# Gradiente conjugado

O gradiente conjugado é um método numérico para a solução de sistemas de equações lineares, do tipo , onde é uma matriz quadrada simétrica () e positiva-definida (). O método pertence a uma família maior de métodos iterativos chamados de “métodos de subespaço de Krylov” [1]. Baseados no teorema de Cayley-Hamilton que diz que a inversa de uma matriz pode ser escrita como uma combinação linear de suas potencias [1]. Assim o subespaço de Krylov é uma aproximação do teorema sendo é dado por:

Onde é o número de iterações. A ideia por traz do método do gradiente conjugado é explorar as relação de conjugado, sendo dois vetores não zero e estes são ditos conjugados com respeito a transformação se:

Como é uma matriz simétrica positivo-definida a relação acima define um produto interno, onde conjugados são ortogonais com relação à . Dessa forma é possível escrever uma base formada por vetores mutualmente conjugados (ortogonais) :

Sendo assim podemos escrever nosso vetor solução do sistema como uma combinação linear dos vetores de ,

Multiplicando por um vetor qualquer pertencente a base :

Onde o somatório some devido a ortogonalidade dos vetores e assim temos por fim:

A implementação iterativa do método consiste em buscar os valores de , sendo assim a vantagem computacional do método do gradiente conjugado advim do fato de que usualmente precisamos de poucos vetores para representar a solução com boa precisão numérica, não precisando operar em ordem dessa forma realizamos apenas algumas operações do tipo que são computacionalmente corriqueiras.

A maior desvantagem do método do gradiente conjugado é sua instabilidade, sendo comumente empregada a técnica de pré-condicionamento para melhorar a convergência. O pré-condicionamento consiste em pré-multiplicar o sistema linear por uma matriz que melhora as características do sistema para a resolução com o método, para o gradiente conjugado é utilizada uma matriz simétrica positiva-definida que deve ser fixa, tal que:

Logo:

Por fim temos o seguinte algoritmo para o método do gradiente conjugado pré-condicionado:

|  |
| --- |
| \mathbf{r}_0 := \mathbf{b} - \mathbf{A x}_0  \mathbf{z}_0 := \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r}_0  \mathbf{p}_0 := \mathbf{z}_0  k := 0 \,  Enquanto  \alpha_k := \frac{\mathbf{r}_k^\mathrm{T} \mathbf{z}_k}{\mathbf{p}_k^\mathrm{T} \mathbf{A p}_k}  \mathbf{x}_{k+1} := \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k  \mathbf{r}_{k+1} := \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A p}_k  **se**  \mathbf{z}_{k+1} := \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r}_{k+1}  \beta_k := \frac{\mathbf{z}_{k+1}^\mathrm{T} \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{z}_k^\mathrm{T} \mathbf{r}_k}  \mathbf{p}_{k+1} := \mathbf{z}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k  k := k + 1 \,  O resultado é **x***k*+1 |

Onde é a tolerância desejada e é o máximo tolerado de iterações. Na implementação em Fortran77 foi utilizado o armazenamento do tipo skyline para a matriz e a matriz foi escolhida como os elementos da diagonal de , .