1. Metoda konjugiranih gradijenata

1.1. Uvodno o minimizaciji

Neka je A (realna) **simetrična pozitivno definitna** matrica reda n. Linearni sustav $Ax = b$ za takvu matricu možemo riješiti minimizacijom funkcionala

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle r, A^{-1}r\rangle, \tag{1.1}$$

gdje je $r = Ax - b$ **rezidual**, a oznakama $\langle\ ,\ \rangle$ definiran je standardni skalarni produkt. Primijetite da i (1.1) definira novi skalarni produkt

$$[r, s] = \frac{1}{2}\langle r, A^{-1}s\rangle,$$

zbog pozitivne definitnosti i simetrije A^{-1}. Naime, ako je R faktor Choleskog matrice A, onda je

$$A = R^T R, \quad A^{-1} = R^{-1}R^{-T},$$

pa iz (1.1) izlazi

$$\frac{1}{2}\langle r, A^{-1}s\rangle = \frac{1}{2}\langle r, R^{-1}R^{-T}s\rangle = \frac{1}{2}\langle R^{-T}r, R^{-T}s\rangle,$$

pa se lako vidi da vrijede sva svojstva skalarnog produkta, pa je

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle R^{-T}r, R^{-T}r\rangle \geq 0,$$

a nulu u prethodnoj jednakosti dobivamo ako i samo ako je $R^{-T}r = 0$, odnosno ako je $r = 0$, što znači da je x rješenje linearnog sustava.

Raspišemo li (1.1) korištenjem standardnog skalarnog produkta, dobivamo

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2}\langle (Ax - b), A^{-1}(Ax - b)\rangle = \frac{1}{2}(Ax - b)^T A^{-1}(Ax - b) \\ &= \frac{1}{2}(x^T A - b^T)(x - A^{-1}b) = \frac{1}{2}(x^T Ax - b^T x - x^T b + b^T A^{-1}b) \\ &= \frac{1}{2}(x^T Ax - 2b^T x + b^T A^{-1}b). \end{aligned} \tag{1.2}$$

Uvrstimo li da je x rješenje linearnog sustava $x = A^{-1}b$, odmah vidimo da mora biti

$$f(A^{-1}b) = 0,$$

čime smo pokazali da je $f(x) = 0$ ako i samo ako je x rješenje sustava $Ax = b$. Gledamo li f kao funkciju od n varijabli, $x_1, \ldots, x_n$, onda je gradijent funkcije f u vektoru x jednak

$$g(x) := \mathrm{grad}(f(x)) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^T.$$

Gradijent g možemo izračunati skalarnim množenjem prethodne jednadžbe proizvoljnim vektorom d, $d \neq 0$. Usmjerenu derivaciju funkcije f u smjeru vektora d možemo izračunati na dva načina. Prema definiciji je

$$\langle g, d\rangle = \lim_{\tau\to 0} \frac{f(x+\tau d) - f(x)}{\tau}.$$

Iz (1.2) mukotrpnim sređivanjem izlazi da je

$$f(x+\tau d) - f(x) = \tau\langle r, d\rangle + \frac{1}{2}\tau^2\langle d, Ad\rangle. \tag{1.3}$$

Na limesu dobivamo

$$\lim_{\tau\to 0} \frac{f(x+\tau d) - f(x)}{\tau} = \lim_{\tau\to 0}\left(\langle r, d\rangle + \frac{1}{2}\tau\langle d, Ad\rangle\right) = \langle r, d\rangle.$$

Budući da prethodna formula vrijedi za svaki vektor d, onda iz

$$\langle g, d\rangle = \langle r, d\rangle,$$

slijedi da je $g = r$.

1.2. Uvodno o minimizaciji

Da bismo odredili x za koji f ima minimum, konstruirat ćemo iterativni proces, koji će u svakom koraku k konstruirati novi smjer pretraživanja d_k (vektor!). Taj smjer pretraživanja bit će **konjugirano ortogonalan** (tj. ortogonalan u smislu skalarnog produkta $[\ ,\ ]$) obzirom na sve prethodne smjerove pretraživanja.

U tom smjeru pretraživanja tražit ćemo minimum, tj. ako je u koraku k dan vektor x^k, izračunat ćemo $\tau = \tau_k$, tako da je

$$f(x^k + \tau d^k), \quad \tau \in \mathbb{R},$$

minimizirana za τ_k. Nova aproksimacija definira se kao

$$x^{k+1} = x^k + \tau_k d^k. \tag{1.4}$$

S r^k označimo rezidual u koraku k, $r^k = Ax^k - b$ i ako definiramo

$$h(\tau) = f(x^k + \tau d^k) - f(x^k),$$

onda, prema (1.3) slijedi da je

$$h(\tau) = f(x^k + \tau d^k) - f(x^k) = \tau\langle r^k, d^k\rangle + \frac{1}{2}\tau^2\langle d^k, Ad^k\rangle.$$

Deriviranjem tražimo lokalni ekstrem,

$$\langle r^k, d^k\rangle + \tau\langle d^k, Ad^k\rangle = 0, \tag{1.5}$$

pa je minimalna vrijednost za τ

$$\tau_k = -\frac{\langle r^k, d^k\rangle}{\langle d^k, Ad^k\rangle}. \tag{1.6}$$

Iz (1.4) onda slijedi da je

$$r^{k+1} = Ax^{k+1} - b = A(x^k + \tau_k d^k) - b = r^k + \tau_k Ad^k. \tag{1.7}$$

Pomnožimo li prethodnu jednadžbu skalarno s d^k, uvrstimo (1.6) i sjetimo se da je $\langle Ad^k, d^k\rangle = \langle d^k, Ad^k\rangle$ (jer je A simetrična), dobivamo

$$\begin{aligned}\langle r^{k+1}, d^k\rangle &= \langle r^k, d^k\rangle + \tau_k\langle Ad^k, d^k\rangle = \langle r^k, d^k\rangle - \frac{\langle r^k, d^k\rangle}{\langle Ad^k, d^k\rangle}\langle d^k, Ad^k\rangle \\ &= \langle r^k, d^k\rangle - \frac{\langle r^k, d^k\rangle}{\langle d^k, Ad^k\rangle}\langle d^k, Ad^k\rangle = 0,\end{aligned}$$

što znači da je rezidual, a onda i gradijent u k-tom koraku okomit na smjer pretraživanja.

U sljedećem koraku $k+1$, tražimo novi smjer pretraživanja, d^{k+1}, koji se računa tako da vrijedi

$$\langle d^{k+1}, Ad^j\rangle = 0, \quad j = 0, \ldots, k,$$

što znači da je novi smjer pretraživanja ortogonalan na prethodne smjerove pretraživanja, obzirom na skalarni produkt $\langle x, Ay\rangle$, i za takve vektore kažemo da su **konjugirano ortogonalni**.

Prethodno svojstvo može se ispuniti za smjerove pretraživanja, međutim, postoji vrlo važan, praktičan izbor takvih vektora.

1.3. Krylovljev potprostor smjerova pretraživanja

Neka je

$$V_k = \operatorname{span}\{d^0, d^1, \ldots, d^k\}$$

razapet konjugirano ortogonalnim vektorima $d^0, \ldots, d^k$. Pretpostavimo, također da vrijedi

$$\langle r^k, d^j\rangle = 0, \quad j = 0, \ldots, k-1, \quad k \geq 1. \tag{1.8}$$

Ako iskoristimo (1.7), dobivamo

$$\langle r^{k+1}, d^j\rangle = \langle r^k, d^j\rangle + \tau_k\langle Ad^k, d^j\rangle,$$

pa iz konjugirane ortogonalnosti i pretpostavke (1.8) slijedi da je

$$\langle r^{k+1}, d^j\rangle = 0, \quad j = 0, \ldots, k-1.$$

Za $j = k$ imamo, iz (1.5) izlazi da je također

$$\langle r^{k+1}, d^k\rangle = \langle r^k, d^k\rangle + \tau_k\langle Ad^k, d^k\rangle = 0.$$

Dakle,

$$\langle r^{k+1}, d^j \rangle = 0, \quad j = 0, \dots, k.$$

Indukcijom po k onda slijedi da kad su smjerovi pretraživanja konjugirano ortogonalni, onda je rezidual r^k (zapravo gradijent u koraku k) ortogonalan na sve prijašnje smjerove pretraživanja.

Još ćemo pokazati da to svojstvo povlači da metoda računa najbolju aproksimaciju rješenja

$$x^{k+1} = x^k + d,$$

po svim vektorima $d \in V_k$.

Jedino još treba naći način konstrukcije smjerova pretraživanja takvih da je svaki sljedeći smjer konjugirano ortogonalan na sve prethodne.

Definiramo

$$d^{k+1} = -r^{k+1} + \beta_k d^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \tag{1.9}$$

uz

$$d^0 = -r^0, \tag{1.10}$$

s tim da parametre β_k tek treba odrediti, tako da vrijede željena svojstva. Budući da d^{k+1} mora biti konjugirano ortogonalan na prethodni vektor, mora vrijediti

$$0 = \langle d^{k+1}, Ad^k \rangle = -\langle r^{k+1}, Ad^k \rangle + \beta_k \langle d^k, Ad^k \rangle,$$

odmah slijedi da je

$$\beta_k = \frac{\langle r^{k+1}, Ad^k \rangle}{\langle d^k, Ad^k \rangle}.$$

Nadalje, pokažimo da za taj izbor β_k je d^{k+1} konjugirano ortogonalan na sve prethodne vektore d^j, $j = 0 \dots, k-1$. Vrijedi

$$\langle d^{k+1}, Ad^j \rangle = -\langle r^{k+1}, Ad^j \rangle + \beta_k \langle d^k, Ad^j \rangle, \quad j = 0, \dots, k-1. \tag{1.11}$$

Primijetimo da je po konstrukciji posljednji član u prethodnoj formuli morao biti 0, jer je d^k bio konjugirano ortogonalan na sve prethodne d^j. Izbor $d^0 = -r^0$ omogućava alternativnu definiciju skupa V_k. Indukcijom u (1.9) izlazi da je svaki d^k linearna kombinacija $r_0, \dots, r^k$, dakle

$$V_k = \operatorname{span}\{r^0, r^1, \dots, r^k\}.$$

Iz (1.9) izlazi još jedno svojstvo, a to je da je $Ad^j \in V_{j+1}$. Iz (1.8) slijedi da ako je r^{k+1} okomit na sve vektore baze d^j prostora V_k, onda je ortogonalan i na njihove linearne kombinacije, na primjer na Ad^j za $j = 0, \dots, k-1$, pa imamo

$$\langle r^{k+1}, Ad^j \rangle = 0, \quad j = 0, \dots, k-1,$$

čime smo pokazali da vrijedi (1.11).

Dakle, možemo zaključiti da vrijedi prethodna relacija ne samo za $j = 0, \dots, k-1$, nego i za k (iz definicije β_k),

$$\langle d^{k+1}, Ad^j \rangle = -\langle r^{k+1}, Ad^j \rangle + \beta_k \langle d^k, Ad^j \rangle, \quad j = 0, \dots, k. \tag{1.12}$$

1.4. Kriterij zaustavljanja

Ako se u algoritmu bilo gdje dogodi da je $d^k = 0$, onda sigurno nije definiran β_k. Međutim, ako (1.9) napišemo u translatiranom indeksu

$$d^k = -r^k + \beta_{k-1} d^{k-1}, \tag{1.13}$$

skalarnim množenjem (1.13) s r^k dobivamo

$$\langle d^k, r^k \rangle = -\langle r^k, r^k \rangle + \beta_k \langle d^{k-1}, r^k \rangle.$$

Međutim, posljedni je član, zbog relacije ortogonalnosti reziduala i vektora d^j, $j = 0, \ldots, k$ jednak 0. Prema tome, izlazi

$$\langle d^k, r^k \rangle = -\langle r^k, r^k \rangle.$$

Posebno za $d^k = 0$ je $\langle r^k, r^k \rangle = 0$, tj. $r^k = 0$, što znači da je x^k pravo rješenje linearnog sustava.

Budući da su smjerovi pretraživanja konjugirano okomiti, u najviše n koraka (u egzaktoj aritmetici) naći ćemo rješenje sustava.

1.5. Algoritam

U algoritmu konjugiranih gradijenata moramo izračunati izraze τ_k i β_k, samo postoji mnogo različitih formula kako to možemo napraviti.

Budući vrijedi (1.13) i (1.7), tj. da je

$$d^k = -r^k + \beta_{k-1} d^{k-1}, \quad A d^k = \frac{1}{\tau_k}(r^{k+1} - r^k),$$

onda skalarnim množenjem s r^k prve jednadžbe (i korištenjem svojstva ortogonalnosti, dobivamo

$$\langle d^k, r^k \rangle = -\langle r^k, r^k \rangle + \beta_{k-1} \langle d^{k-1}, r^k \rangle = -\langle r^k, r^k \rangle.$$

Nadalje, iz druge jednakosti imamo

$$\langle r^{k+1}, A d^k \rangle = \frac{1}{\tau_k} \langle r^{k+1}, r^{k+1} - r^k \rangle = \frac{1}{\tau_k} \langle r^{k+1}, r^{k+1} \rangle$$

i

$$\tau_k \langle d^k, A d^k \rangle = \langle d^k, r^{k+1} - r^k \rangle = -\langle d^k, r^k \rangle = \langle r^k, r^k \rangle.$$

Dakle, formule za τ_k i β_k mogu se napisati i ovako:

$$\tau_k = \frac{\langle r^k, r^k \rangle}{\langle d^k, A d^k \rangle}, \quad \beta_k = \frac{\langle r^{k+1}, r^{k+1} \rangle}{\langle r^k, r^k \rangle},$$

s tima da skalarni produkt $\langle r^{k+1}, r^{k+1} \rangle$ možemo koristiti i kao formulu za zaustavljanje algoritma.

Algoritam 1: Metoda konjugiranih gradijenata

Opis: Na početku algoritma izaberemo startnu pretpostavku rješenja x^0 i računamo približno rješenje $\hat{x}$ na točnost ε.

`Konjugirani_gradijenti(`A, b, x_0, ε, $\hat{x}$`)`
begin
  $k = 0$
  $r^0 = Ax^0 - b$
  $d^0 = -r^0$
  repeat
    $\tau_k = \langle r^k, r^k \rangle / \langle d^k, Ad^k \rangle$
    $x^{k+1} = x^k + \tau_k d^k$
    $r^{k+1} = r^k + \tau_k Ad^k$
    $\beta_k = \langle r^{k+1}, r^{k+1} \rangle / \langle r^k, r^k \rangle$
    $d^{k+1} = -r^{k+1} + \beta_k d^k$
    $k = k + 1$
  until $\langle r^{k+1}, r^{k+1} \rangle \leq \varepsilon$
  $\hat{x} = x^{k+1}$
end
