Metoda konjugovaných gradientů pro řešení systému lineárních rovnic se symetrickou pozitivně definitní maticí

Úlohou je řešit $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$, kde **A** je symetrická pozitivně definitní matice, tj. symetrická matice definující pozitivně definitní kvadratickou formu a tedy $\left(\mathbf{A}\vec{x},\vec{x}\right) > 0$ pro $\forall\vec{x} \neq \vec{0}$

Nechť $\vec{\tilde{x}}$ je přesné řešení úlohy. Pak funkce $g\left(\vec{x}\right) = \left(\mathbf{A}\left(\vec{x}-\vec{\tilde{x}}\right),\vec{x}-\vec{\tilde{x}}\right)$ má minimum rovné 0 pro $\vec{x} = \vec{\tilde{x}}$

$$g\left(\vec{x}\right) = \left(\mathbf{A}\vec{x},\vec{x}\right) - \left(\mathbf{A}\vec{x},\vec{\tilde{x}}\right) - \left(\mathbf{A}\vec{\tilde{x}},\vec{x}\right) + \left(\mathbf{A}\vec{\tilde{x}},\vec{\tilde{x}}\right) = \left(\mathbf{A}\vec{x},\vec{x}\right) - \left(\vec{x},\mathbf{A}\vec{\tilde{x}}\right) -$$

$$-\left(\vec{b},\vec{x}\right) + \left(\vec{b},\vec{\tilde{x}}\right) = \left(\mathbf{A}\vec{x},\vec{x}\right) - 2\left(\vec{b},\vec{x}\right) + \left(\vec{b},\vec{\tilde{x}}\right)$$

Poslední člen je konstanta (byť neznámá) a proto ho lze vynechat.

Proto i funkce $f\left(\vec{x}\right) = \dfrac{1}{2}\left[\left(\mathbf{A}\vec{x},\vec{x}\right) - 2\left(\vec{b},\vec{x}\right)\right]$ má minimum pro $\vec{x} = \vec{\tilde{x}}$

Systém lineárních rovnic řešíme nalezením minima $f\left(\vec{x}\right)$ metodou konjugovaných gradientů

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{1}{2}\left[a_{ij}x_j + a_{ji}x_j - 2b_i\right] = a_{ij}x_j - b_i \text{ a tedy } \nabla f\Big|_{\vec{x}} = \mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}$$

Počáteční odhad je $\vec{x}_0$ a $\vec{h}_0 = \vec{g}_0 = -\nabla f\Big|_{\vec{x}_0} = \vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}_0$, při iteracích

$$\vec{g}_k = -\nabla f\Big|_{\vec{x}_k} = \vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}_k \quad \text{a} \quad \vec{h}_k = \vec{g}_k + \gamma_{k-1}\vec{h}_{k-1}\ , \quad \gamma_{k-1} = -\frac{\left(\vec{g}_k, \mathbf{A}\vec{h}_{k-1}\right)}{\left(\vec{h}_{k-1}, \mathbf{A}\vec{h}_{k-1}\right)}$$

Minimalizací ve směru $\vec{h}_k$ dostaneme $\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \alpha_k\vec{h}_k$, funkci vyjádříme

$$f\left(\vec{x}\right) = \frac{1}{2}\left[\left(\mathbf{A}\vec{x}_k, \vec{x}_k\right) + 2\alpha_k\left(\mathbf{A}\vec{x}_k, \vec{h}_k\right) + \alpha_k^2\left(\mathbf{A}h_k, \vec{h}_k\right) - 2\left(\vec{b}, \vec{x}_k\right) - 2\alpha_k\left(\vec{b}, \vec{h}_k\right)\right]$$

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha_k} = \alpha_k\left(\mathbf{A}h_k, \vec{h}_k\right) + \left(\mathbf{A}\vec{x}_k, \vec{h}_k\right) - \left(\vec{b}, \vec{h}_k\right) = 0 \text{ a tedy } \alpha_k = -\frac{\left(\mathbf{A}\vec{x}_k - \vec{b}, \vec{h}_k\right)}{\left(\mathbf{A}h_k, \vec{h}_k\right)}$$

a tak k nalezení minima ve směru - násobení vektoru maticí a skal.součin

Pro řídké matice je násobení vektoru maticí velmi rychlé (řádu N a ne N^2)