Métodos Iterativos para Solução de Sistemas Lineares

INF1608 – Análise Numérica

Waldemar Celes
celes@inf.puc-rio.br

Departamento de Informática, PUC-Rio

Sistemas Lineares

Resolução de sistemas lineares

- Eliminação de Gauss
  - Método direto
  - Solução exata (teoricamente)
  - Complexidade computacional: $O(n^3)$

Sistemas Lineares

Resolução de sistemas lineares

- Eliminação de Gauss
  - Método direto
  - Solução exata (teoricamente)
  - Complexidade computacional: $O(n^3)$

Métodos iterativos

- Solução, em geral, aproximada
- Complexidade computacional: $m\delta$
  - m é o número de iterações
  - δ é a complexidade em cada iteração

Métodos Iterativos

Sistemas lineares

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Método de Jacobi

- Forma de iteração de ponto fixo para sistemas de equações
- Aplica IPF na i-ésima equação para achar x_i

Métodos Iterativos

Sistemas lineares

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Método de Jacobi

- Forma de iteração de ponto fixo para sistemas de equações
- Aplica IPF na i-ésima equação para achar x_i

Exemplo:

$$\begin{cases} 3x + y = 5 \\ x + 2y = 5 \end{cases}$$

Métodos Iterativos

Sistemas lineares

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Método de Jacobi

- Forma de iteração de ponto fixo para sistemas de equações
- Aplica IPF na i-ésima equação para achar x_i

Exemplo:

$$\begin{cases} 3x + y = 5 \\ x + 2y = 5 \end{cases}$$

Reescrevendo:

$$\begin{cases} x = \frac{5-y}{3} \\ y = \frac{5-x}{2} \end{cases}$$

Métodos Iterativos

Método de Jacobi

$$\begin{cases} x = \frac{5-y}{3} \\ y = \frac{5-x}{2} \end{cases}$$

Iterando:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ \frac{5}{2} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{5}{6} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{10}{9} \\ \frac{25}{12} \end{bmatrix} \rightarrow \cdots$$

Métodos Iterativos

Método de Jacobi

$$\begin{cases} x = \frac{5-y}{3} \\ y = \frac{5-x}{2} \end{cases}$$

Iterando:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ \frac{5}{2} \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{5}{6} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{10}{9} \\ \frac{25}{12} \end{bmatrix} \to \cdots$$

- Converge!
- Solução exata:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Métodos Iterativos

Método de Jacobi

- Invertendo a ordem das equações

Exemplo:

$$\begin{cases} x + 2y = 5 \\ 3x + y = 5 \end{cases}$$

Métodos Iterativos

Método de Jacobi

- Invertendo a ordem das equações

Exemplo:

$$\begin{cases} x + 2y = 5 \\ 3x + y = 5 \end{cases}$$

Reescrevendo:

$$\begin{cases} x = 5 - 2y \\ y = 5 - 3x \end{cases}$$

Métodos Iterativos

Método de Jacobi

- Invertendo a ordem das equações

Exemplo:

$$\begin{cases} x + 2y = 5 \\ 3x + y = 5 \end{cases}$$

Reescrevendo:

$$\begin{cases} x = 5 - 2y \\ y = 5 - 3x \end{cases}$$

Iterando:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -5 \\ 10 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 25 \\ 20 \end{bmatrix} \rightarrow \cdots$$

Métodos Iterativos

Método de Jacobi

- Invertendo a ordem das equações

Exemplo:

$$\begin{cases} x + 2y = 5 \\ 3x + y = 5 \end{cases}$$

Reescrevendo:

$$\begin{cases} x = 5 - 2y \\ y = 5 - 3x \end{cases}$$

Iterando:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -5 \\ 10 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 25 \\ 20 \end{bmatrix} \rightarrow \cdots$$

- Não converge!

Métodos Iterativos

Definição: **Matriz Estritamente Diagonal Dominante**

- Uma matriz $A_{n \times n}$ é estritamente diagonal dominante se:

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$$

  - Isto é, o valor absoluto da digonal é maior que a soma dos valores absolutos dos demais elementos da linha

No exemplo:

- 1o caso:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

- 2o caso:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}$$

Métodos Iterativos

Formulação do Método de Jacobi

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

- Decomposição da matriz

$$A = L + D + U$$

  - L: matriz com os elementos abaixo da diagonal
  - D: matriz com os elementos da diagonal
  - U: matriz com os elementos acima da diagonal

Métodos Iterativos

Formulação do Método de Jacobi

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

- Decomposição da matriz

$$A = L + D + U$$

  - L: matriz com os elementos abaixo da diagonal
  - D: matriz com os elementos da diagonal
  - U: matriz com os elementos acima da diagonal
- Reescrevendo algebricamente:

$$\begin{aligned} A\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\ (D + L + U)\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\ D\mathbf{x} &= \mathbf{b} - (L + U)\mathbf{x} \\ \mathbf{x} &= D^{-1}(\mathbf{b} - (L + U)\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Métodos Iterativos

Formulação do Método de Jacobi

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

- Decomposição da matriz

$$A = L + D + U$$

  - L: matriz com os elementos abaixo da diagonal
  - D: matriz com os elementos da diagonal
  - U: matriz com os elementos acima da diagonal
- Reescrevendo algebricamente:

$$\begin{aligned} A\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\ (D + L + U)\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\ D\mathbf{x} &= \mathbf{b} - (L + U)\mathbf{x} \\ \mathbf{x} &= D^{-1}(\mathbf{b} - (L + U)\mathbf{x}) \end{aligned}$$

  - Note que D tem inversa trivial

Métodos Iterativos

Algoritmo: Método de Jacobi

$$\mathbf{x}_0 = \text{estimativa inicial}$$
$$\mathbf{x}_{k+1} = D^{-1}(\mathbf{b} - (L + U)\mathbf{x}_k), \quad k = 1, 2, 3, \cdots$$

Métodos Iterativos

Algoritmo: Método de Jacobi

$$\mathbf{x}_0 = \text{estimativa inicial}$$
$$\mathbf{x}_{k+1} = D^{-1}(\mathbf{b} - (L+U)\mathbf{x}_k), \quad k = 1, 2, 3, \cdots$$

No exemplo:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

Métodos Iterativos

Algoritmo: Método de Jacobi

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_0 &= \text{estimativa inicial} \\ \mathbf{x}_{k+1} &= D^{-1}(\mathbf{b} - (L+U)\mathbf{x}_k), \quad k = 1, 2, 3, \cdots \end{aligned}$$

No exemplo:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ y_k \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \frac{5-y_k}{3} \\ \frac{5-x_k}{2} \end{bmatrix}$$

Métodos Iterativos

Método de Gauss-Seidel

- Iteração de Jacobi que usa valores mais recentes dentro da mesma iteração
  - Impede computação em paralelo
- Convergência mais rápida, em geral
  - Ainda condicionada a matriz estritamente diagonal dominante

Métodos Iterativos

Método de Gauss-Seidel

- Iteração de Jacobi que usa valores mais recentes dentro da mesma iteração
  - Impede computação em paralelo
- Convergência mais rápida, em geral
  - Ainda condicionada a matriz estritamente diagonal dominante

Exemplo:

$$\begin{cases} 3x + y = 5 \\ x + 2y = 5 \end{cases}$$

Métodos Iterativos

Método de Gauss-Seidel

- Iteração de Jacobi que usa valores mais recentes dentro da mesma iteração
  - Impede computação em paralelo
- Convergência mais rápida, em geral
  - Ainda condicionada a matriz estritamente diagonal dominante

Exemplo:

$$\begin{cases} 3x + y = 5 \\ x + 2y = 5 \end{cases}$$

Jacobi:

$$\begin{cases} x_{i+1} = \frac{5-y_i}{3} \\ y_{i+1} = \frac{5-x_i}{2} \end{cases}$$

Métodos Iterativos

Método de Gauss-Seidel

- Iteração de Jacobi que usa valores mais recentes dentro da mesma iteração
  - Impede computação em paralelo
- Convergência mais rápida, em geral
  - Ainda condicionada a matriz estritamente diagonal dominante

Exemplo:

$$\begin{cases} 3x + y = 5 \\ x + 2y = 5 \end{cases}$$

Jacobi:

$$\begin{cases} x_{i+1} = \frac{5-y_i}{3} \\ y_{i+1} = \frac{5-x_i}{2} \end{cases}$$

Gauss-Seidel:

$$\begin{cases} x_{i+1} = \frac{5-y_i}{3} \\ y_{i+1} = \frac{5-x_{i+1}}{2} \end{cases}$$

Métodos Iterativos

Exemplo:

$$\begin{cases} x = \frac{5-y}{3} \\ y = \frac{5-x}{2} \end{cases}$$

Iterações de Jacobi:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ \frac{5}{2} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{5}{6} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{10}{9} \\ \frac{25}{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.1111 \\ 2.0833 \end{bmatrix}$$

Métodos Iterativos

Exemplo:

$$\begin{cases} x = \frac{5-y}{3} \\ y = \frac{5-x}{2} \end{cases}$$

Iterações de Jacobi:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ \frac{5}{2} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{5}{6} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{10}{9} \\ \frac{25}{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.1111 \\ 2.0833 \end{bmatrix}$$

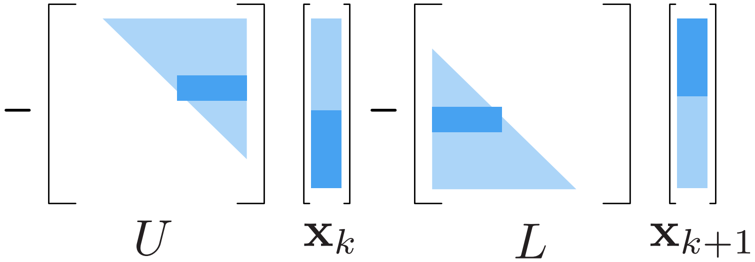
Iterações de Gauss-Seidel:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{10}{9} \\ \frac{35}{18} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{55}{54} \\ \frac{215}{108} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0185 \\ 1.9907 \end{bmatrix}$$

Métodos Iterativos

Algoritmo: Método de Gauss-Seidel

$$\mathbf{x}_0 = \text{estimativa inicial}$$
$$\mathbf{x}_{k+1} = D^{-1}(\mathbf{b} - U\mathbf{x}_k - L\mathbf{x}_{k+1}), \quad k = 1, 2, 3, \cdots$$



- Na prática, trabalha-se com um único vetor (*in place*)

Métodos Iterativos

Relaxação sucessiva

$$\mathbf{x}_{k+1} = (1 - w)\mathbf{x}_k + w\ [\text{fórmula para determinar } \mathbf{x}_{k+1}]$$

Métodos Iterativos

Relaxação sucessiva

$$\mathbf{x}_{k+1} = (1 - w)\mathbf{x}_k + w \text{ [fórmula para determinar } \mathbf{x}_{k+1}]$$

- Se $w < 1$, tem-se sub-relaxação (interpolação)
- Se $w > 1$, tem-se sobre-relaxação (extrapolação)

Métodos Iterativos

Relaxação sucessiva

$$\mathbf{x}_{k+1} = (1 - w)\mathbf{x}_k + w \text{ [fórmula para determinar } \mathbf{x}_{k+1}]$$

- Se $w < 1$, tem-se sub-relaxação (interpolação)
  - Usado para convergir sistemas não convergentes ou acelerar a convergência amortecendo oscilações
- Se $w > 1$, tem-se sobre-relaxação (extrapolação)

Métodos Iterativos

Relaxação sucessiva

$$\mathbf{x}_{k+1} = (1 - w)\mathbf{x}_k + w \text{ [fórmula para determinar } \mathbf{x}_{k+1}\text{]}$$

- Se $w < 1$, tem-se sub-relaxação (interpolação)
  - Usado para convergir sistemas não convergentes ou acelerar a convergência amortecendo oscilações
- Se $w > 1$, tem-se sobre-relaxação (extrapolação)
  - Usado para acelerar convergência de um sistema convergente
  - Esta estratégia é muito usada!

Métodos Iterativos

Custo computacional

- Custo por iteração: $O(n^2)$
  - Operação dominante: multiplicação de matriz por vetor
- Custo total: $mO(n^2)$

Métodos Iterativos

Custo computacional

- Custo por iteração: $O(n^2)$
  - Operação dominante: multiplicação de matriz por vetor
- Custo total: $mO(n^2)$
- Em condições especiais
  - **Sistemas esparsos**
    - Complexidade de cada interação: $O(n)$
  - **Sistemas coerentes** (boas estimativas iniciais)
    - Número de iterações: $O(1)$
  - Complexidade computacional total: $O(n)$

Métodos Iterativos

Sistemas esparsos

- Matriz com a grande maioria dos elementos nulos
- Armazenar e processar apenas os elementos não nulos
  - Eliminação de Gauss transformaria em matriz cheia

Métodos Iterativos

Sistemas esparsos

- Matriz com a grande maioria dos elementos nulos
- Armazenar e processar apenas os elementos não nulos
  - Eliminação de Gauss transformaria em matriz cheia

Exemplo

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0.5 \\ -1 & 3 & -1 & \cdots & 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & \cdots & 0.5 & 0 & 0 \\ & & & \vdots & & & \\ 0 & 0 & 0.5 & \cdots & 3 & -1 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & \cdots & -1 & 3 & -1 \\ 0.5 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 3 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 1.5 \\ 1.5 \\ \vdots \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 2.5 \end{bmatrix}, \text{ solução } \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Métodos Iterativos

Sistemas esparsos

Exemplo: $n = 100\,000$

- Matriz cheia: $n^2 = 10^{10}$ valores
  - Memória: $8 \times 10^{10} = 80$ Gbytes!
  - Processamento por Eliminação de Gauss $O(n^3)$
    - 10^{15} operações

Métodos Iterativos

Sistemas esparsos

Exemplo: $n = 100\,000$

- Matriz cheia: $n^2 = 10^{10}$ valores
  - Memória: $8 \times 10^{10} = 80$ Gbytes!
  - Processamento por Eliminação de Gauss $O(n^3)$
    - 10^{15} operações
  - Suponha máquina de 10^8 flops
    - Tempo de processamento: $\frac{10^{15}}{10^8} = 10^7$ segundos!
    - Um ano tem 3×10^7 segundos

Métodos Iterativos

Sistemas esparsos

Exemplo: $n = 100\,000$

- Matriz cheia: $n^2 = 10^{10}$ valores
  - Memória: $8 \times 10^{10} = 80$ Gbytes!
  - Processamento por Eliminação de Gauss $O(n^3)$
    - 10^{15} operações
  - Suponha máquina de 10^8 flops
    - Tempo de processamento: $\frac{10^{15}}{10^8} = 10^7$ segundos!
    - Um ano tem 3×10^7 segundos
- Considerando esparsidade da matriz
  - Memória: $4n$
  - Número de operações: $2 \times 4n = 8 \times 10^5$
    - ≈ 1 segundo por iteração!

Reformulando o Problema

Sistema linear

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Exemplo:

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}$$

Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Reformulando o Problema

Sistema linear

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Exemplo:

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}$$

- Solução:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Reformulando o Problema

Sistema linear

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Exemplo:

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}$$

- Solução:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

- Interpretação geométrica
  - Interseção dos hiperplanos

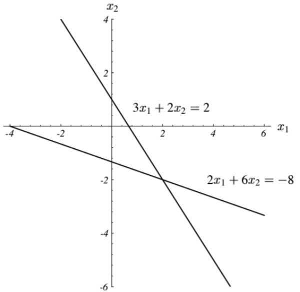


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Reformulando o Problema

Forma Quadrática

- Equação escalar na forma:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T A\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x} + c$$

  - onde c é um valor escalar (p.e. $c = 0$)

Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Reformulando o Problema

Forma Quadrática

- Equação escalar na forma:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T A\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x} + c$$

  - onde c é um valor escalar (p.e. $c = 0$)

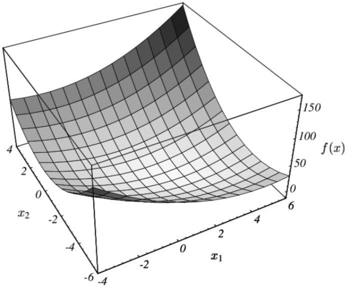


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Reformulando o Problema

Gradiente da forma quadrática

$$f'(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - b$$

Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Reformulando o Problema

Gradiente da forma quadrática

$$f'(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - b$$

- Ponto crítico da forma quadrática

$$f'(\mathbf{x}) = 0$$

  - que equivale a achar a solução de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$

Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Reformulando o Problema

Gradiente da forma quadrática

$$f'(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - b$$

- Ponto crítico da forma quadrática

$$f'(\mathbf{x}) = 0$$

  - que equivale a achar a solução de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$
- Sendo A positiva definida, será sempre um **ponto de mínimo**

$$\mathbf{x}^T A\, \mathbf{x} > 0, \quad \forall \quad \mathbf{x} = \mathbf{0}$$

Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Reformulando o Problema

Gradiente da forma quadrática

$$f'(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - b$$

- Ponto crítico da forma quadrática

$$f'(\mathbf{x}) = 0$$

  - que equivale a achar a solução de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$
- Sendo A positiva definida, será sempre um **ponto de mínimo**

$$\mathbf{x}^T A\, \mathbf{x} > 0, \quad \forall \quad \mathbf{x} = \mathbf{0}$$

Determinar a solução de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ é equivalente a encontrar o ponto mínimo de $f(\mathbf{x})$

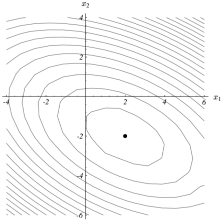


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Determinação do Mínimo da Função

Erro da solução

$$\mathbf{e}_k = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_s$$

Resíduo

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k$$

Logo:

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A(\mathbf{e}_k + \mathbf{x}_s)$$
$$\mathbf{r}_k = -A\mathbf{e}_k$$

- O resíduo é o erro transformado por A no espaço de $\mathbf{b}$

Determinação do Mínimo da Função

Tomar a direção inversa do gradiente

- Converge, mas resulta em muitas iterações

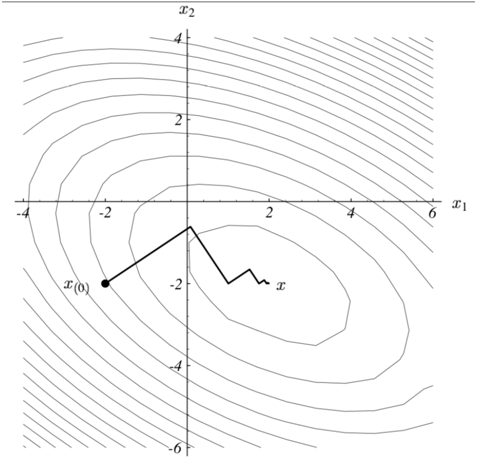


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Determinação do Mínimo da Função

Buscar as direções ortogonais $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, ..., \mathbf{d}_{n-1}$

- Erro expresso como combinação linear de $\mathbf{d}_k' s$
- Um passo em cada direção
  - Elimina cada componente do erro na direção $\mathbf{d}_k$

Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Determinação do Mínimo da Função

Buscar as direções ortogonais $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, ..., \mathbf{d}_{n-1}$

- Erro expresso como combinação linear de $\mathbf{d}'_k s$
- Um passo em cada direção
  - Elimina cada componente do erro na direção $\mathbf{d}_k$

Procedimento

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$$

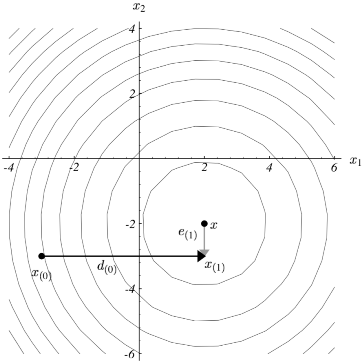


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Determinação do Mínimo da Função

Buscar as direções ortogonais $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_{n-1}$

- Erro expresso como combinação linear de $\mathbf{d}_k's$
- Um passo em cada direção
  - Elimina cada componente do erro na direção $\mathbf{d}_k$

Procedimento

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$$

- Determinação de α_k
  - $\mathbf{e}_{k+1}$ ortogonal a $\mathbf{d}_k$

$$\mathbf{d}_k^T \mathbf{e}_{k+1} = 0$$

$$\mathbf{d}_k^T (\mathbf{e}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) = 0$$

$$\alpha_k = -\frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{e}_k}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{d}_k}$$

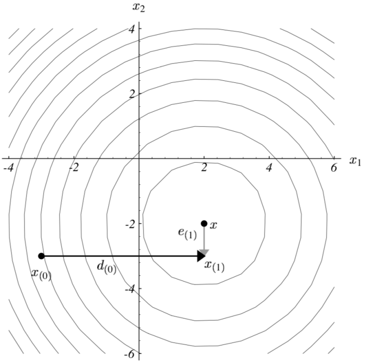


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Determinação do Mínimo da Função

Buscar as direções ortogonais $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_{n-1}$

- Erro expresso como combinação linear de $\mathbf{d}_k's$
- Um passo em cada direção
  - Elimina cada componente do erro na direção $\mathbf{d}_k$

Procedimento

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$$

- Determinação de α_k
  - $\mathbf{e}_{k+1}$ ortogonal a $\mathbf{d}_k$

$$\mathbf{d}_k^T \mathbf{e}_{k+1} = 0$$

$$\mathbf{d}_k^T (\mathbf{e}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) = 0$$

$$\alpha_k = -\frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{e}_k}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{d}_k}$$

  - Mas não conhecemos $\mathbf{e}_k$

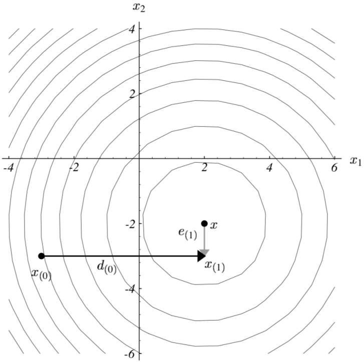


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Determinação do Mínimo da Função

Solução

- Busca em direções ortogonais em A
  - Conjugados em A

$$\mathbf{d}_i^T A \mathbf{d}_j = 0$$

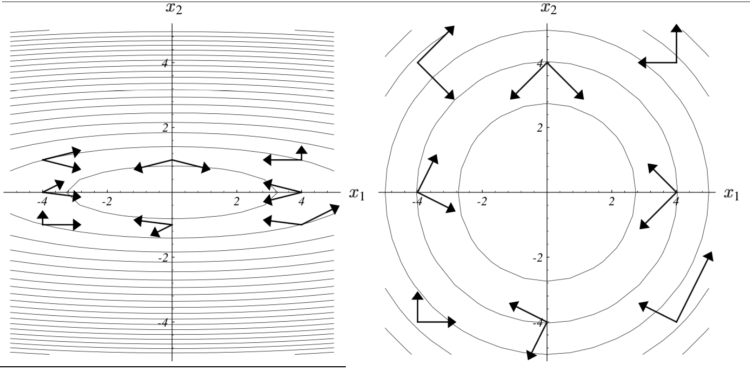


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Método dos Gradientes Conjugados

Método Gradiente Conjugado

- Aplicado a sistema cuja matriz é simétrica positiva definida

Método dos Gradientes Conjugados

Método Gradiente Conjugado

- Aplicado a sistema cuja matriz é simétrica positiva definida
- Dada uma estimativa inicial $\mathbf{x}_0$
  - Elimina, um a um, os n componentes ortoganais do erro

Método dos Gradientes Conjugados

Método Gradiente Conjugado

- Aplicado a sistema cuja matriz é simétrica positiva definida
- Dada uma estimativa inicial $\mathbf{x}_0$
  - Elimina, um a um, os n componentes ortoganais do erro
- Método direto *versus* iterativo
  - Converge para solução exata após n iterações
  - Resultado pode ser satisfatório antes de n iterações
    - Considerando uma determinada tolerância numérica

Método Gradiente Conjugado

Definição: **Produto escalar em A**

Sendo A uma matriz simétrica positiva definida, dois vetores $\mathbf{v}$ e $\mathbf{w}$ de dimensão n definem um produto escalar em A:

$$(\mathbf{v}, \mathbf{w})_A = \mathbf{v}^T A \mathbf{w}$$

- $\mathbf{v}$ e $\mathbf{w}$ são **ortogonais em** A (**conjugados**) se $\mathbf{v}^T A \mathbf{w} = 0$.

Método Gradiente Conjugado

Definição: **Produto escalar em A**

Sendo A uma matriz simétrica positiva definida, dois vetores $\mathbf{v}$ e $\mathbf{w}$ de dimensão n definem um produto escalar em A:

$$(\mathbf{v}, \mathbf{w})_A = \mathbf{v}^T A \mathbf{w}$$

- $\mathbf{v}$ e $\mathbf{w}$ são **ortogonais em A** (**conjugados**) se $\mathbf{v}^T A \mathbf{w} = 0$.

Lembrando que um produto interno entre dois vetores é zero se eles forem ortogonais

Método Gradiente Conjugado

Definição: **Produto escalar em** A

Sendo A uma matriz simétrica positiva definida, dois vetores $\mathbf{v}$ e $\mathbf{w}$ de dimensão n definem um produto escalar em A:

$$(\mathbf{v}, \mathbf{w})_A = \mathbf{v}^T A \mathbf{w}$$

- $\mathbf{v}$ e $\mathbf{w}$ são **ortogonais em** A (**conjugados**) se $\mathbf{v}^T A \mathbf{w} = 0$.

Lembrando que um produto interno entre dois vetores é zero se eles forem ortogonais

- Como A é simétrica: $(\mathbf{v}, \mathbf{w})_A = (\mathbf{w}, \mathbf{v})_A$
- Como A é positiva definida: $(\mathbf{v}, \mathbf{v})_A > 0 \ \ \forall \mathbf{v} \neq 0$

Método Gradiente Conjugado

Atualização do vetor solução

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$$

Atualização do vetor resíduo

- Sabe-se:

$$A\mathbf{x}_{k+1} + \mathbf{r}_{k+1} = A\mathbf{x}_k + \mathbf{r}_k$$

- Então:

$$\begin{aligned} A(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) + \mathbf{r}_{k+1} &= A\mathbf{x}_k + \mathbf{r}_k \\ A\mathbf{x}_k + \alpha_k A\mathbf{d}_k + \mathbf{r}_{k+1} &= A\mathbf{x}_k + \mathbf{r}_k \\ \mathbf{r}_{k+1} &= \mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{d}_k \end{aligned}$$

Método Gradiente Conjugado

De fato:

- Vimos que o resíduo é o erro transformado por A:

$$\mathbf{r}_k = -A\mathbf{e}_k$$

- Sabemos que:

$$\mathbf{e}_{k+1} = \mathbf{e}_k + \alpha\mathbf{d}_k$$

- Logo:

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha A\mathbf{d}_k$$

Método Gradiente Conjugado

Premissas

- $\mathbf{d}_k$ deve ser ortogonal a $\mathbf{r}_{k+1}$
  - $\mathbf{d}_k$ A-ortogonal a $\mathbf{e}_{k+1}$

$$\mathbf{d}_k \perp \mathbf{r}_{k+1}$$

- Próxima direção de busca
  - Conjugados em pares

$$\mathbf{d}_{k+1} A \mathbf{d}_k = 0$$

Método Gradiente Conjugado

Escolha de α_k

- Como $\mathbf{d}_k$ deve ser ortogonal a $\mathbf{r}_{k+1}$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{d}_k^T \mathbf{r}_{k+1} &= 0 \\
\mathbf{d}_k^T (\mathbf{r}_k - \alpha_k A \mathbf{d}_k) &= 0 \\
\mathbf{d}_k^T \mathbf{r}_k &= \alpha_k \mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k \\
\therefore \alpha_k &= \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k}
\end{aligned}
$$

Método Gradiente Conjugado

Escolha da nova direção de busca

- Resíduo é expresso por uma combinação linear de $\mathbf{d}_k$'s

$$\mathbf{d}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_k$$

- Direções são conjugadas entre si

$$\mathbf{d}_{k+1} A \mathbf{d}_k = 0$$

- Assim, pré-multiplicando por $\mathbf{d}_k^T A$:

$$\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_{k+1} = \mathbf{d}_k^T A \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k = 0$$

$$\therefore \beta_k = \frac{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k}$$

Método Gradiente Conjugado

Algoritmo: Gradiente Conjugado (versão inicial)

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{x}_0 = \text{estimativa inicial}\\
&\mathbf{d}_0 = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}\\
&\textbf{for}\ \ k = 0, 1, \cdots, n-1\ \ \textbf{do}\\
&\quad \textbf{if}\ \ ||\mathbf{r}_k||_2 < tol\ \ \textbf{then}\\
&\qquad \textbf{stop}\\
&\quad \alpha_k = \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k}\\
&\quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k\\
&\quad \mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A \mathbf{d}_k\\
&\quad \beta_k = \frac{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k}\\
&\quad \mathbf{d}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_k
\end{aligned}
$$

Método Gradiente Conjugado

Forma alternativa de determinar α

- Vimos que:

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k}$$

  - Temos:

$$\mathbf{d}_k = \mathbf{r}_k + \beta_k \mathbf{d}_{k-1}$$
$$\mathbf{d}_k - \mathbf{r}_k = \beta_k \mathbf{d}_{k-1}$$

  - Como $\mathbf{d}_{k-1} \perp \mathbf{r}_k$, podemos pré-multiplicar por $\mathbf{r}_k^T$:

$$\mathbf{r}_k^T \mathbf{d}_k - \mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k = \beta_k \mathbf{r}_k^T \mathbf{d}_{k-1} = 0$$
$$\mathbf{r}_k^T \mathbf{d}_k = \mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k = 0$$

  - Logo, α_k pode ser obtido por:

$$\boxed{\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k}}$$

Método Gradiente Conjugado

Forma alternativa de determinar β

- Vimos que:

$$\beta_k = \frac{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k}$$

- Que pode ser re-escrito como:

$$\boxed{\beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}}$$

Método Gradiente Conjugado

Algoritmo: Gradiente Conjugado

$$\mathbf{x}_0 = \text{estimativa inicial}$$

$$\mathbf{d}_0 = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$$

for $k = 0, 1, \cdots, n-1$ **do**

  if $||\mathbf{r}_k||_2 < tol$ **then**

    stop

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k}$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A \mathbf{d}_k$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}$$

$$\mathbf{d}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_k$$

Método Gradiente Conjugado

Uso de precondicionadores

- Diminuir o número de condicionamento de A
- Acelerar convergência

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$M^{-1}A\mathbf{x} = M^{-1}\mathbf{b}$$

  - onde M é o precondicionador

Método Gradiente Conjugado

Uso de precondicionadores

- Diminuir o número de condicionamento de A
- Acelerar convergência

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$M^{-1}A\mathbf{x} = M^{-1}\mathbf{b}$$

  - onde M é o precondicionador

Escolha do precondicionador

- O mais próximo de A possível
  - Para $M^{-1}A$ resultar numa matriz bem condicionada
- Fácil de inverter

Método Gradiente Conjugado

Uso de precondicionadores

- Diminuir o número de condicionamento de A
- Acelerar convergência

$$Ax = \mathbf{b}$$
$$M^{-1}Ax = M^{-1}\mathbf{b}$$

  - onde M é o precondicionador

Escolha do precondicionador

- O mais próximo de A possível
  - Para $M^{-1}A$ resultar numa matriz bem condicionada
- Fácil de inverter

Escolhas extremas

- $M = A$, resultaria na identidade
- $M = I$, teria inversa trivial

Método Gradiente Conjugado

Algoritmo: Gradiente Conjugado com Precondicionador

$x_0 =$ estimativa inicial

$r_0 = b - Ax$

$d_0 = z_0 = M^{-1} r_0$

for $k = 0, 1, \cdots, n-1$ **do**

  if $||r_k||_2 < tol$ **then**

    stop

$$\alpha_k = \frac{r_k^T z_k}{d_k^T A d_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$$

$$z_{k+1} = M^{-1} r_{k+1}$$

$$\beta_k = r_{k+1}^T z_{k+1} / r_k^T z_k$$

$$d_{k+1} = z_{k+1} + \beta_k d_k$$

Método Gradiente Conjugado

Precondicionador de Jacobi

$$M = D$$

- Bom quando a matriz é estritamente diagonal dominante

Método Gradiente Conjugado

Precondicionador de Jacobi

$$M = D$$

- Bom quando a matriz é estritamente diagonal dominante

Precondicionador simétrico sucessivo com sobrerelaxação (*Symmetrix Successive Over Relaxation* – SSOR)

$$M = (D + wL)D^{-1}(D + wU)$$

- com $w \in [0, 2]$
  - Se $w = 0$, tem-se Jacobi
  - Se $w = 1$, tem-se Gauss-Seidel

Método Gradiente Conjugado

Precondicionador de Jacobi

$$M = D$$

- Bom quando a matriz é estritamente diagonal dominante

Precondicionador simétrico sucessivo com sobrerelaxação (*Symmetrix Successive Over Relaxation* – SSOR)

$$M = (D + wL)D^{-1}(D + wU)$$

- com $w \in [0, 2]$
  - Se $w = 0$, tem-se Jacobi
  - Se $w = 1$, tem-se Gauss-Seidel

Resolução de $M\mathbf{z} = \mathbf{r}$

- Precondiconador SSOR é um produto de matrizes triangulares

$$(I + wLD^{-1})(D + wU)$$

Exercícios propostos

1. Qual a diferença entre o Método de Jacobi e o Método de Gauss-Seidel para solução iterativa de sistemas lineares?
2. No Método Gradiente Conjugado, qual a importância do uso de pré-condicionadores? O pré-condicionador de Jacobi é dado por $M = D$; em que situações ele é adequado?
3. Sabe-se que o Método Gradiente Conjugado garantidamente converge após n iterações. Como cada iteração tem complexidade $O(n^2)$, devido às operações de multiplicação de matriz por vetor, garante-se que o método chega a solução do sistema em $O(n^3)$. O método de Eliminação de Gauss também tem complexidade $O(n^3)$. Descreva um cenário onde o método Gradiente Conjungado apresenta ordem de complexidade linear ($O(n)$).