CONȚINUTUL CURSULUI #6:

II.4.6. Metoda direcțiilor conjugate. Metoda gradientului conjugat.

Definiția (II.17.)

Fie $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$. Vectorii $\left\{v^{(1)}, v^{(1)}, \dots v^{(k)}\right\} \subset \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$ se numesc A-conjugați (sau A-ortogonali) dacă și numai dacă

$$\left\langle Av^{(i)}, v^{(j)} \right\rangle = 0, \forall i, j \in \overline{1, k},\ i \neq j \tag{1}$$

Presupunem în continuare că matricea A este simetrică și pozitiv definită. Fie $\mathcal{B} = \{v^{(i)}\}_{i=\overline{1,n}}$ un sistem de vectori $A -$ ortogonali. Se poate arăta cu ușurință că $\mathcal{B}$ este liniar independent, deci bază în $\mathbb{R}^n$. Fie $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ solția sistemului $Ax = b$. Atunci x se poate reprezenta ca o combinație liniară de vectorii din baza $\mathcal{B}$, i.e. $\exists \alpha_i,\ i \in \overline{1, n}$, astfel încât

$$x = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k v^{(k)} \tag{2}$$

Pentru a determina coeficienții α_k vom considera produsul scalar b și $v^{(k)}$

$$\begin{aligned} \left\langle b, v^{(k)} \right\rangle &= \left\langle Ax, v^{(k)} \right\rangle = \left\langle A\sum_{i=1}^{n}\alpha_i v^{(i)}, v^{(k)} \right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{n}\alpha_i \left\langle Av^{(i)}, v^{(k)} \right\rangle = \alpha_k \left\langle Av^{(k)}, v^{(k)} \right\rangle \end{aligned} \tag{3}$$

Astfel avem

$$\alpha_k = \frac{\left\langle b, v^{(k)} \right\rangle}{\left\langle Av^{(k)}, v^{(k)} \right\rangle} \tag{4}$$

Dacă notăm $x^{(k)} = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i v^{(i)}$, atunci se obține următoarea relație de recurență:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k v^{(k)}, \quad k \geq 1, \quad x^{(0)} = 0_n \tag{5}$$

Soluția x se poate obține în n pași:

$$x^{(n)} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i v^{(i)} = x$$

Metoda Gradientului Conjugat poate fi considerată o metodă iterativă dacă sistemele au dimensiune foarte mare.

Fie acum $r^{(k)} = Ax^{(k)} - b$ restul sau reziduul la pasul k. Avem

$$\begin{aligned} r^{(k)} &= A\left(x^{(k-1)} + \alpha_k v^{(k)}\right) - b = \left(Ax^{(k-1)} - b\right) + \alpha_k Av^{(k)} \\ &= r^{(k-1)} + \alpha_k Av^{(k)} \end{aligned}$$

Rezultă:

$$\begin{cases} r^{(k)} = r^{(k-1)} + \alpha_k Av^{(k)}, & k = \overline{1, n} \\ r^{(0)} = Ax^{(0)} - b = -b \end{cases} \tag{6}$$

Evident că $r^{(n)} = Ax^{(n)} - b = Ax - b = 0$.

Propoziția (II.9.)

Vectorul $r^{(k)}$ este ortogonal pe vectorii A - ortogonali $\left\{v^{(1)}, v^{(2)}, \dots v^{(k)}\right\}$ i.e. $\left\langle r^{(k)}, v^{(i)} \right\rangle = 0,\ \forall i \in \overline{1, k}, k \geq 1$.

Demonstrație: Vom demonstra prin inducție. În primul rând pentru orice $k \geq 1$:

$$\left\langle r^{(k)}, v^{(k)} \right\rangle = \left\langle Ax^{(k)} - b, v^{(k)} \right\rangle = \left\langle A\left(x^{(k)} - x\right), v^{(k)} \right\rangle$$

$$= \left\langle -A \sum_{i=k+1}^{n} \alpha_i v^{(i)}, v^{(k)} \right\rangle = - \sum_{i=k+1}^{n} \alpha_i \left\langle Av^{(i)}, v^{(k)} \right\rangle$$

Din A-ortogonalitatea vectorilor din $\mathcal{B}$ rezultă

$$\left\langle r^{(k)}, v^{(k)} \right\rangle = 0, \ \forall k \geq 1 \tag{7}$$

Presupunem adevărat $P(k) : \langle r^{(k)}, v^{(i)} \rangle = 0, i = \overline{1, k}$ și vom demonstra că $P(k+1) : \langle r^{(k+1)}, v^{(i)} \rangle = 0, i = \overline{1, k+1}$ este deasemenea adevărată. Conform (7) rezultă $P(k+1)$ adevărată pentru $i = k+1$. Ramane sa demonstrăm $P(k+1)$ pentru $i = \overline{1, k}$.

$$\left\langle r^{(k+1)}, v^{(i)} \right\rangle = \left\langle r^{(k)} + \alpha_k A v^{(k)}, v^{(i)} \right\rangle \tag{8}$$

$$= \left\langle r^{(k)}, v^{(i)} \right\rangle + \alpha_k \left\langle Av^{(k)}, v^{(i)} \right\rangle = 0 \tag{9}$$

unde primul termen este nul din ipoteza de inducție iar al doilea din A-ortogonalitatea vectorilor din $\mathcal{V}$.

Pentru ca problema să fie însă completă avem nevoie de un procedeu iterativ de calcul al vectorilor din $\mathcal{B}$.
Considerăm schema numerică:

$$\begin{cases} v^{(k)} = \beta_{k-1} v^{(k-1)} - r^{(k-1)}, & k \in \overline{1, n} \\ v^{(0)} = 0, \quad v^{(1)} = -r^{(0)} = b \end{cases} \tag{10}$$

Obs.: Pe $v^{(1)}$ îl putem obține dacă se alege $\beta_0 = 0$.
Coeficientul β_k se va obține din condiția ca $v^{(k)}$ să fie $A-$ ortogonal pe vectorul $v^{(k-1)}$

$$\left\langle Av^{(k)}, v^{(k-1)} \right\rangle = 0 \Leftrightarrow \left\langle A(\beta_{k-1} v^{(k-1)} - r^{(k-1)}), v^{(k-1)} \right\rangle = 0 \tag{11}$$

$$\Leftrightarrow \beta_{k-1} = \frac{\left\langle Ar^{(k-1)}, v^{(k-1)} \right\rangle}{\left\langle Av^{(k-1)}, v^{(k-1)} \right\rangle} \tag{12}$$

Vectorii $v^{(k)}, k = \overline{1, n}$, construiți conform schemei (10) cu coeficienții β_k dați de (12), sunt $A-$ ortogonali. Demonstrația se face conform metodei inducției (vezi Prop. II.10.).

Conform (4) avem

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{\langle b, v^{(k)} \rangle}{\langle Av^{(k)}, v^{(k)} \rangle} = \frac{\langle b, v^{(k)} \rangle}{\langle Av^{(k)}, v^{(k)} \rangle} - \frac{\langle Ax^{(k-1)}, v^{(k)} \rangle}{\langle Av^{(k)}, v^{(k)} \rangle} \\ &= -\frac{\langle r^{(k-1)}, v^{(k)} \rangle}{\langle Av^{(k)}, v^{(k)} \rangle} = -\frac{\langle r^{(k-1)}, \beta_{k-1} v^{(k-1)} - r^{(k-1)} \rangle}{\langle Av^{(k)}, v^{(k)} \rangle} \Rightarrow \end{aligned} \tag{13}$$

$$\alpha_k = \frac{\left\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \right\rangle}{\left\langle Av^{(k)}, v^{(k)} \right\rangle} \tag{14}$$

În relația de mai sus s-a tinut cont de Prop. II.9..

Propoziția (II.10.)

Vectorii $r^{(k)}, v^{(k)}, k = \overline{1, n}$, construiți conform Metodei Gradientului Conjugat au următoarele proprietăți:

$(P1(k)) : \langle r^{(k)}, r^{(i)} \rangle = 0, \quad \forall i = \overline{0, k-1}$

$(P2(k)) : \langle r^{(k)}, Av^{(i)} \rangle = 0, \quad \forall i = \overline{0, k-1}$

$(P3(k)) : \langle Av^{(k)}, v^{(i)} \rangle = 0, \quad \forall i = \overline{0, k-1}$

$(P4(k)) : \langle Av^{(k+1)}, r^{(i-1)} \rangle = 0, \quad \forall i = \overline{1, k-1}$

Demonstrație:

Obs.: (P3(k)) cu $i = k-1$ este echivalentă cu condiția $\beta_{k-1} = \frac{\langle Ar^{(k-1)}, v^{(k-1)} \rangle}{\langle Av^{(k-1)}, v^{(k-1)} \rangle}$ așa cum s-a demonstrat mai sus. O vom presupune implicit adevărată, i.e.

$$\left\langle Av^{(k)}, v^{(k-1)} \right\rangle = 0, \forall k \geq 1 \tag{15}$$

Vom demonstra prin metoda inducției.
Pentru $k = 1$ avem:

$$(P1(1)) : \left\langle r^{(1)}, r^{(0)} \right\rangle = \left\langle r^{(1)}, -v^{(1)} \right\rangle = -\left\langle r^{(1)}, v^{(1)} \right\rangle = 0 \text{ (vezi Prop. II.9.)}$$

$$(P2(1)) : \left\langle r^{(1)}, Av^{(0)} \right\rangle = 0, \tag{16}$$

$$(P3(1)) : \left\langle Av^{(1)}, v^{(0)} \right\rangle = 0$$

Vectorul $v^{(0)}$ s-a considerat implicit egal cu vectorul nul.

$$(P4(1)): \left\langle Av^{(2)}, r^{(0)}\right\rangle = \left\langle A(\beta_1 v^{(1)} - r^{(1)}), r^{(0)}\right\rangle$$
$$= \beta_1 \left\langle Av^{(1)}, r^{(0)}\right\rangle - \left\langle Ar^{(1)}, r^{(0)}\right\rangle$$
$$= -\frac{\left\langle Ar^{(1)}, v^{(1)}\right\rangle}{\left\langle Av^{(1)}, v^{(1)}\right\rangle}\left\langle Av^{(1)}, v^{(1)}\right\rangle - \left\langle Ar^{(1)}, r^{(0)}\right\rangle$$
$$= \left\langle Ar^{(1)}, r^{(0)}\right\rangle - \left\langle Ar^{(1)}, r^{(0)}\right\rangle = 0$$

Presupunem proprietățile (P1(k))-(P4(k)) adevărate pentru un k arbitrar și vom demonstra pentru $k+1$, i.e.

P1($k+1$): $\left\langle r^{(k+1)}, r^{(i)}\right\rangle = 0, \quad \forall i \in \overline{0,k}$

P2($k+1$): $\left\langle r^{(k+1)}, Av^{(i)}\right\rangle = 0, \quad \forall i \in \overline{0,k}$

P3($k+1$): $\left\langle Av^{(k+1)}, v^{(i)}\right\rangle = 0, \quad \forall i \in \overline{0,k}$

P4($k+1$): $\left\langle Av^{(k+2)}, r^{(i-1)}\right\rangle = 0, \quad \forall i \in \overline{1,k}$

Atunci: P1($k+1$):

$$\left\langle r^{(k+1)}, r^{(i)}\right\rangle = \left\langle r^{(k)} + \alpha_{k+1}Av^{(k+1)}, r^{(i)}\right\rangle$$
$$= \left\langle r^{(k)}, r^{(i)}\right\rangle + \alpha_{k+1}\left\langle Av^{(k+1)}, r^{(i)}\right\rangle$$

Dacă $i = \overline{0, k-1}$ ambii termeni se anulează din ipoteza de inducție conform P1(k), respectiv P4(k).
Pentru $i = k$:

$$\left\langle r^{(k+1)}, r^{(k)}\right\rangle = \left\langle r^{(k)}, r^{(k)}\right\rangle + \alpha_{k+1}\left\langle Av^{(k+1)}, r^{(k)}\right\rangle$$
$$= \left\langle r^{(k)}, r^{(k)}\right\rangle + \frac{\left\langle r^{(k)}, r^{(k)}\right\rangle}{\left\langle Av^{(k+1)}, v^{(k+1)}\right\rangle}\left\langle Av^{(k+1)}, r^{(k)}\right\rangle$$
$$= \left\langle r^{(k)}, r^{(k)}\right\rangle + \frac{\left\langle r^{(k)}, r^{(k)}\right\rangle}{\left\langle Av^{(k+1)}, \beta_k v^{(k)} - r^{(k)}\right\rangle}\left\langle Av^{(k+1)}, r^{(k)}\right\rangle = 0$$

P2($k+1$): $\left\langle r^{(k+1)}, Av^{(i)}\right\rangle =$

$$\overset{P1(k+1)}{=} \frac{1}{\alpha_i}\left(\left\langle r^{(k+1)}, \alpha_i Av^{(i)}\right\rangle + \left\langle r^{(k+1)}, r^{(i-1)}\right\rangle\right)$$
$$= \frac{1}{\alpha_i}\left\langle r^{(k+1)}, r^{(i)}\right\rangle \overset{P1(k+1)}{=} 0, \quad \forall i \in \overline{0,k}.$$

P3($k+1$): $\left\langle Av^{(k+1)}, v^{(i)}\right\rangle = \left\langle \beta_k Av^{(k)} - Ar^{(k)}, v^{(i)}\right\rangle$

$$= \beta_k\left\langle Av^{(k)}, v^{(i)}\right\rangle - \left\langle r^{(k)}, Av^{(i)}\right\rangle$$

Dacă $i = \overline{1, k-1}$ atunci primul termen se anuleaza din ipoteza de inducție conform (P3(k)), iar al doilea din (P2(k)). Relația (15) justifică (P3) pentru $i = k$.

P4($k+1$): $\left\langle Av^{(k+2)}, r^{(i-1)}\right\rangle =$

$$= \left\langle A(\beta_{k+1}v^{(k+1)} - r^{(k+1)}), \beta_{i-1}v^{(i-1)} - v^{(i)}\right\rangle = 0, \forall i = \overline{1,k}$$

În ultima relația s-a ținut cont de $P3(k+1), P2(k+1)$.

ALGORITM (Metoda Gradientului Conjugat)

Date de intrare: $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ sim.și poz. def., $b \in \mathbb{R}^n$; ε.
Date de ieșire: x_{aprox}, N.

STEP 1: $x^{(0)} = 0$; $r^{(0)} = -b$; $v^{(0)} = 0$; $k = 0$; $\beta_0 = 0$;

STEP 2: while $\| r^{(k)} \| \geq \varepsilon$ do

$k = k+1$;

$v^{(k)} = \beta_{k-1}v^{(k-1)} - r^{(k-1)}$;

$\alpha_k = \dfrac{\left\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)}\right\rangle}{\left\langle Av^{(k)}, v^{(k)}\right\rangle}$;

$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k v^{(k)}$;

$r^{(k)} = r^{(k-1)} + \alpha_k Av^{(k)}$;

$\beta_k = \dfrac{\left\langle Ar^{(k)}, v^{(k)}\right\rangle}{\left\langle Av^{(k)}, v^{(k)}\right\rangle}$;

endwhile

STEP 3: $x_{aprox} = x^{(k)}$; $N = k$.

Exercițiu: (II.2.)

Să se construiască în Matlab procedura $[x_{aprox}, N] =$ **GradConj**(A, b, ε) *conform algoritmului Metoda Gradientului Conjugat. Într-un fișier function să se rezolve în Matlab apelând procedura* **GradConj** *următorul sistem*

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 - x_4 = 4 \\ 4x_1 - 5x_2 + 6x_3 + 10x_4 = 52 \\ 20x_1 - 19x_2 + 4x_3 - 10x_4 = -46 \\ -3x_1 + 4x_2 + 5x_3 - 7x_4 = -8 \end{cases}$$

Soluție: Vezi Program II.2.

Atenție! Matricea asociată sistemului nu este simetrică și nici pozitiv definită. Putem totuși rezolva acest sistem, înmulțind la stânga sistemul $AX = b$ cu A^T. Noul sistem care se obține este $A^TAx = A^Tb$, cu matricea asociată A^TA simetrică și pozitiv definită.

III. Rezolvarea numerică a sistemelor de ecuații neliniare. Metoda Newton.

Fie $F : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ o funcție de clasă $C^1(D)$, $F = F(x)$, cu $F = (F_1, F_2, ..., F_n)^T$ și $x = (x_1, x_2, ..., x_n)^T \in D$. Considerăm sistemul de ecuații neliniare

$$F(x) = 0 \tag{17}$$

sau scris pe componente

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, ..., x_n) = 0 \\ F_2(x_1, x_2, ..., x_n) = 0 \\ ... \\ F_n(x_1, x_2, ..., x_n) = 0 \end{cases} \tag{18}$$

Presupunem în continuare că domeniul D a fost ales astfel încât sistemul să admită o soluție unică pe acest domeniu.

Scriem o formă echivalentă a relației (17)

$$x = G(x) \tag{19}$$

unde $G : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ este de forma:

$$G(x) = x + C(x)F(x), \quad C(x) = (C_{ij}(x))_{ij=\overline{1,n}}, x \in D \tag{20}$$

Construim o metodă iterativă în baza formulei (19)

$$x^{(k)} = G(x^{(k-1)}),\ k \geq 1, x^{(0)} \in D \tag{21}$$

Teorema (III.1. (Teorema de convergență))

În contextul descris mai sus, dacă $\rho(\nabla G(x^*)) < 1$ *și* $x^{(0)}$ *se alege suficient de aproape de soluția* x^* *a sistemului* $F(x) = 0$*, atunci șirul* $(x^{(k)})_{k\geq 1}$ *este convergent la* x^**.*

Relația (20) scrisă pe componente are forma

$$G_i = x_i + \sum_{k=1}^{n} C_{ik}F_k \tag{22}$$

Dacă derivăm relația de mai sus în raport cu x_j se obține

$$\frac{\partial G_i}{\partial x_j} = \delta_{ij} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial C_{ik}}{\partial x_j}F_i + \sum_{k=1}^{n} C_{ik}\frac{\partial F_i}{\partial x_j} \tag{23}$$

Relația (23) scrisă pentru $x = x^*$

$$\frac{\partial G_i}{\partial x_j}(x^*) = \delta_{ij} + \sum_{k=1}^{n} C_{ik}(x^*)\frac{\partial F_i}{\partial x_j}(x^*) \tag{24}$$

sau matricial

$$\nabla G(x^*) = I + C(x^*)\nabla F(x^*) \tag{25}$$

Conform Th. III.1. metoda iterativă este convergentă dacă $\rho(I + C(x^*)\nabla F(x^*)) < 1$. Convergența atinge maximul dacă $I + C(x^*)\nabla F(x^*) = 0$ sau $C(x^*) = -(\nabla F(x^*))^{-1}$.

Fie $C(x) = -(\nabla F(x))^{-1}$, de unde

$$G(x) = I - (\nabla F(x))^{-1}F(x) \tag{26}$$

sau cu notația $J(x) = \nabla F(x)$ se obține șirul recurent

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - (J(x^{(k-1)}))^{-1}F(x^{(k-1)}) \tag{27}$$

unde $J(x^{(k-1)})$ este Jacobianul funcției F evaluat în $x^{(k-1)}$,

$$J(x^{(k-1)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(x^{(k-1)}) & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n}(x^{(k-1)}) \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial F_n}{\partial x_1}(x^{(k-1)}) & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial x_n}(x^{(k-1)}) \end{pmatrix} \tag{28}$$

Inconvenientul metodei este că la fiecare iterație avem de calculat inversa Jacobianului. Pentru a evita calculul inversei vom proceda după cum urmează. Fie $z^{(k)} = x^{(k)} - x^{(k-1)}$ corecția la pasul k, atunci din (27) se obține următorul sistem liniar:

$$J(x^{(k-1)})z^{(k)} = -F(x^{(k-1)}) \tag{29}$$

Aplicând metoda Gauss cu pivotare totală se obține soluția $z^{(k)}$ și se actualizează soluția $x^{(k)} = x^{(k-1)} + z^{(k)}$.

ALGORITM (Metoda Newton)

Date de intrare: $F = (F_1, F_2, ..., F_n)^T; J; x^{(0)}; \varepsilon.$
Date de ieșire: $x_{aprox}, N.$

STEP 1: $k = 0$;

STEP 2: `do`

  $k = k + 1$;

  `Se rezolvă sistemul` $J(x^{(k-1)})z^{(k)} = -F(x^{(k-1)})$;

  $x^{(k)} = x^{(k-1)} + z^{(k)}$;

`while`$(\| z^{(k)} \| \geq \varepsilon)$

STEP 3: $x_{aprox} = x^{(k)}; N = k.$

Exercițiu: (III.1.)

Fie următorul sistem de ecuații neliniare:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = 4 \\ \dfrac{x^2}{8} - y = 0 \end{cases} \tag{30}$$

$(x, y) \in [0, 4] \times [0, 3]$. *Să se implementeze în Matlab următoarele sarcini:*

- *Să se calculeze simbolic Jacobianul sistemului;*
- *Să se construiască grafic curbele* $\mathcal{C}_1 : x^2 + y^2 = 4$ *și* $\mathcal{C}_2 : y = \frac{x^2}{8}$. *Pentru cerc se vor folosi ecuațiile parametrice;*
- *Să se construiască procedura* **Newton** *cu sintaxa* $[x_{aprox}, N] =$**Newton**$(F, J, x^{(0)}, \varepsilon)$ *în baza algoritmului metodei Newton;*

Exercițiu: (III.1. continuare)

- *Să se rezolve sistemul apelând procedura* **Newton** *pentru datele* $\varepsilon = 10^{-6}$ *și* $x^{(0)} = (1, 1)^T$;
- *Să se construiască pe graficul curbelor punctul, coordonatele căruia sunt componentele vectorului* x_{aprox}.

Soluție: Vezi Program III.1.