

Resumo: Método do Gradiente Conjugado

Prof. Doherty Andrade

[Ir para os exemplos do método](#)

Texto baseado em Burden & Faires.

O método do gradiente conjugado de Hestenes e Stiefel [HS] foi originalmente desenvolvido como um método direto criado para resolver um sistema linear definido positivo $n \times n$. Como um método direto, é geralmente inferior à eliminação de Gauss com pivotamento, já que ambos os métodos exigem n passos para determinar uma solução, e os passos do método do gradiente conjugado são computacionalmente mais caros que os da eliminação de Gauss.

Todavia, o método do gradiente conjugado é muito útil quando empregado como um método de aproximação iterativa para resolver grandes sistemas esparsos com elementos não nulos ocorrendo em padrões previsíveis. Esses problemas freqüentemente surgem na solução de problemas de contorno. Quando a matriz tiver sido pré-condicionada para tornar os cálculos mais eficientes, bons resultados são obtidos em cerca de apenas $\sqrt{n}$ passos. Empregado dessa maneira, o método é preferido ao da eliminação de Gauss e aos métodos iterativos anteriormente discutidos.

Magnus Hestenes (1906-1991) e Edward Stiefel publicaram o artigo original sobre o método do gradiente conjugado em 1952, enquanto trabalhavam no Instituto de Análise Numérica no campus da UCLA.

Nesta seção, supomos que a matriz A seja definida positiva. Utilizaremos a notação de produto interno.

$$\langle x, y \rangle = x' y, \tag{7.25}$$

em que x e y são vetores n dimensionais. Também precisaremos de resultados adicionais da álgebra linear.

O próximo resultado segue facilmente a partir das propriedades da transposta. (Veja o Exercício 12.)

Teorema 7.30

Para quaisquer vetores x, y e z e qualquer número real α , temos

(i) $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle;$

$$(ii) \langle \alpha x, y \rangle = \langle x, \alpha y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle;$$

$$(iii) \langle x + z, y \rangle = \langle x, y \rangle + \langle z, y \rangle;$$

$$(iv) \langle x, x \rangle \geq 0;$$

$$(v) \langle x, x \rangle = 0 \text{ se e somente se } x = 0.$$

Quando A for definida positiva, $\langle x, Ax \rangle = x'Ax > 0$ a menos que $x = 0$. Também, como A é simétrica, temos $x'Ay = x'A'y = (Ax)'y$, e assim, além dos resultados no Teorema 7.30, temos para cada x e y ,

$$\langle x, Ay \rangle = \langle Ax, y \rangle. \quad (7.26)$$

O resultado seguinte é uma ferramenta básica no desenvolvimento do método do gradiente conjugado.

Teorema 7.31

O vetor x^* é uma solução do sistema linear definido positivo $Ax = b$ se e somente se x^* minimiza

$$g(x) = \langle x, Ax \rangle - 2\langle x, b \rangle.$$

Demonstração Sejam x e $v \neq 0$ vetores fixos e t uma variável real. Temos

$$\begin{aligned} g(x + tv) &= \langle x + tv, Ax + tAv \rangle - 2\langle x + tv, b \rangle \\ &= \langle x, Ax \rangle + t\langle v, Ax \rangle + t\langle x, Av \rangle + t^2\langle v, Av \rangle - 2\langle x, b \rangle - 2t\langle v, b \rangle \\ &= \langle x, Ax \rangle - 2\langle x, b \rangle + 2t\langle v, Ax - b \rangle + t^2\langle v, Av \rangle, \end{aligned}$$

e assim,

$$g(x + tv) = g(x) + 2t\langle v, Ax - b \rangle + t^2\langle v, Av \rangle. \quad (7.27)$$

Como x e v são fixos, podemos definir a função quadrática h em t por meio de

$$h(t) = g(x + tv).$$

Então, h assume um valor mínimo quando $h'(t) = 0$, pois o seu coeficiente de t^2 , $\langle v, Av \rangle$, δ possui. Já que

$$h'(t) = 2\langle v, Ax - b \rangle + 2t\langle v, Av \rangle,$$

o mínimo ocorre quando

$$\hat{t} = -\frac{\langle v, Ax - b \rangle}{\langle v, Av \rangle} = \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle},$$

e, da Equação (7.27),

$$\begin{aligned} h(\hat{t}) &= g(x) - 2 \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle} \langle v, b - Ax \rangle + \left(\frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle} \right)^2 \langle v, Av \rangle \\ &= g(x) - \frac{\langle v, b - Ax \rangle^2}{\langle v, Av \rangle}. \end{aligned}$$

Assim, para qualquer vetor $v \neq 0$, temos $g(x + \hat{t}v) < g(x)$ a menos que $\langle v, b - Ax \rangle = 0$, caso no qual $g(x) = g(x + \hat{t}v)$. Esse é o resultado básico de que precisamos para demonstrar o Teorema 7.31.

Suponha que x^* satisfaça a $Ax^* = b$. Então, $\langle v, b - Ax^* \rangle = 0$ para qualquer vetor v , e $g(x)$ não pode se tornar menor que $g(x^*)$. Assim, x^* minimiza g .

Por outro lado, suponha que x^* seja um vetor que minimiza g . Então, para qualquer vetor v temos $g(x^* + \hat{t}v) \geq g(x^*)$. Assim, $\langle v, b - Ax^* \rangle = 0$. Isso implica que $b - Ax^* = 0$ e, conseqüentemente, que $Ax^* = b$.

Para começar o método do gradiente conjugado, escolhemos x , uma solução aproximada para $Ax^* = b$, e $v \neq 0$, o que fornece uma direção de busca para se afastar de x para melhorar a aproximação. Seja $r = b - Ax$ o vetor resíduo associado a x e

$$t = \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle} = \frac{\langle v, r \rangle}{\langle v, Av \rangle}.$$

Se $r \neq 0$ e se v e r não forem ortogonais, então $x + tv$ fornece um valor menor para g que $g(x)$ está presumivelmente mais próximo de x^* do que x . Isso sugere o método seguinte.

Seja $x^{(0)}$ uma aproximação inicial de x^* , e seja $v^{(1)} \neq 0$, um sentido inicial de busca. Para $k = 1, 2, 3, \dots$, calculamos

$$\begin{aligned} t_k &= \frac{\langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}, \\ x^{(k)} &= x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}. \end{aligned}$$

e escolhemos uma nova direção de busca $v^{(k+1)}$. O objetivo é fazer esta escolha de modo que a seqüência de aproximações $\{x^{(k)}\}$ convirja rapidamente para x^* .

Para escolher a direção de busca, consideramos g como uma função das componentes de $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Assim,

$$g(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle x, Ax \rangle - 2\langle x, b \rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j - 2 \sum_{i=1}^n x_i b_i.$$

Tornando a derivada parcial em relação às variáveis componentes x_k , temos

$$\frac{\partial g}{\partial x_k}(x) = 2 \sum_{i=1}^n a_{ij} x_i - 2b_k.$$

Assim, o gradiente de g é

$$\nabla g(x) = \left(\frac{\partial g}{\partial x_1}(x), \frac{\partial g}{\partial x_2}(x), \dots, \frac{\partial g}{\partial x_n}(x) \right)' = 2(Ax - b) = -2r,$$

em que o vetor r é o vetor resíduo para x .

Do cálculo de várias variáveis, sabemos que a direção de maior diminuição no valor de $g(x)$ é a direção dada por $-\nabla g(x)$; isto é, na direção do resíduo r . O método que escolhe

$$v^{(k+1)} = r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$$

é denominado o método do declive máximo. Embora venhamos a ver na Seção 10.4 que este método tem méritos para sistemas não-lineares e problemas de otimização, ele não é utilizado para sistemas lineares por causa de convergência lenta.

Uma abordagem alternativa usa um conjunto de vetores direção não nulos $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$ que satisfaçam a

$$\langle v^{(i)}, Av^{(j)} \rangle = 0 \quad \text{se } i \neq j.$$

Isso é chamado uma condição de A-ortogonalidade e diz-se que o conjunto de vetores $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$ é A-ortogonal. Não é difícil de mostrar que um conjunto de vetores A-ortogonais associados à matriz definida positiva A é linearmente independente. (Consultar o Exercício 13(a)). Esse conjunto de direções de busca dá

$$t_k = \frac{\langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} = \frac{\langle v^{(k)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}$$

e $x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}.$

O teorema seguinte mostra que esta escolha de direções de busca fornece convergência em, no máximo, n passos, de modo que, como um método direto, produz a solução exata, supondo que a aritmética seja exata.

Teorema 7.32

Seja $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$ um conjunto A-ortogonal de vetores não nulos associados à matriz definida positiva A , e seja $x^{(0)}$ arbitrário. Defina

$$t_k = \frac{\langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} \quad \text{e} \quad x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)},$$

para $k = 1, 2, \dots, n$. Então, supondo aritmética exata, $Ax^{(n)} = b$.

Demonstração Como, para cada $k = 1, 2, \dots, n$,

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)},$$

temos

$$\begin{aligned} Ax^{(n)} &= Ax^{(n-1)} + t_n Av^{(n)} \\ &= (Ax^{(n-2)} + t_{n-1} Av^{(n-1)}) + t_n Av^{(n)} \\ &= Ax^{(0)} + t_1 Av^{(1)} + t_2 Av^{(2)} + \dots + t_n Av^{(n)} \end{aligned}$$

e, subtraindo b deste resultado, vem

$$Ax^{(n)} - b = Ax^{(0)} - b + t_1 Av^{(1)} + t_2 Av^{(2)} + \dots + t_n Av^{(n)}$$

Agora, tomamos o produto interno de ambos os lados com o vetor $v^{(k)}$ e usamos as propriedades de produto interno e o fato de A ser simétrica para obter

$$\begin{aligned} \langle Ax^{(n)} - b, v^{(k)} \rangle &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + t_1 \langle Av^{(1)}, v^{(k)} \rangle + \dots + t_n \langle Av^{(n)}, v^{(k)} \rangle \\ &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + t_1 \langle v^{(1)}, Av^{(k)} \rangle + \dots + t_n \langle v^{(n)}, Av^{(k)} \rangle \end{aligned}$$

A propriedade de A -ortogonalidade dá, para cada k ,

$$\langle Ax^{(n)} - b, v^{(k)} \rangle = \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + t_k \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle \quad (7.28)$$

Todavia,

$$t_k = \frac{\langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}$$

de modo que,

$$\begin{aligned} t_k \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle &= \langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle \\ &= \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} + Ax^{(0)} - Ax^{(1)} + \dots - Ax^{(k-2)} + Ax^{(k-2)} - Ax^{(k-1)} \rangle \\ &= \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle + \langle v^{(k)}, Ax^{(0)} - Ax^{(1)} \rangle + \dots + \langle v^{(k)}, Ax^{(k-2)} - Ax^{(k-1)} \rangle \end{aligned}$$

Mas, para qualquer i ,

$$x^{(i)} = x^{(i-1)} + t_i v^{(i)} \quad \text{e} \quad Ax^{(i)} = Ax^{(i-1)} + t_i Av^{(i)}$$

e então,

$$Ax^{(i-1)} - Ax^{(i)} = -t_i Av^{(i)}$$

Assim,

$$t_k \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle = \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle - t_1 \langle v^{(k)}, Av^{(1)} \rangle - \dots - t_{k-1} \langle v^{(k)}, Av^{(k-1)} \rangle$$

Devido à A -ortogonalidade, $\langle v^{(k)}, Av^{(i)} \rangle = 0$, para $i \neq k$, de modo que

$$t_k \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle = \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle$$

Da Equação (7.28),

$$\begin{aligned} \langle Ax^{(n)} - b, v^{(k)} \rangle &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle \\ &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle \\ &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle - \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

O vetor $Ax^{(n)} - b$ é ortogonal ao conjunto de vetores A -ortogonais $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$. Disso, segue que $Ax^{(n)} - b = 0$. (Consulte o Exercício 13(b).)

Exemplo 1

Considere a matriz definida positiva

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

Seja $v^{(1)} = (1, 0, 0)^t$, $v^{(2)} = (-\frac{3}{4}, 1, 0)^t$ e $v^{(3)} = (-\frac{3}{7}, \frac{4}{7}, 1)^t$. Por cálculo direto,

$$\langle v^{(1)}, Av^{(2)} \rangle = v^{(1)} Av^{(2)} = (1, 0, 0) \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{3}{4} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0,$$

$$\langle v^{(1)}, Av^{(3)} \rangle = (1, 0, 0) \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{3}{7} \\ \frac{4}{7} \\ 1 \end{bmatrix} = 0,$$

e

$$\langle v^{(2)}, Av^{(3)} \rangle = \left(-\frac{3}{4}, 1, 0\right) \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{3}{7} \\ \frac{4}{7} \\ 1 \end{bmatrix} = 0.$$

Assim, $\{v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(3)}\}$ é um conjunto A -ortogonal.

O sistema linear

$$\begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 \\ 30 \\ -24 \end{bmatrix},$$

tem a solução exata $x^* = (3, 4, -5)^t$. Para obter uma aproximação desta solução, seja $x^{(0)} = (0, 0, 0)^t$.

Como $b = (24, 30, -24)^t$, temos

$$r^{(0)} = b - Ax^{(0)} = b = (24, 30, -24)^t,$$

de modo que

$$\langle v^{(1)}, r^{(0)} \rangle = v^{(1)} r^{(0)} = 24, \quad \langle v^{(1)}, Av^{(1)} \rangle = 4 \quad \text{e} \quad t_1 = \frac{24}{4} = 6.$$

Assim,

$$x^{(1)} = x^{(0)} + t_1 v^{(1)} = (0, 0, 0)^t + 6(1, 0, 0)^t = (6, 0, 0)^t.$$

Continuando, temos

$$\begin{aligned} r^{(1)} &= b - Ax^{(1)} = (0, 12, -24)^t; \\ t_2 &= \frac{\langle v^{(2)}, r^{(1)} \rangle}{\langle v^{(2)}, Av^{(2)} \rangle} = \frac{12}{7/4} = \frac{48}{7}; \\ x^{(2)} &= x^{(1)} + t_2 v^{(2)} = (6, 0, 0)^t + \frac{48}{7} \left(-\frac{3}{4}, 1, 0 \right)^t = \left(\frac{6}{7}, \frac{48}{7}, 0 \right)^t; \\ r^{(2)} &= b - Ax^{(2)} = \left(0, 0, -\frac{120}{7} \right)^t; \\ t_3 &= \frac{\langle v^{(3)}, r^{(2)} \rangle}{\langle v^{(3)}, Av^{(3)} \rangle} = \frac{-120/7}{24/7} = -5; \end{aligned}$$

e

$$x^{(3)} = x^{(2)} + t_3 v^{(3)} = \left(\frac{6}{7}, \frac{48}{7}, 0 \right)^t + (-5) \left(-\frac{3}{7}, \frac{4}{7}, 1 \right)^t = (3, 4, -5)^t.$$

Como aplicamos a técnica $n = 3$ vezes, esta será a solução real.

Exemplo 1 (continuação)

Considere a matriz definida positiva

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

Seja $v^{(1)} = (1, 0, 0)^t$, $v^{(2)} = \left(-\frac{3}{4}, 1, 0 \right)^t$ e $v^{(3)} = \left(-\frac{3}{7}, \frac{4}{7}, 1 \right)^t$. Por cálculo direto,

$$\langle v^{(1)}, Av^{(2)} \rangle = v^{(1)} Av^{(2)} = (1, 0, 0) \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{3}{4} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0,$$

$$\langle v^{(1)}, Av^{(3)} \rangle = (1, 0, 0) \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{3}{7} \\ \frac{4}{7} \\ 1 \end{bmatrix} = 0,$$

e

$$\langle v^{(2)}, Av^{(3)} \rangle = \left(-\frac{3}{4}, 1, 0\right) \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{3}{7} \\ \frac{4}{7} \\ 1 \end{bmatrix} = 0.$$

Assim, $\{v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(3)}\}$ é um conjunto A -ortogonal.

O sistema linear

$$\begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 \\ 30 \\ -24 \end{bmatrix},$$

tem a solução exata $x^* = (3, 4, -5)^t$. Para obter uma aproximação desta solução, seja $x^{(0)} = (0, 0, 0)^t$.

Como $b = (24, 30, -24)^t$, temos

$$r^{(0)} = b - Ax^{(0)} = b = (24, 30, -24)^t,$$

de modo que

$$\langle v^{(1)}, r^{(0)} \rangle = v^{(1)} r^{(0)} = 24, \quad \langle v^{(1)}, Av^{(1)} \rangle = 4 \quad \text{e} \quad t_1 = \frac{24}{4} = 6.$$

Assim,

$$x^{(1)} = x^{(0)} + t_1 v^{(1)} = (0, 0, 0)^t + 6(1, 0, 0)^t = (6, 0, 0)^t.$$

Continuando, temos

$$r^{(1)} = b - Ax^{(1)} = (0, 12, -24)^t;$$

$$t_2 = \frac{\langle v^{(2)}, r^{(1)} \rangle}{\langle v^{(2)}, Av^{(2)} \rangle} = \frac{12}{7/4} = \frac{48}{7};$$

$$x^{(2)} = x^{(1)} + t_2 v^{(2)} = (6, 0, 0)^t + \frac{48}{7} \left(-\frac{3}{4}, 1, 0\right)^t = \left(\frac{6}{7}, \frac{48}{7}, 0\right)^t;$$

$$r^{(2)} = b - Ax^{(2)} = \left(0, 0, -\frac{120}{7}\right)^t;$$

$$t_3 = \frac{\langle v^{(3)}, r^{(2)} \rangle}{\langle v^{(3)}, Av^{(3)} \rangle} = \frac{-120/7}{24/7} = -5;$$

e

$$x^{(3)} = x^{(2)} + t_3 v^{(3)} = \left(\frac{6}{7}, \frac{48}{7}, 0 \right)^t + (-5) \left(-\frac{3}{7}, \frac{4}{7}, 1 \right)^t = (3, 4, -5)^t.$$

Como aplicamos a técnica $n = 3$ vezes, esta será a solução real.

Antes de discutir como determinar o conjunto A-ortogonal, continuaremos o desenvolvimento. A utilização de um conjunto A-ortogonal $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$ de vetores direção fornece o que é denominado um método de direção conjugada. O teorema seguinte mostra a ortogonalidade dos vetores residuais $r^{(k)}$ e dos vetores direção $v^{(j)}$. Uma demonstração desse resultado, usando indução matemática, é considerada no Exercício 14.

Teorema 7.33

Os vetores residuais $r^{(k)}$, em que $k = 1, 2, \dots, n$, para um método de direção conjugada, satisfaz às equações

$$\langle r^{(k)}, v^{(j)} \rangle = 0, \quad \text{para cada } j = 1, 2, \dots, k.$$

O método do gradiente conjugado de Hestenes e Stiefel escolhe as direções de busca $\{v^{(k)}\}$ durante o processo iterativo, de modo que os vetores residuais $\{r^{(k)}\}$ sejam mutuamente ortogonais. Para construir os vetores direção $\{v^{(1)}, v^{(2)}, \dots\}$ e as aproximações $\{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots\}$, começamos com uma aproximação inicial $x^{(0)}$ e usamos a direção de máximo declive $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ como a primeira direção de busca $v^{(1)}$.

Suponha que as direções conjugadas $v^{(1)}, \dots, v^{(k-1)}$ e as aproximações $x^{(1)}, \dots, x^{(k-1)}$ foram calculadas com

$$x^{(i)} = x^{(i-1)} + t_i v^{(i)},$$

em que

$$\langle v^{(i)}, Av^{(j)} \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle r^{(i)}, r^{(j)} \rangle = 0 \quad \text{para } i \neq j.$$

Se $x^{(k-1)}$ é a solução para $Ax = b$, terminamos. Caso contrário, $r^{(k-1)} = b - Ax^{(k-1)} \neq 0$ e o Teorema 7.33 implica que $\langle r^{(k-1)}, v^{(i)} \rangle = 0$ para $i = 1, 2, \dots, k-1$. Então usamos $r^{(k-1)}$ para gerar $v^{(k)}$, fazendo

$$v^{(k)} = r^{(k-1)} + s_{k-1} v^{(k-1)}.$$

Escolheremos s_{k-1} de modo que

$$\langle v^{(k-1)}, Av^{(k)} \rangle = 0.$$

Como

$$Av^{(k)} = Ar^{(k-1)} + s_{k-1}Av^{(k-1)}$$

temos $\langle v^{(k-1)}, Av^{(k)} \rangle = 0$ quando

$$s_{k-1} = -\frac{\langle v^{(k-1)}, Ar^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k-1)}, Av^{(k-1)} \rangle}.$$

Também pode ser mostrado que com esta escolha de s_{k-1} temos $\langle v^{(i)}, Av^{(k)} \rangle = 0$, para cada $i = 1, \dots, k-2$ (consultar [Lu, pág. 245]). Assim, $\{v^{(1)}, \dots, v^{(k)}\}$ é um conjunto A-ortogonal.

$$\begin{aligned} t_k &= \frac{\langle v^{(k)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} = \frac{\langle r^{(k-1)} + s_{k-1}v^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} \\ &= \frac{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} + s_{k-1} \frac{\langle v^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}. \end{aligned}$$

Pelo Teorema 7.33, temos $\langle v^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle = 0$, e então

$$t_k = \frac{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}. \quad (7.29)$$

Assim,

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}.$$

Para calcular $r^{(k)}$, multiplicamos por A e subtraímos b para obter

$$Ax^{(k)} - b = Ax^{(k-1)} - b + t_k Av^{(k)} \quad \text{ou} \quad r^{(k)} = r^{(k-1)} - t_k Av^{(k)}.$$

Assim,

$$\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle = \langle r^{(k-1)}, r^{(k)} \rangle - t_k \langle Av^{(k)}, r^{(k)} \rangle = -t_k \langle r^{(k)}, Av^{(k)} \rangle.$$

E mais, da Equação (7.29),

$$\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle = t_k \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle,$$

de modo que

$$\begin{aligned} s_k &= -\frac{\langle v^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} = -\frac{\langle r^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} \\ &= \frac{(1/t_k) \langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{(1/t_k) \langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle} = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}. \end{aligned}$$

Em suma, temos as fórmulas:

$$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}; \quad v^{(1)} = r^{(0)};$$

e, para $k = 1, 2, \dots, n$,

$$\begin{cases} t_k = \frac{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}, \\ x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}, \\ r^{(k)} = r^{(k-1)} - t_k Av^{(k)}, \\ s_k = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}, \\ v^{(k+1)} = r^{(k)} + s_k v^{(k)}. \end{cases} \quad (7.30)$$

Em vez de apresentar um algoritmo para o método do gradiente conjugado usando essas fórmulas, estendemos o método para incluir pré-condicionamento.

Método do Gradiente Conjugado Précondicionado

Se a matriz for mal condicionada, o método do gradiente conjugado fica altamente suscetível a erros de arredondamento. Assim, embora a resposta exata devesse ser obtida em n passos, este não é normalmente o caso. Como um método direto, o método do gradiente conjugado não é tão bom quanto a eliminação de Gauss com pivotamento. O principal uso do método do gradiente conjugado é como um método iterativo aplicado a um sistema mais bem condicionado. Nesse caso, uma solução aproximada aceitável é freqüentemente obtida em cerca de $\sqrt{n}$ passos.

Para aplicar o método a um sistema mais bem condicionado, queremos escolher uma matriz condicionante não-singular C tal que

$$\hat{A} = C^{-1}A(C^{-1})^t$$

seja mais bem condicionada. Para simplificar a notação, utilizaremos a matriz C^{-t} para nos referir a $(C^{-1})^t$.

Considere o sistema linear

$$\hat{A}\hat{x} = \hat{b},$$

em que $\hat{x} = C^t x$ e $\hat{b} = C^{-1}b$. Então

$$\hat{A}\hat{x} = (C^{-1}AC^{-t})(C^t x) = C^{-1}Ax.$$

Assim, poderíamos resolver $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$ e então obter x multiplicando por C^{-t} . Todavia, em vez de reescrever a Equação (7.30) utilizando $\hat{r}^{(k)}$, $\hat{v}^{(k)}$, $\hat{t}_k$, $\hat{x}^{(k)}$ e $\hat{s}_k$, incorporamos implicitamente o pré-condicionamento.

Como

$$\hat{x}^{(k)} = C^t x^{(k)},$$

temos

$$\begin{aligned}\hat{r}^{(k)} &= \hat{b} - \hat{A}\hat{x}^{(k)} = C^{-1}b - (C^{-1}AC^{-t})C^t x^{(k)} \\ &= C^{-1}(b - Ax^{(k)}) = C^{-1}r^{(k)}.\end{aligned}$$

Sejam $\hat{v}^{(k)} = C^t v^{(k)}$ e $w^{(k)} = C^{-1}r^{(k)}$. Então

$$\hat{s}_k = \frac{\langle \hat{r}^{(k)}, \hat{r}^{(k)} \rangle}{\langle \hat{r}^{(k-1)}, \hat{r}^{(k-1)} \rangle} = \frac{\langle C^{-1}r^{(k)}, C^{-1}r^{(k)} \rangle}{\langle C^{-1}r^{(k-1)}, C^{-1}r^{(k-1)} \rangle},$$

de modo que

$$s_k = \frac{\langle w^{(k)}, w^{(k)} \rangle}{\langle w^{(k-1)}, w^{(k-1)} \rangle}. \quad (7.31)$$

Assim,

$$\begin{aligned}\hat{t}_k &= \frac{\langle \hat{r}^{(k-1)}, \hat{r}^{(k-1)} \rangle}{\langle \hat{v}^{(k)}, \hat{A}\hat{v}^{(k)} \rangle} = \frac{\langle C^{-1}r^{(k-1)}, C^{-1}r^{(k-1)} \rangle}{\langle C^t v^{(k)}, C^{-1}AC^{-t}C^t v^{(k)} \rangle} \\ &= \frac{\langle w^{(k-1)}, w^{(k-1)} \rangle}{\langle C^t v^{(k)}, C^{-1}Av^{(k)} \rangle}.\end{aligned}$$

e, já que

$$\begin{aligned}\langle C^t v^{(k)}, C^{-1}Av^{(k)} \rangle &= [C^t v^{(k)}]^t C^{-1}Av^{(k)} \\ &= [v^{(k)}]^t CC^{-1}Av^{(k)} = [v^{(k)}]^t Av^{(k)} = \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle,\end{aligned}$$

temos

$$t_k = \frac{\langle w^{(k-1)}, w^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}. \quad (7.32)$$

Prosseguindo,

$$\hat{x}^{(k)} = \hat{x}^{(k-1)} + \hat{t}_k \hat{v}^{(k)}, \quad \text{e assim,} \quad C^t x^{(k)} = C^t x^{(k-1)} + t_k C^t v^{(k)}$$

e

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}. \quad (7.33)$$

Continuando,

$$\hat{r}^{(k)} = \hat{r}^{(k-1)} - \hat{t}_k \hat{A}\hat{v}^{(k)},$$

de modo que

$$\begin{aligned} C^{-1}\mathbf{r}^{(k)} &= C^{-1}\mathbf{r}^{(k-1)} - t_k C^{-1}AC^{-t}\hat{\mathbf{v}}^{(k)}, \\ \mathbf{r}^{(k)} &= \mathbf{r}^{(k-1)} - t_k AC^{-t}C^t\mathbf{v}^{(k)}, \end{aligned}$$

e

$$\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k-1)} - t_k A\mathbf{v}^{(k)}. \quad (7.34)$$

Finalmente,

$$\hat{\mathbf{v}}^{(k+1)} = \hat{\mathbf{r}}^{(k)} + \hat{\mathbf{s}}_k \hat{\mathbf{v}}^{(k)}, \quad \text{e} \quad C^t\mathbf{v}^{(k+1)} = C^{-1}\mathbf{r}^{(k)} + \mathbf{s}_k C^t\mathbf{v}^{(k)},$$

e então,

$$\mathbf{v}^{(k+1)} = C^{-t}C^{-1}\mathbf{r}^{(k)} + \mathbf{s}_k\mathbf{v}^{(k)} = C^{-t}\mathbf{w}^{(k)} + \mathbf{s}_k\mathbf{v}^{(k)}. \quad (7.35)$$

O método do gradiente conjugado pré-condicionado baseia-se na utilização das Equações (7.31) a (7.35) na ordem (7.32), (7.33), (7.34), (7.31), (7.35). O Algoritmo 7.5 implementa esse procedimento.

O pré-condicionamento substitui um sistema dado por outro tendo as mesmas soluções, porém com melhores características de convergência.

Algoritmo 7.5

Método do Gradiente Conjugado Pré-Condicionado

Para resolver $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, dada a matriz de pré-condicionamento C^{-1} e uma aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)}$.

ENTRADA o número de equações e incógnitas n ; os elementos a_{ij} , $1 \leq i, j \leq n$ da matriz A ; as componentes b_j , $1 \leq j \leq n$ do vetor $\mathbf{b}$; os elementos y_{ij} , $1 \leq i, j \leq n$ da matriz de pré-condicionamento C^{-1} , as componentes x_i , $1 \leq i \leq n$ da aproximação inicial $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(0)}$, o número máximo de iterações N ; tolerância TOL .

SAÍDA a solução aproximada $x_1, \dots, x_n$ e o resíduo $r_1, \dots, r_n$ ou uma mensagem de que o número máximo de iterações foi excedido.

Passo 1 Faça $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$;

$\mathbf{w} = C^{-1}\mathbf{r}$; (Calcula $\mathbf{r}^{(0)}$)

$\mathbf{v} = C^{-t}\mathbf{w}$; (Observação: $\mathbf{w} = \mathbf{w}^{(0)}$)

$\alpha = \sum_{j=1}^n w_j^2$.

Passo 2 Faça $k = 1$.

Passo 3 Enquanto ($k \leq N$) execute Passos 4 a 7.

Passo 4 Se $\|\mathbf{w}\| < TOL$, então

SAÍDA ('Vetor solução'; $x_1, \dots, x_n$);

SAÍDA ('com resíduo'; $r_1, \dots, r_n$);

(O procedimento foi bem-sucedido.)

PARE.

Passo 5 Faça $u = Av$; (*Observação: $u = Av^{(k)}$*)

$$t = \frac{\alpha}{\sum_{j=1}^n v_j u_j}; \text{ (*Observação: } t = t_k \text{) } }*$$

$$x = x + tv; \text{ (*Observação: } x = x^{(k)} \text{) } }*$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r} - tu; \text{ (*Observação: } \mathbf{r} = \mathbf{r}^{(k)} \text{) } }*$$

$$w = C^{-1}\mathbf{r}; \text{ (*Observação: } w = w^{(k)} \text{) } }*$$

$$\beta = \sum_{j=1}^n w_j^2. \text{ (*Observação: } \beta = \langle w^{(k)}, w^{(k)} \rangle \text{) } }*$$

Passo 6 Se $|\beta| < TOL$ então

Se $\|\mathbf{r}\| < TOL$ então

SAÍDA ('Vetor solução'; $x_1, \dots, x_n$);

SAÍDA ('com resíduo'; $r_1, \dots, r_n$);

(O procedimento foi bem-sucedido.)

PARE.

Passo 7 Faça $s = \beta/\alpha$;

$$(s = s_k)$$

$$v = C^{-t}w + sv;$$

$$\text{(*Observação: } v = v^{(k+1)} \text{) } }*$$

$$\alpha = \beta; \text{ (*Atualiza } \alpha \text{.) } }*$$

$$k = k + 1.$$

Passo 8 Se $(k > n)$ então

SAÍDA ('O número máximo de iterações foi excedido.');

(O procedimento não foi bem-sucedido.)

PARE.

O próximo exemplo ilustra os cálculos em um problema simples.

Exemplo 2

O sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ dado por

$$\begin{aligned} 4x_1 + 3x_2 &= 24, \\ 3x_1 + 4x_2 - x_3 &= 30, \\ -x_2 + 4x_3 &= -24 \end{aligned}$$

tem solução (3, 4, -5) e foi considerado no Exemplo 3 da Seção 7.3. Naquele exemplo, tanto o método de Gauss-Seidel quanto o método SRS foram utilizados. Usaremos o método do gradiente

conjugado sem nenhum pré-condicionamento, de modo que $C = C^{-1} = I$. Seja $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0, 0)^t$.

Então

$$\begin{aligned}\mathbf{r}^{(0)} &= \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{b} = (24, 30, -24)^t; \\ w &= C^{-1}\mathbf{r}^{(0)} = (24, 30, -24)^t; \\ v^{(1)} &= C^{-t}w = (24, 30, -24)^t; \\ \alpha &= \langle w, w \rangle = 2052.\end{aligned}$$

Iniciamos a primeira iteração com $k = 1$. Então

$$\begin{aligned}u &= Av^{(1)} = (186.0, 216.0, -126.0)^t; \\ t_1 &= \frac{\alpha}{\langle v^{(1)}, u \rangle} = 0,1469072165; \\ \mathbf{x}^{(1)} &= \mathbf{x}^{(0)} + t_1 v^{(1)} = (3, 525773196, 4, 407216495, -3, 525773196)^t; \\ \mathbf{r}^{(1)} &= \mathbf{r}^{(0)} - t_1 u = (-3, 32474227, -1, 73195876, -5, 48969072)^t; \\ w &= C^{-1}\mathbf{r}^{(1)} = \mathbf{r}^{(1)}; \\ \beta &= \langle w, w \rangle = 44,19029651; \\ s_1 &= \frac{\beta}{\alpha} = 0,02153523222; \\ v^{(2)} &= C^{-t}w + s_1 v^{(1)} = (-2, 807896697, -1, 085901793, -6, 006536293)^t.\end{aligned}$$

Faça

$$\alpha = \beta = 44,19029651.$$

Exemplo 2 (continuação)

Agora estamos prontos para começar a segunda iteração. Temos

$$\begin{aligned}u &= Av^{(2)} = (-14, 48929217, -6, 760760967, -22, 94024338)^t; \\ t_2 &= 0,2378157558; \\ x^{(2)} &= (2, 858011121, 4, 148971939, -4, 954222164)^t; \\ r^{(2)} &= (0, 121039698, -0, 124143281, -0, 034139402)^t; \\ w &= C^{-1}r^{(2)} = r^{(2)}; \\ \beta &= 0,03122766148; \\ s_2 &= 0,0007066633163; \\ v^{(3)} &= (0, 1190554504, -0, 1249106480, -0, 03838400866)^t.\end{aligned}$$

Faça

$$\alpha = \beta = 0,03122766148.$$

Finalmente, a terceira iteração fornece

$$\begin{aligned}
u &= Av^{(3)} = (0, 1014898976, -0, 1040922099, -0, 0286255554)^t; \\
t_3 &= 1, 192628008; \\
x^{(3)} &= (2, 999999998, 4, 000000002, -4, 999999998)^t; \\
r^{(3)} &= (0, 36 \times 10^{-8}, 0, 39 \times 10^{-8}, -0, 141 \times 10^{-8})^t.
\end{aligned}$$

Como $x^{(3)}$ é quase a solução exata, erros de arredondamento não afetaram significativamente o resultado. No Exemplo 3 da Seção 7.3, o método de Gauss-Seidel precisou de 34 iterações e o método SRS, com $\omega = 1, 25$, precisou de 14 iterações para uma precisão de 10^{-7} . Deveria ser observado, porém, que neste exemplo estamos realmente comparando um método direto com métodos iterativos.

Exemplo 3

O próximo exemplo ilustra o efeito do pré-condicionamento em uma matriz mal condicionada. Neste exemplo e subsequentemente, usamos $D^{-1/2}$ para representar a matriz diagonal cujos elementos sejam os recíprocos das raízes quadradas dos elementos da diagonal da matriz dos coeficientes, A .

O sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ com

$$A = \begin{bmatrix} 0,2 & 0,1 & 1 & 1 & 0 \\ 0,1 & 4 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 60 & 0 & -2 \\ 1 & 1 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & 0 & 700 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}$$

tem a solução

$$\mathbf{x}^* = (7, 859713071, 0, 4229264082, -0, 07359223906, -0, 5406430164, 0, 01062616286)^t.$$

A matriz A é definida positiva e simétrica, mas mal condicionada com número de condicionamento $K_\infty(A) = 13.961, 71$. Utilizamos tolerância 0,01 e comparamos os resultados obtidos a partir de métodos iterativos de Jacobi, Gauss-Seidel e SRS (com $\omega = 1, 25$) e a partir do método do gradiente conjugado com $C^{-1} = I$. Então pré-condicionamos por meio da escolha de C^{-1} como $D^{-1/2}$, a matriz diagonal cujos elementos de diagonal são os recíprocos das raízes quadradas dos elementos da diagonal da matriz definida positiva A . Os resultados estão apresentados na Tabela 7.5. O método do gradiente conjugado pré-condicionado proporciona a aproximação mais precisa com o menor número de iterações.

Método	Número de iterações	$x^{(k)}$	$\ x^* - x^{(k)}\ _2$
Jacobi	49	(7,86277141, 0,42320802, -0,07348669, -0,53975964, 0,01062847)'	0,00305834
Gauss-Seidel	15	(7,83525748, 0,42257868, -0,07319124, -0,53753055, 0,01060903)'	0,02445559
SRS ($\omega = 1, 25$)	7	(7,85152706, 0,42277371, -0,07348303, -0,53978369, 0,01062286)'	0,00818607
Gradiente Conjugado	5	(7,85341523, 0,42298677, -0,07347963, -0,53987920, 0,008628916)'	0,00629785
Gradiente Conjugado (Pré-condicionado)	4	(7,85968827, 0,42288329, -0,07359878, -0,54063200, 0,01064344)'	0,00009312

Quando usar?

O método do gradiente conjugado pré-condicionado é frequentemente usado na solução de grandes sistemas lineares, nos quais a matriz é definida positiva e esparsa. Estes sistemas devem ser resolvidos para obter soluções aproximadas de problemas de contorno em equações diferenciais ordinárias (Seções 11.3, 11.4, 11.5). Quanto maior o sistema, mais impressionante o método do gradiente conjugado se torna, uma vez que reduz significativamente o número de iterações necessárias. Nesses sistemas, a matriz de pré-condicionamento C é aproximadamente igual a L da fatoração LL^t de Cholesky de A . Geralmente pequenos elementos em A são ignorados e o método de Cholesky é aplicado para se obter o que se denomina uma fatoração LL^t incompleta de A . Assim $C^{-1}C^{-t} \approx A^{-1}$ e uma boa aproximação é obtida. Mais informações sobre o método do gradiente conjugado podem ser encontradas em [Kelley].

Referências

Outras Referências

1. Richard Burden, D. Faires. Numerical Analysis.(Principal)
2. Hestenes, M. R.; Stiefel, E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. J. Res. Natl. Bur. Stand. 49, 1952.
3. Saad, Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. 2nd ed., SIAM, 2003.

4. Greenbaum, A. Iterative Methods for Solving Linear Systems. SIAM, 1997.
5. Nocedal, J.; Wright, S. Numerical Optimization. Springer, 2006. (Cap. 5)