METODY ROZWIĄZYWANIA UKŁADÓW RÓWNAŃ
Metoda gradientów sprzężonych

Rozwiązanie układu równań jest równoważne minimalizacji funkcjonału kwadratowego:

$$F(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\, \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\, \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}$$

W metodzie gradientów sprzężonych Hestensa-Stiefela minimum funkcjonału jest wyznaczane iteracyjnie. W każdym kroku jest wyznaczany gradient funkcji :

$$\mathrm{grad}\, F(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{r}$$

który równy jest wektorowi residuów $\boldsymbol{r}$. Niech $\boldsymbol{x}^{(0)}$ oznacza wybrany wektor startowy. W celu osiągnięcia w kolejnym kroku $F(\boldsymbol{x}^{(1)}) < F(\boldsymbol{x}^{(0)})$ wyznaczany jest kierunek poszukiwań minimum przeciwny do kierunku gradientu:

$$\boldsymbol{p}^{(1)} = -\, \boldsymbol{r}^{(0)} = -\, \mathrm{grad}\, \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(0)}) = -(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{b})$$

Wychodząc z $\boldsymbol{x}^{(0)}$ poszukuje się w kierunku $\boldsymbol{p}^{(1)}$ minimum funkcji $F(\boldsymbol{x})$. Wprowadzenie parametru q_1 jako:

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + q_1\, \boldsymbol{p}^{(1)} \quad \text{prowadzi do warunku :}$$

$$F(\boldsymbol{x}^{(1)}) = 1/2\, (\boldsymbol{x}^{(0)} + q_1\, \boldsymbol{p}^{(1)})^{\mathrm{T}}\, \boldsymbol{A}\, (\boldsymbol{x}^{(0)} + q_1 \boldsymbol{p}^{(1)}) + \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\, (\boldsymbol{x}^{(0)} + q_1\, \boldsymbol{p}^{(1)}) =$$

$$= 1/2\, q_1^{\,2}\, \boldsymbol{p}^{(1)\mathrm{T}}\, \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{p}^{(1)} + q_1\, \boldsymbol{p}^{(1)\mathrm{T}}\, \boldsymbol{r}^{(0)} + F(\boldsymbol{x}^{(0)}) = \text{Minimum.}$$

Po obliczeniu pochodnej względem q_1 i przyrównaniu jej do zera otrzymuje się :

$$q_1 = -\frac{\boldsymbol{p}^{(1)\mathrm{T}}\ \boldsymbol{r}^{(0)}}{\boldsymbol{p}^{(1)\mathrm{T}} \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{p}^{(1)}} = \frac{\boldsymbol{r}^{(0)\mathrm{T}} \boldsymbol{r}^{(0)}}{\boldsymbol{p}^{(1)\mathrm{T}} \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{p}^{(1)}}$$

W drugim i kolejnych krokach jako kierunek poszukiwań $\boldsymbol{p}^{(k)}$ przyjmuje się kombinację liniową: $-\boldsymbol{r}^{(k-1)} = -\mathrm{grad}\, F(\boldsymbol{x}^{(k-1)}) = -(\boldsymbol{A}\, \boldsymbol{x}^{(k-1)} + \boldsymbol{b})$ oraz poprzedniego kierunku poszukiwań $\boldsymbol{p}^{(k-1)}$, tak, że obydwa kierunki $\boldsymbol{p}^{(k-1)}$ oraz $\boldsymbol{p}^{(k)}$ są sprzężone względem elipsoidy $F(\boldsymbol{x})$ = const. Oznacza to, że nowe minimum poszukiwane jest na płaszczyźnie równoległej do ostatnich dwóch kierunków i poprowadzonej przez punkt $\boldsymbol{x}^{(k-1)}$. Przecięcie tej płaszczyzny z elipsoidą $F(\boldsymbol{x}^{(k-1)})$ jest elipsą, dla której prosta $\boldsymbol{p}^{(k-1)}$ jest styczna w punkcie $\boldsymbol{x}^{(k-1)}$. Minimum funkcji $F(\boldsymbol{x})$ zakłada się w środku elipsy, a kierunek stycznej w punkcie $\boldsymbol{x}^{(k-1)}$ oraz od punktu styczności do środka elipsy są sprzężone względem tej elipsy, a jednocześnie względem elipsoidy.

k-ty kierunek poszukiwań jest wyznaczany z zależności:

$$\boldsymbol{p}^{(k)} = -\boldsymbol{r}^{(k-1)} + e_{k-1}\, \boldsymbol{p}^{(k-1)}, \quad \text{dla} \ \ k \geq 2.$$

Współczynnik e_{k-1} określa się na podstawie warunku sprzężenia kierunków $\boldsymbol{p}^{(k-1)}$ oraz $\boldsymbol{p}^{(k)}$, mianowicie :

$$\boldsymbol{p}^{(k)\mathrm{T}} \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{p}^{(k-1)} = 0$$

$$e_{k-1} = \frac{\boldsymbol{r}^{(k-1)\mathrm{T}} \boldsymbol{A}\ \boldsymbol{p}^{(k-1)}}{\boldsymbol{p}^{(k-1)\mathrm{T}} \boldsymbol{A}\ \boldsymbol{p}^{(k-1)}}\ , \quad k \geq 2.$$

Wyznaczony w ten sposób kierunek $\boldsymbol{p}^{(k)}$ umożliwia znalezienie nowego wektora przybliżonego:

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k-1)} + q_k\, \boldsymbol{p}^{(k)}\,,\ k \geq 2\,,$$

gdzie wartość q_k jest znajdowana analogicznie, jak poprzednio:

$$q_k = -\frac{\boldsymbol{p}^{(k)\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k-1)}}{\boldsymbol{p}^{(k)\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{p}^{(k)}} = \frac{\boldsymbol{r}^{(k-1)\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k-1)}}{\boldsymbol{p}^{(k)\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{p}^{(k)}}\ ,\quad k \geq 2\ .$$

Uwzględniając, że wektor residuów $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{b}$ ($k \geq 2$) jest ortogonalny do płaszczyzny rozpiętej na $\boldsymbol{r}^{(k-1)}$ oraz $\boldsymbol{p}^{(k)}$ dwie ostatnie formuły można przepisać następująco :

$$e_{k-1} = \frac{\boldsymbol{r}^{(k-1)\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k-1)}}{\boldsymbol{r}^{(k-2)\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k-2)}}\ ,\ q_k = \frac{\boldsymbol{r}^{(k-1)\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k-1)}}{\boldsymbol{p}^{(k)\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}}\ ,\quad k \geq 2\ .$$

gdzie wzór dla $\boldsymbol{q}_k$ obowiązuje również dla $k = 1$. Jak długo $\boldsymbol{r}^{(k-1)} \neq 0$, tzn. $\boldsymbol{x}^{(k-1)}$ nie jest rozwiązaniem układu równań, otrzymuje się (ze względu na to, że $\boldsymbol{A}$ jest dodatnio określona) dodatnie wartości e_{k-1} oraz q_k.

Algorytm :

1. Start : wybór $\boldsymbol{x}^{(0)}$

2. $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{b}$; $\boldsymbol{p}^{(1)} = -\boldsymbol{r}^{(0)}$

Powtarzające się kroki iteracji :

3. $$e_{k-1} = \frac{\boldsymbol{r}^{(k-1)\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k-1)}}{\boldsymbol{r}^{(k-2)\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k-2)}}$$

4. $\boldsymbol{p}^{(k)} = -\boldsymbol{r}^{(k-1)} + e_{k-1}\,\boldsymbol{p}^{(k-1)}$,

5. $$q_k = \frac{\boldsymbol{r}^{(k-1)\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k-1)}}{\boldsymbol{p}^{(k)\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}}$$

6. $\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k-1)} + q_k\,\boldsymbol{p}^{(k)}$

7. $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k-1)} + q_k\,(\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{p}^{(k)})$ (obl. rekursywne dla skrócenia czasu obliczeń):

   $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k-1)} + q_k\,\boldsymbol{p}^{(k)}) + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{r}^{(k-1)} + q_k(\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{p}^{(k)})$

8. sprawdzenie $\boldsymbol{r}^{(\mathrm{k})} \neq 0$, powrót do (3) lub koniec.

Nakład pracy na krok relaksacji $N_t = (Nband + 5) * ilość\_równań$.