $O(N^3)$.

Metoda Gaussa-Seidela dla macierzy o strukturze (5) ma postać

$$\begin{aligned}x_1^{(k+1)} &= \left(b_1 - \sum_{j=2}^N a_{1j} x_j^{(k)} \right) / a_{11} \\x_2^{(k+1)} &= \left(b_2 - a_{21} x_1^{(k+1)} \right) / a_{22} \\x_3^{(k+1)} &= \left(b_3 - a_{31} x_1^{(k+1)} \right) / a_{33}\end{aligned} \tag{6}$$

.....

$$x_N^{(k+1)} = \left(b_N - a_{N1} x_1^{(k+1)} \right) / a_{NN}$$

Widać, że jeden krok (*sweep*) algorytmu (6) odbywa się w czasie proporcjonalnym do N .

Trochę teorii

Metody Jacobiego i Gaussa-Seidela należą do ogólnej kategorii

$$\mathbf{M}\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{N}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b} \quad (7)$$

gdzie $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ jest *podziałem (splitting)* macierzy. Dla metody Jacobiego $\mathbf{M} = \mathbf{D}$ (część diagonalna), $\mathbf{N} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})$ (części pod- i ponad-diagonalne, bez przekątnej). Dla metody Gaussa-Seidela $\mathbf{M} = \mathbf{D} + \mathbf{L}$, $\mathbf{N} = -\mathbf{U}$. Rozwiązanie równania $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ jest punktem stałym iteracji (7).

Twierdzenie 1. *Iteracja (7) jest zbieżna jeśli $\det M \neq 0$ oraz $\rho(M^{-1}N) < 1$, gdzie $\rho(\bullet)$ oznacza promień spektralny macierzy..*

Dowód. Przy tych założeniach iteracja (7) jest odwzorowaniem zwężającym. □

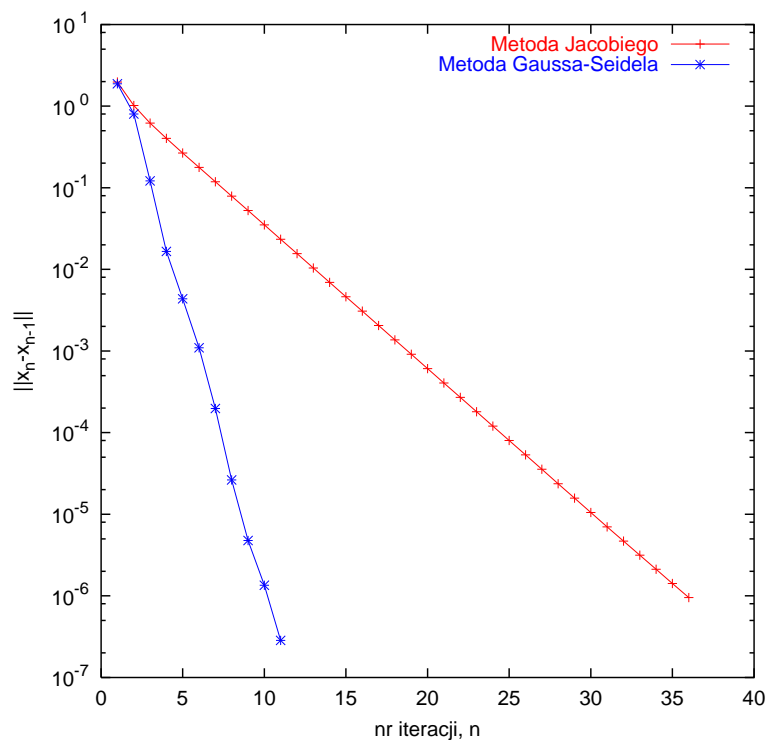
Twierdzenie 2. *Metoda Jacobiego jest zbieżna, jeśli macierz A jest silnie diagonalnie dominująca, to znaczy jeśli wartości bezwzględne elementów na głównej przekątnej są większe od sumy wartości bezwzględnych pozostałych elementów w danym wierszu.*

Twierdzenie 3. *Metoda Gaussa-Seidela jest zbieżna, jeśli macierz A jest symetryczna i dodatnio określona.*

Przykład

Rozwiązujemy układ równań:

$$\begin{array}{rrcrcl} 3x & + & y & + & z & = & 1 \\ x & + & 3y & + & z & = & 1 \\ x & + & y & + & 3z & = & 1 \end{array}$$



Inny przykład

Dla macierzy o wymiarach 128×128

$$\begin{bmatrix} 128 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 2 & & & & \\ 1 & & 2 & & & \\ 1 & & & 2 & & \\ \vdots & & & & \ddots & \\ 1 & & & & & 2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

(niezaznaczone elementy są zerami)

zbieżność z dokładnością do 10^{-12} w metodzie Gaussa-Seidela, według algorytmu (6), uzyskuje się w ~ 42 iteracjach.

Metoda gradientów sprzężonych — motywacja

Rozważmy funkcję $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c, \quad (9)$$

gdzie $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$, $c \in \mathbb{R}$, $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$ jest *symetryczna i dodatnio określona*. Przy tych założeniach, funkcja (9) ma dokładnie jedno minimum, będące zarazem minimum globalnym. Szukanie minimów dodatnio określonych form kwadratowych jest (względnie) łatwe i z praktycznego punktu widzenia ważne. Minimum to leży w punkcie spełniającym

$$\nabla f = 0. \quad (10)$$

Obliczmy

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f}{\partial x_i} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j,k} A_{jk} x_j x_k - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j b_j x_j + \underbrace{\frac{\partial c}{\partial x_i}}_0 \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{j,k} A_{jk} \left(\underbrace{\frac{\partial x_j}{\partial x_i}}_{\delta_{ij}} x_k + x_j \underbrace{\frac{\partial x_k}{\partial x_i}}_{\delta_{ik}} \right) - \sum_j b_j \underbrace{\frac{\partial x_j}{\partial x_i}}_{\delta_{ij}} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_k A_{ik} x_k + \frac{1}{2} \sum_j A_{ji} x_j - b_i = \frac{1}{2} \sum_k A_{ik} x_k + \frac{1}{2} \sum_j A_{ij} x_j - b_i \\
 &= (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})_i .
 \end{aligned} \tag{11}$$

Widzimy zatem, że funkcja (9) osiąga minimum w punkcie, w którym zachodzi

$$\mathbf{Ax} - \mathbf{b} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{Ax} = \mathbf{b}. \quad (12)$$

Rozwiązywanie układu równań liniowych (12) z macierzą symetryczną, dodatnio określoną jest równoważne poszukiwaniu minimum dodatnio określonej formy kwadratowej.

Przypuśćmy, że macierz \mathbf{A} jest przy tym *rzadka* i duża (lub co najmniej średnio-duża). Wówczas metoda gradientów sprzężonych jest godną uwagi metodą rozwiązywania (12)

Metoda gradientów sprzężonych, *Conjugate Gradients*, CG

$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ symetryczna, dodatnio określona, \mathbf{x}_1 — początkowe przybliżenie rozwiązania równania (12), $0 < \varepsilon \ll 1$.

$$\begin{aligned} & \mathbf{r}_1 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1 = \mathbf{r}_1 \\ & \textbf{while } \|\mathbf{r}_k\| > \varepsilon \\ & \quad \alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k} \\ & \quad \mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k \\ & \quad \beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k} \\ & \quad \mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \\ & \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \\ & \textbf{end} \end{aligned} \tag{13}$$

Wówczas zachodzą twierdzenia:

Twierdzenie 4. *Ciągi wektorów $\{\mathbf{r}_k\}$, $\{\mathbf{p}_k\}$ spełniają następujące zależności:*

$$\mathbf{r}_i^T \mathbf{r}_j = 0, \quad i > j, \quad (14a)$$

$$\mathbf{r}_i^T \mathbf{p}_j = 0, \quad i > j, \quad (14b)$$

$$\mathbf{p}_i^T \mathbf{A} \mathbf{p}_j = 0, \quad i > j. \quad (14c)$$

Twierdzenie 5. *Jeżeli $\mathbf{r}_M = 0$, to \mathbf{x}_M jest ścisłym rozwiązaniem równania (12).*

Dowód. Oba (sic!) dowody przebiegają indukcyjnie. □

Ciąg $\{x_k\}$ jest w gruncie rzeczy “pomocniczy”, nie bierze udziału w iteracjach, służy tylko do konstruowania kolejnych przybliżeń rozwiązania.

Istotą algorytmu jest konstruowanie dwu ciągów wektorów spełniających zależności (14). Wektory $\{r_k\}$ są wzajemnie prostopadłe, a zatem *w arytmetyce dokładnej* $r_{N+1} = 0$, wobec czego x_{N+1} jest poszukiwanym ścisłym rozwiązaniem.

Zauważmy, że ponieważ A jest symetryczna, dodatnio określona, warunek (14c) oznacza, że wektory $\{p_k\}$ są wzajemnie prostopadłe w metryce zadanej przez A . Ten właśnie warunek nazywa się warunkiem *sprzężenia względem A* , co daje nazwę całej metodzie.

Ten wariant metody gradientów sprzężonych nazywamy “algebraicznym”, gdyż przy założeniu, że *znamy* macierz A oraz wektor x_1 , możemy skonstruować ciągi $\{r_k, p_k, x_k\}$ metodami algebraicznymi.

W przyszłości poznamy wariant metody gradientów sprzężonych, w którym wszystkich kroków nie uda się w ten sposób wykonać.

Koszt metody

W arytmetyce dokładnej metoda zbiega się po N krokach, zatem jej koszt wynosi $O(N \cdot \text{koszt_jednego_kroku})$. Koszt jednego kroku zdominowany jest przez obliczanie iloczynu $A p_k$. Jeśli macierz A jest pełna, jest to $O(N^2)$, a zatem całkowity koszt wynosi $O(N^3)$, czyli tyle, ile dla metod dokładnych. Jeżeli jednak A jest rzadka, koszt obliczania iloczynu jest mniejszy, o ile obliczenie to jest odpowiednio zaprogramowane. Jeśli A jest pasmowa o szerokości pasma $M \ll N$, całkowity koszt wynosi $O(M \cdot N^2)$.

Przykład

Dla macierzy o wymiarach 128×128

$$\begin{bmatrix} 128 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 2 & & & & \\ 1 & & 2 & & & \\ 1 & & & 2 & & \\ \vdots & & & & \ddots & \\ 1 & & & & & 2 \end{bmatrix} \quad (15)$$

(niezaznaczone elementy są zerami)

zbieżność z dokładnością do 10^{-12} w algebraicznej metodzie gradientów sprzężonych uzyskuje się po 4 (*sic!*) iteracjach (w metodzie Gaussa-Seidela były to 42 iteracje; w obu wypadkach znacznie poniżej rozmiaru macierzy).

Problem!

W arytmetyce o skończonej dokładności kolejne generowane wektory nie są *ściśle* ortogonalne do swoich poprzedników — na skutek akumulującego się błędu zaokrąglenia rzut na poprzednie wektory może stać się z czasem znaczny. Powoduje to istotne spowolnienie metody.

Twierdzenie 6. *Jeżeli \mathbf{x} jest ścisłym rozwiązaniem równania (12), \mathbf{x}_k są generowane w metodzie gradientów sprzężonych, zachodzi*

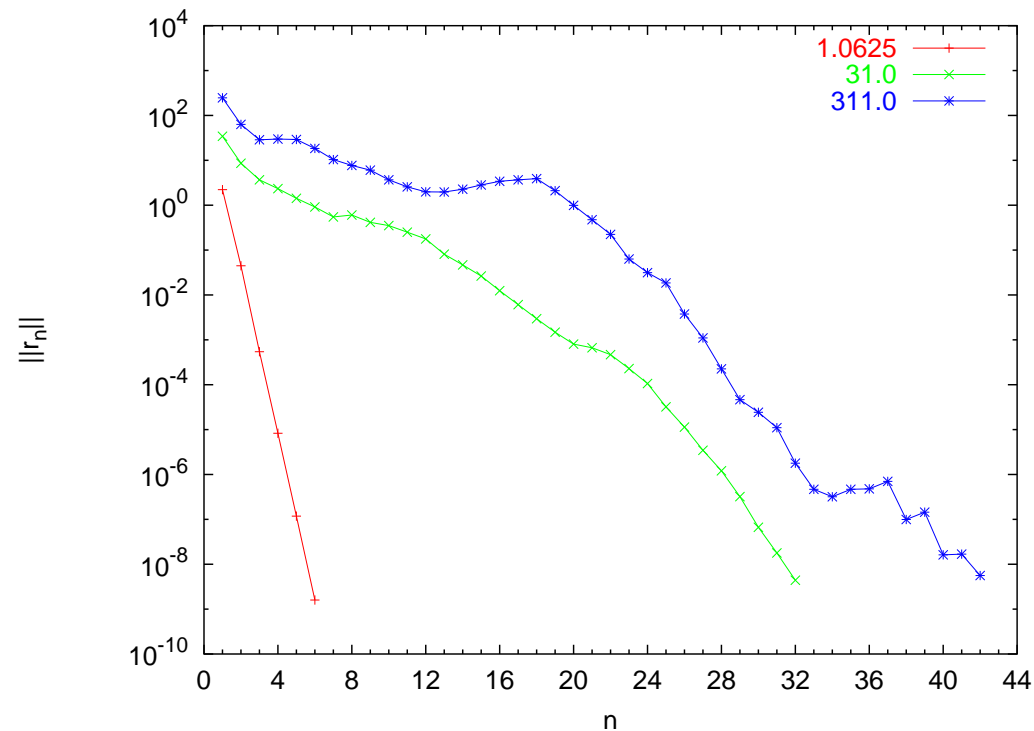
$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\| \leq 2\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1\| \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^{k-1}, \quad (16)$$

gdzie κ jest współczynnikiem uwarunkowania macierzy \mathbf{A} .

Jeżeli $\kappa \gg 1$, zbieżność może być bardzo wolna.

Przykład

Rozwiązujemy układy równań z *małymi* (32×32) macierzami symetrycznymi, rzeczywistymi, dodatnio określonymi, o różnych współczynnikach uwarunkowania. Poniższy rysunek pokazuje normy kolejnych wektorów \mathbf{r}_n . Iteracje zatrzymywano, gdy $\|\mathbf{r}_n\| \leq 10^{-8}$. W arytmetyce dokładnej $\|\mathbf{r}_{n>32}\| \equiv 0$.



“Prewarunkowana” (*preconditioned*) metoda gradientów sprzężonych

Spróbujemy przyspieszyć zbieżność odpowiednio modyfikując równanie (12) i algorytm (13), jednak tak, aby

- nie zmienić rozwiązania,
- macierz zmodyfikowanego układu pozostała symetryczna i dodatnio określona, aby można było zastosować metodę gradientów sprzężonych,
- macierz zmodyfikowanego układu pozostała rzadka, aby jeden krok iteracji był numerycznie tani,
- macierz zmodyfikowanego układu miała niski współczynnik uwarunkowania.

Czy to się w ogóle da zrobić? [Okazuje się, że tak!](#)

Postępujemy następująco: Niech $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ będzie odwracalną macierzą symetryczną, rzeczywistą, dodatnio określoną. Wówczas $\widetilde{\mathbf{A}} = \mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{C}^{-1}$ też jest symetryczna, rzeczywista, dodatnio określona.

$$\mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} \underbrace{\mathbf{C}^{-1} \mathbf{C}}_{\mathbf{I}} \mathbf{x} = \mathbf{C}^{-1} \mathbf{b}, \quad (17a)$$

$$\widetilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}, \quad (17b)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{C} \mathbf{x}$, $\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{C}^{-1} \mathbf{b}$. Do równania (17b) stosujemy teraz metodę gradientów sprzężonych.

W każdym kroku iteracji musimy obliczyć (tylde, bo odnosi się to do “tyldowanego” układu (17b))

$$\alpha_k = \frac{\tilde{\mathbf{r}}_k^T \tilde{\mathbf{r}}_k}{\tilde{\mathbf{p}}_k^T \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{p}}_k} = \frac{\tilde{\mathbf{r}}_k^T \tilde{\mathbf{r}}_k}{\tilde{\mathbf{p}}_k^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{C}^{-1} \tilde{\mathbf{p}}_k}, \quad (18a)$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_{k+1} = \tilde{\mathbf{r}}_k - \alpha_k \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{p}}_k = \tilde{\mathbf{r}}_k - \alpha_k \mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{C}^{-1} \tilde{\mathbf{p}}_k, \quad (18b)$$

$$\beta_k = \frac{\tilde{\mathbf{r}}_{k+1}^T \tilde{\mathbf{r}}_{k+1}}{\tilde{\mathbf{r}}_k^T \tilde{\mathbf{r}}_k}, \quad (18c)$$

$$\tilde{\mathbf{p}}_{k+1} = \tilde{\mathbf{r}}_{k+1} + \beta_k \tilde{\mathbf{p}}_k, \quad (18d)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_{k+1} = \tilde{\mathbf{x}}_k + \alpha_k \tilde{\mathbf{p}}_k. \quad (18e)$$

Równania (18) zawierają jawne odniesienia do macierzy C^{-1} , co nie jest zbyt wygodne. Łatwo się przekonać, iż za pomocą prostych przekształceń macierz tę można „usunąć”, tak, iż pozostaje tylko jedno jej nietrywialne wystąpienie. Zdefiniujmy mianowicie

$$\tilde{\mathbf{r}}_k = C^{-1}\mathbf{r}_k, \quad \tilde{\mathbf{p}}_k = C\mathbf{p}_k, \quad \tilde{\mathbf{x}}_k = C\mathbf{x}_k. \quad (19)$$

W tej sytuacji $\tilde{\mathbf{r}}_k^T \tilde{\mathbf{r}}_k = (C^{-1}\mathbf{r}_k)^T C^{-1}\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_k^T (C^{-1})^T C^{-1}\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_k^T C^{-1} C^{-1}\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_k^T (C^{-1})^2 \mathbf{r}_k$ etc.

Wówczas równania (18) przechodzą w

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T (\mathbf{C}^{-1})^2 \mathbf{r}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k}, \quad (20a)$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k, \quad (20b)$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T (\mathbf{C}^{-1})^2 \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T (\mathbf{C}^{-1})^2 \mathbf{r}_k}, \quad (20c)$$

$$\mathbf{p}_{k+1} = (\mathbf{C}^{-1})^2 \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k, \quad (20d)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k. \quad (20e)$$

W powyższych równaniach rola macierzy C sprowadza się do obliczenia — *jeden raz w każdym kroku iteracji* — wyrażenia $(C^{-1})^2 r_k$, co, jak wiadomo, robi się rozwiązując odpowiedni układ równań. Zdefiniujmy

$$M = C^2. \quad (21)$$

Macierz M należy rzecz jasna dobrać tak, aby równanie $Mz = r$ można było szybko rozwiązać.

Ostatecznie otrzymujemy następujący algorytm:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_1 \\ \text{rozwiąż } \mathbf{M}\mathbf{z}_1 &= \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{p}_1 &= \mathbf{z}_1 \\ \text{while } \|\mathbf{r}_k\| &> \varepsilon \\ \alpha_k &= \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{z}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k} \\ \mathbf{r}_{k+1} &= \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k \\ \text{rozwiąż } \mathbf{M}\mathbf{z}_{k+1} &= \mathbf{r}_{k+1} \\ \beta_k &= \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{z}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{z}_k} \\ \mathbf{p}_{k+1} &= \mathbf{z}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \\ \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \\ \text{end} \end{aligned} \tag{22}$$

Incomplete Cholesky preconditioner

Niech rozkład QR macierzy C ma postać $C = QH^T$, gdzie Q jest macierzą ortogonalną, H^T jest macierzą trójkątną górną. Zauważmy, że

$$M = C^2 = C^T C = (QH^T)^T QH^T = HQ^T QH^T = HH^T, \quad (23)$$

a więc macierz H jest czynnikiem Cholesky'ego macierzy M . Niech rozkład Cholesky'ego macierzy A ma postać $A = GG^T$. *Przypuśćmy, iż $H \simeq G$.*

Wówczas

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathbf{A}} &= \mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{C}^{-1} = (\mathbf{C}^T)^{-1} \mathbf{A} \mathbf{C}^{-1} = \left((\mathbf{Q} \mathbf{H}^T)^T \right)^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{Q} \mathbf{H}^T)^{-1} = \\ &= (\mathbf{H} \mathbf{Q}^T)^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{H}^T)^{-1} \mathbf{Q}^T = \underbrace{\mathbf{Q} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{G}}_{\simeq \mathbb{I}} \underbrace{\mathbf{G}^T (\mathbf{H}^T)^{-1}}_{\simeq \mathbb{I}} \mathbf{Q}^T \simeq \mathbf{Q} \mathbf{Q}^T = \mathbb{I}.\end{aligned}\tag{24}$$

Ponieważ $\widetilde{\mathbf{A}} \simeq \mathbb{I}$, współczynnik uwarunkowania tej macierzy powinien być bliski jedności.

W tym momencie mamy spełnione następujące warunki zadane na stronie 23:

- Macierz $\widetilde{\mathbf{A}}$ jest symetryczna i dodatnio określona;
- Rozwiązania się nie zmieniły, gdyż algorytm (22) jest *formalnie* równoważny algorytmowi (13);
- Mamy nadzieję (☺), że macierz $\widetilde{\mathbf{A}}$ jest dobrze uwarunkowana, gdyż $\widetilde{\mathbf{A}} \simeq \mathbf{I}$.

Pozostaje tylko zagwarantowanie, że jeżeli \mathbf{A} jest rzadka, to także czynnik Cholesky'ego macierzy $\mathbf{M} = \mathbf{H}\mathbf{H}^T$ jest rzadki.

Niepełny rozkład Cholesky'ego — algorytm w wersji *GAXPY*

```
for     $k = 1:N$ 
       $H_{kk} = A_{kk}$ 
      for     $j = 1:k-1$ 
             $H_{kk} = H_{kk} - H_{kj}^2$ 
      end
       $H_{kk} = \sqrt{H_{kk}}$ 
      for     $l = k+1:N$ 
             $H_{lk} = A_{lk}$ 
            if   $A_{lk} \neq 0$ 
                  for     $j = 1:k-1$ 
                         $H_{lk} = H_{lk} - H_{lj}H_{kj}$ 
                  end
                   $H_{lk} = H_{lk}/H_{kk}$ 
            endif
      end
end
```

Uwagi

- Ponieważ A jest rzadka, powyższy algorytm na obliczanie przybliżonego czynnika Cholesky'ego wykonuje się szybko. Wykonuje się go *tylko raz*.
- Równanie $Mz = r$ rozwiązuje się szybko, gdyż znamy czynnik Cholesky'ego $M = HH^T$.
- Obliczone H jest rzadkie, a zatem równanie $Mz = r$ rozwiązuje się szczególnie szybko.
- Mamy nadzieję, że macierz \tilde{A} ma współczynnik uwarunkowania bliski jedności, a zatem nie potrzeba wielu iteracji (22).

Przykład — macierz pasmowa z pustymi diagonalami

Rozważmy macierz o następującej strukturze:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & b_3 & 0 & c_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_2 & 0 & b_4 & 0 & c_6 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ b_3 & 0 & a_3 & 0 & b_5 & 0 & c_7 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & b_4 & 0 & a_4 & 0 & b_6 & 0 & c_8 & 0 & 0 & \dots \\ c_5 & 0 & b_5 & 0 & a_5 & 0 & b_7 & 0 & c_9 & 0 & \dots \\ 0 & c_6 & 0 & b_6 & 0 & a_6 & 0 & b_8 & 0 & c_{10} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (25)$$

Macierz ta jest symetryczna, zakładamy też, że jest dodatnio określona.

Niepełny czynnik Cholesky’ego macierzy (25) ma postać

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} p_1 & & & & & & \\ 0 & p_2 & & & & & \\ q_3 & 0 & p_3 & & & & \\ 0 & q_4 & 0 & p_4 & & & \\ r_5 & 0 & q_5 & 0 & p_5 & & \\ 0 & r_6 & 0 & q_6 & 0 & p_6 & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (26)$$

(W *pełnym* czynniku Cholesky’ego macierzy (25) zera leżące w (26) *po-między* diagonalą “*p*” a diagonalną “*r*” znikłyby — w ogólności mogłyby tam znajdować się jakieś niezerowe liczby.)

Zgodnie z podanym algorytmem, elementy ciągów $\{p_k\}$, $\{q_k\}$, $\{r_k\}$ wyliczamy z następujących wzorów:

$$\begin{array}{lll}
 p_1 & = & \sqrt{a_1}, \\
 q_3 & = & b_3/p_1, \\
 r_5 & = & c_5/p_1, \\
 p_3 & = & \sqrt{a_3 - q_3^2}, \\
 q_5 & = & (b_5 - r_5 q_3)/p_3, \\
 r_7 & = & c_7/p_3, \\
 p_5 & = & \sqrt{a_5 - q_5^2 - r_5^2}, \\
 q_7 & = & (b_7 - r_7 q_5)/p_5, \\
 r_9 & = & c_9/p_5, \\
 p_7 & = & \sqrt{a_7 - q_7^2 - r_7^2}, \\
 q_9 & = & (b_9 - r_9 q_7)/p_7, \\
 r_{11} & = & c_{11}/p_7, \\
 \dots & \dots & \dots
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{lll}
 p_2 & = & \sqrt{a_2}, \\
 q_4 & = & b_4/p_2, \\
 r_6 & = & c_6/p_2, \\
 p_4 & = & \sqrt{a_4 - q_4^2}, \\
 q_6 & = & (b_6 - r_6 q_4)/p_4, \\
 r_8 & = & c_8/p_4, \\
 p_6 & = & \sqrt{a_6 - q_6^2 - r_6^2}, \\
 q_8 & = & (b_8 - r_8 q_6)/p_6, \\
 r_{10} & = & c_{10}/p_6, \\
 p_8 & = & \sqrt{a_8 - q_8^2 - r_8^2}, \\
 q_{10} & = & (b_{10} - r_{10} q_8)/p_8, \\
 r_{12} & = & c_{12}/p_8, \\
 \dots & \dots & \dots
 \end{array}$$

Macierze niesymetryczne

Jeżeli w równaniu

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (27)$$

macierz \mathbf{A} nie jest symetryczna i dodatnio określona, sytuacja się komplikuje. Zakładając, że $\det \mathbf{A} \neq 0$, równanie (27) możemy “zsymetryzować” na dwa sposoby.

CGNR:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}, \quad (28)$$

lub CGNE:

$$\mathbf{AA}^T \mathbf{y} = \mathbf{b}, \quad (29a)$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}. \quad (29b)$$

Do dwu powyższych równań formalnie rzecz biorąc *można* używać metody gradientów sprzężonych. Trzeba jednak pamiętać, że nawet jeśli macierz \mathbf{A} jest rzadka, macierze $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ nie muszą być rzadkie, a co gorsza, ich współczynnik uwarunkowania jest kwadratem współczynnika uwarunkowania macierzy wyjściowej.

Alternatywnie, zamiast “symetryzować” macierz, można zmodyfikować algorytm, tak aby zamiast dwu, generował on *cztery* ciągi wektorów. Należy jednak pamiętać, że dla wielu typów macierzy taki algorytm bywa bardzo wolno zbieżny, a niekiedy nawet dochodzi do kompletnej stagnacji przed uzyskaniem rozwiązania:

Metoda gradientów bi-sprzężonych (*Bi-Conjugate Gradients*, Bi-CG)

$$\begin{aligned} & \mathbf{r}_1 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1 = \mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1 \neq 0 \text{ dowolny}, \bar{\mathbf{p}}_1 = \bar{\mathbf{r}}_1 \\ & \textbf{while } \|\mathbf{r}_k\| > \varepsilon \\ & \quad \alpha_k = \frac{\bar{\mathbf{r}}_k^T \mathbf{r}_k}{\bar{\mathbf{p}}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k} \\ & \quad \mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k \\ & \quad \bar{\mathbf{r}}_{k+1} = \bar{\mathbf{r}}_k - \alpha_k \mathbf{A}^T \bar{\mathbf{p}}_k \\ & \quad \beta_k = \frac{\bar{\mathbf{r}}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\bar{\mathbf{r}}_k^T \mathbf{r}_k} \\ & \quad \mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \\ & \quad \bar{\mathbf{p}}_{k+1} = \bar{\mathbf{r}}_{k+1} + \beta_k \bar{\mathbf{p}}_k \\ & \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \\ & \textbf{end} \end{aligned} \tag{30}$$

Wektory wygenerowane w algorytmie (30) spełniają następujące relacje:

$$\bar{\mathbf{r}}_i^T \mathbf{r}_j = \mathbf{r}_i^T \bar{\mathbf{r}}_j = 0, \quad i > j, \quad (31a)$$

$$\bar{\mathbf{r}}_i^T \mathbf{p}_j = \mathbf{r}_i^T \bar{\mathbf{p}}_j = 0, \quad i > j, \quad (31b)$$

$$\bar{\mathbf{p}}_i^T \mathbf{A} \mathbf{p}_j = \mathbf{p}_i^T \mathbf{A}^T \bar{\mathbf{p}}_j = 0, \quad i > j. \quad (31c)$$

Jeżeli w algorytmie (30) weźmiemy $\bar{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{A} \mathbf{r}_1$, we wszystkich krokach zachodzić będzie $\bar{\mathbf{r}}_k = \mathbf{A} \mathbf{r}_k$ oraz $\bar{\mathbf{p}}_k = \mathbf{A} \mathbf{p}_k$. Jest to wersja przydatna dla rozwiązywania układów równań z macierzami symetrycznymi, ale nieokreślonymi dodatnio. Jest to przy okazji szczególny wariant algorytmu GMRES (*generalised minimum residual*), formalnie odpowiadającego minimalizacji funkcjonału

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2. \quad (32)$$