Cálculo Numérico / Métodos Numéricos

Sistemas lineares
Método dos Gradientes Conjugados

21 Nov 2008 . 15:31

Relembrando: método dos gradientes

Idéia básica. Para A simétrica > 0:

O vetor x que resolve $Ax=b$ é o mesmo vetor x que minimiza:

$$F(x) = \tfrac{1}{2}x^t A x - b^t x$$

Por que ?

Isso ocorre pois grad(F(x)) = 0 , condição necessária para mínimo implica $Ax=b$.

Além disso, Hessiana = $A > 0$

Como resolver Min $F(x) = \frac{1}{2}x^{t}Ax - b^{t}x$?

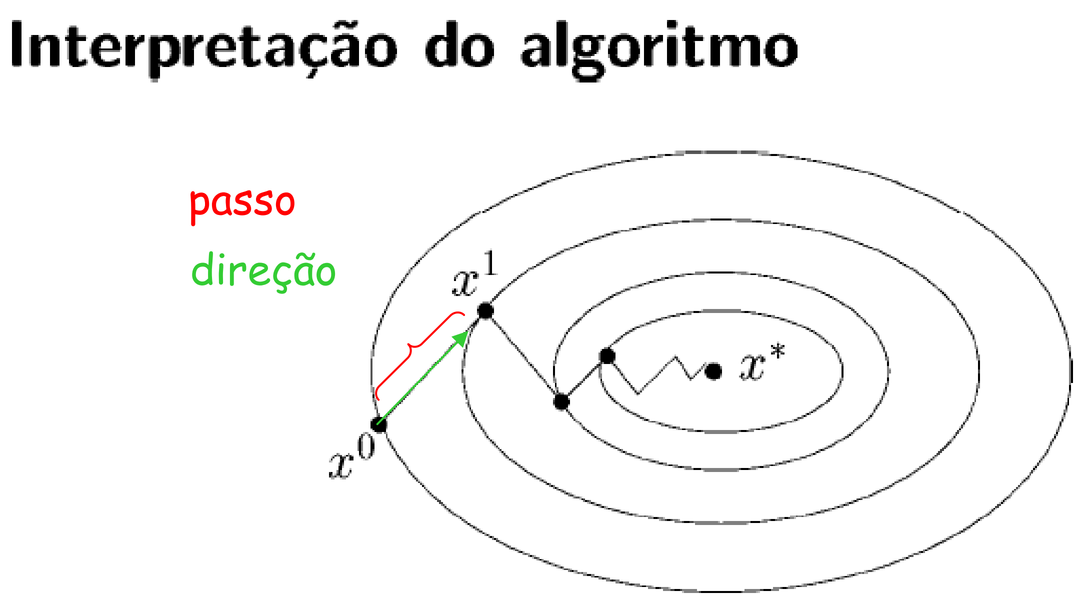
chutamos um valor inicial: x_0

andamos na direção de menor decrescimento naquele ponto: $-grad(F(x_0))$, ou seja:

$x_1 = x_0 - s \times grad(F(x_0))$

onde s é o valor do passo! (o quanto andamos nesta direção)

Interpretação gráfica



Adaptado de http://www.dt.fee.unicamp.br/~valente/ia543.html - Prof. Paulo Valente
FEEC - Unicamp

Como achamos o passo ?

Buscamos o s que minimiza $F(x + sr)$

- r é a direção oposta ao gradiente: $r = -grad(F) = b-Ax$
- s é o passo

Min $F(x + sr)$.

Isso ocorre quando $dF/ds = 0$.

Fazendo as contas:

$$s = \frac{r^T r}{r^T A r}$$

Método dos Gradientes - Algoritmo

- Dados A, b, max e Erro
- 1) $x^{(0)}=0$
- 2) $k = 0$
- 3) $r = b - Ax^{(k)}$
- 4) $s = r^T r / r^T A r$
- 5) $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s\, r$
- 6) Se $||x_{k+1}-x_k||_\infty / ||x_{k+1}||_\infty <$ Erro então faça solução $= x^{(k+1)}$ e PARE
- 7) $k = k+1$
- 8) Se $(k<max)$ então volte ao Passo 3.
- 9) Senão escreva que a solução $x^{(k+1)}$ e o erro. PARE.

Método dos Gradientes Conjugados

- **Definição 5.3** (Franco, 2007)
- Dada a aplicação linear A, positiva definida, x e y são direções conjugadas (A-ortogonais) se

$$(Ax,y) = (x,Ay) = 0.$$

i.e.

$$x^{t}Ay = y^{t}Ax = 0$$

Método dos Gradientes Conjugados

- Seja a matriz A simétrica ($A^T = A$) e definida positiva ($x^T A x > 0$, para $x \neq 0$). A base do método dos Gradientes Conjugados (CG) é a seguinte propriedade:

- **Propriedade (Cunha, 2000):** É possível escolher *n* direções linearmente independentes, $p_1, p_2, \ldots p_n$, e por meio da minimização da função $F(x^{(k)} + s_k p^{(k)})$, em cada uma das direções separadamente, construir uma seqüência de aproximações que forneça o mínimo da função $F(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ após *n* passos (*n* é o número de equações do sistema).

Idéia:

Se A é definida positiva e p_1, p_2... p_n são n direções A-ortogonais, então essas direções são LI.

A solução ótima pode ser escrita como combinação linear dessas n (dimensão de A) direções mais a direção b.

No algoritmo anterior, se a cada passos usarmos uma direção A-ortogonal, conseguiremos a solução em *n* passos.

Método dos Gradientes Conjugados

- Dada uma aproximação inicial $x^{(0)}$, escolhemos a primeira direção $p_0 = r_0 = -grad(F(x^{(0)}))$.

- As demais direções serão escolhidas de maneira que cada direção seja perpendicular à direção anterior.

- Além disso, fazemos com que cada direção seja uma combinação do resíduo anterior e da direção anterior:

$$p^{(k)} = \quad r^{(k-1)} + \alpha_{k-1} p^{(k-1)}, k = 2, 3, \ldots$$

coeficiente que será determinado de modo que p_k seja conjugada a p_{k-1}

Método dos Gradientes Conjugados

fazendo as direções conjugadas (obtendo α):

$$(p^{(k)}, Ap^{(k-1)}) = 0$$

$$\Rightarrow \quad (\; r^{(k-1)} + \alpha_{k-1} p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)}) = 0$$

$$\Rightarrow \quad (\; r^{(k-1)}, Ap^{(k-1)}) + \alpha_{k-1}(p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)}) = 0 \; .$$

$$\alpha_{k-1} = - \frac{(r^{(k-1)}, Ap^{(k-1)})}{(p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)})} \; , \; k = 2, 3, \ldots \; .$$

Método dos Gradientes Conjugados

- Passo:

$x_k = x_{k-1} + q_k p^k$

Obtemos como anteriormente: queremos o q_k que minimiza F.

$$Min_{q_k} \qquad F(x_{k-1} + q_k p_k)$$

$$Min_{q_k} \qquad \tfrac{1}{2}(x_{k-1} + q_k p_k)^t A(x_{k-1} + q_k p_k) - b^t(x_{k-1} + q_k p_k)$$

$$Min_{q_k} \qquad \tfrac{1}{2}x_{k-1}^t A x_{k-1} + \tfrac{1}{2}x_{k-1}^t A(q_k p_k) + \tfrac{1}{2}(q_k p_k)^t A x_{k-1} + \tfrac{1}{2}(q_k p_k)^t A(q_k p_k) - b^t x_{k-1} - b^t q_k p_k)$$

$$Min_{q_k} \qquad \frac{1}{2}x_{k-1}^t A x_{k-1} + \frac{1}{2}x_{k-1}^t A(q_k p_k) + \frac{1}{2}(q_k p_k)^t A x_{k-1} + \frac{1}{2}(q_k p_k)^t A(q_k p_k) - b^t x_{k-1} - b^t q_k p_k)$$

derivando em relação a q_k e igualando a zero:

$$\frac{1}{2}x_{k-1}^t A p_k + \frac{1}{2}(p_k)^t A x_{k-1} + \frac{1}{2}(p_k)^t A(q_k p_k) + \frac{1}{2}(q_k p_k)^t A(p_k) - b^t p_k = 0$$

$$\underline{(p_k)^t A x_{k-1}} + \underline{q_k p_k^t A p_k} - b^t p_k = 0$$

$$(p_k)^t A x_{k-1} + q_k p_k^t A p_k - b^t p_k = 0$$

$$(p_k)^t (A x_{k-1} - b) + q_k p_k^t A p_k = 0$$

$$-p_k^t r_{k-1} + q_k p_k^t A p_k = 0$$

$$\boxed{q_k = \frac{(r^{(k-1)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}}$$

Simplificações

iii) O resíduo em cada passo possui as seguintes propriedades:

1) é ortogonal ao resíduo do passo anterior, isto é:

$$(r^{(k)}, r^{(k-1)}) = 0 \ ,$$

2) é ortogonal à direção de relaxação do passo, isto é:

$$(r^{(k)}, p^{(k)}) = 0 \ ,$$

3) é ortogonal à direção de relaxação do passo anterior, isto é:

$$(r^{(k)}, p^{(k-1)}) = 0 \ .$$

Simplificações

Com isso, é possível simplificar as expressões de

q_k (o passo)
α_{k-1} (o multiplicador na expressão de $p^{(k)}$)

$$q_k = \frac{\left(r^{(k-1)}, r^{(k-1)}\right)}{\left(Ap^{(k)}, p^{(k)}\right)}$$

$$\alpha_{k-1} = \frac{\left(r^{(k-1)}, r^{(k-1)}\right)}{\left(r^{(k-2)}, r^{(k-2)}\right)}$$

Algoritmo

O primeiro passo é como no caso dos gradientes

a) $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$

$p^{(1)} = r^{(0)}$

$$q_1 = \frac{(r^{(0)}, r^{(0)})}{(Ar^{(0)}, r^{(0)})}$$

$x^{(1)} = x^{(0)} + q_1 p^{(1)}$

b) para $k \geq 2$

b.1) $$\alpha_{k-1} = \frac{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(r^{(k-2)}, r^{(k-2)})}$$

b.2) $p^{(k)} = r^{(k-1)} + \alpha_{k-1} p^{(k-1)}$

b.3) $$q_k = \frac{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

b.4) $x^{(k)} = x^{(k-1)} + q_k p^{(k)}$

critério de parada:

c) Se $\frac{||x^{(k+1)} - x^{(k)}||_\infty}{||x^{(k+1)}||_\infty} < \epsilon$, Fim

caso contrário b) .

Método dos GC - Exemplo

- Usando o método dos GC resolva o sistema dado por:

$$\begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 \\ 1 & 10 & 1 \\ 0 & 1 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 11 \\ 1 \end{pmatrix}$$

E faça duas iterações do método dos gradientes conjugados.

Exercício I:

- Use as propriedades:

$$(r^{(k)}, r^{(k-1)}) = 0 \qquad (r^{(k)}, p^{(k)}) = 0 \ , \qquad (r^{(k)}, p^{(k-1)}) = 0 \ .$$

- Para simplificar:

$$q_k = -\frac{(r^{(k-1)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})} \longrightarrow q_k = \frac{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

$$\alpha_{k-1} = \frac{(r^{(k-1)}, Ap^{(k-1)})}{(p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)})} \longrightarrow \alpha_{k-1} = \frac{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(r^{(k-2)}, r^{(k-2)})}$$

Exercício II

- Dado os sistemas lineares:

$$(I)\begin{cases} 9x_1 - x_2 = 7 \\ -x_1 + 9x_2 = 17 \end{cases} ; \quad (II)\begin{cases} 31x_1 + 29x_2 = 33 \\ 29x_1 + 31x_2 = 27 \end{cases}$$

a) construa funções quadráticas cujos mínimos sejam soluções dos sistemas.

b) resolva o sistema II pelo método dos gradientes

c) resolva o sistema II pelo método dos gradientes conjugados.