

Posudek vedoucího na diplomovou práci

Veroniky Kalusové

s názvem **Chování metody sdružených gradientů v konečné aritmetice**

Shrnutí obsahu práce

Metoda sdružených gradientů (CG) je jedna z nejpoužívanějších metod pro řešení velkých řídkých soustav lineárních algebraických rovnic se symetrickou pozitivně definitní maticí. I proto je potřeba rozumět této metodě nejen po teoretické stránce, ale i z pohledu praktického počítání. Předložená diplomová práce se zabývá popisem a analýzou chování CG v prostředí konečné aritmetiky počítače.

V úvodní kapitole nás autorka seznamuje s teoretickými vlastnostmi CG a jejím matematickým popisem z různých matematických úhlů pohledu: z pohledu optimalizace (minimalizace kvadratického funkcionálu), z pohledu projektivních metod a z pohledu aproximace integrálu pomocí Gaussovy kvadratury. Ukazuje, že kromě klasické algoritmické verze existují i jiné algoritmické realizace (Rutishauser, Hagemann-Young) a dokazuje jejich matematickou ekvivalenci s původní verzí (Hestenes-Stiefel).

Po seznámení s teorií následuje druhá kapitola, ve které autorka popisuje a na experimentech demonstruje jevy, k nimž dochází vlivem konečné aritmetiky: ztráta ortogonalita, zpoždění konvergence, a dosažení hladiny limitní přesnosti (norma chyby dosáhne určité hladiny přesnosti a dále se již aproximace řešení k přesnému řešení nepřibližuje). Zkoumá třídu modelových matic (Strakošovy matice) v závislosti na parametrech, které ji charakterizují, a prezentuje zajímavé grafy, které mohou pomoci při výběru matic pro další numerické experimenty. Na třídě Strakošových matic demonstruje, že rozložení vlastních čísel může podstatně ovlivnit konvergenci CG. Kapitola je uzavřena numerickým srovnáním různých algoritmů realizujících metodu sdružených gradientů. Narozdíl od autorů Gutknecht-Strakoš, kteří ve svém článku z roku 2000 provádějí srovnání algoritmů z hlediska maximální dosažitelné limitní přesnosti, se autorka zaměřuje na otázku, proč Hestenes-Stiefelova verze konverguje v prostředí konečné aritmetiky rychleji, než je tomu u ostatních algoritmických realizací. Numericky ukazuje, že v Hestenes-Stiefelově verzi je lépe zachována A -ortogonalita chyby k předchozím směrovým vektorům, což dává intuitivní odpověď na položenou otázku.

Jádrem práce je třetí a čtvrtá kapitola, které se věnují poměrně komplikované otázce spojené s vytvářením matematického modelu výpočtů CG v konečné aritmetice. Třetí kapitola je postavena na výsledcích Greenbaum, která ukázala, že na výpočty CG v konečné aritmetice lze hledět jako na přesné výpočty CG aplikované na příbuzný (větší) systém se symetrickou pozitivně definitní maticí, jejíž všechna vlastní čísla leží ve shlucích kolem původních vlastních čísel. Konkrétněji, na základě dat spočtených v prvních k iteracích CG je možné sestavit (větší) systém lineárních rovnic s pozitivně definitní maticí takový, že přesná CG aplikovaná na tento větší systém dává v prvních k iteracích


stejné koeficienty a konvergenční charakteristiky (až na malou nepřesnost). Diplomantka naprogramovala v Matlabu konstrukci takového systému a prakticky ověřila platnost teorie Greenbaum. Navíc navrhla konstrukci nové matice, pomocí níž lze rovněž simulovat chování prvních k -kroků CG v konečné aritmetice. Konstrukce nové matice je jednodušší, ale bohužel, jak autorka numericky ověřila, vlastní čísla nové matice obecně neleží ve shlucích kolem původních vlastních čísel. To komplikuje využitelnost nové matice při další teoretické analýze chování CG v konečné aritmetice .

Zatímco ve třetí kapitole jde o aposteriorní konstrukci systému založenou na datech spočtených v prvních k iteracích CG, ve čtvrté kapitole se autorka pokouší o apriorní konstrukci systému, který by modeloval chování CG v konečné aritmetice (pro všechny iterace k). Autorka se seznámila s výsledky Greenbaum a Strakoše, kteří konstrukci takového modelového systému navrhli. Autorka naprogramovala a zopakovala jejich původní experiment a na základě svých experimentů z kapitoly 3 navrhla modifikaci jejich modelu v podobě jiného nastavení parametrů týkajících se pravé strany modelového systému. Tato modifikace přinesla v mnoha případech lepší podobnost mezi skutečnými výpočty CG v konečné aritmetice a přesnými výpočty CG aplikované na modelový systém.

Hodnocení práce

Diplomová práce je kvalitně zpracována po obsahové i formální stránce. I když bylo téma práce poměrně obtížné a náročné na sestudování mnoha pramenů literatury, autorka se tohoto problému zhostila s pílí, vytrvalostí a pečlivostí, vedoucí k zajímavým úvahám a experimentům. Při psaní práce se autorka sice nevyhnula některým formulačním nepřesnostem, nicméně v čase diplomové práce určeném nelze obecně očekávat naprosto přesné vyjadřování, kterému se odborníci v dané oblasti matematiky učí několik let. Práce splnila deklarované cíle. Doporučuji diplomovou práci k obhajobě a navrhuji hodnocení

výborně



V Praze, 1.6.2012

RNDr. Petr Tichý, Ph.D.

vedoucí diplomové práce