MAC300 / MAC6920 / MAP5904 – Métodos Numéricos de Álgebra Linear Exercício Programa 4

Métodos iterativos para sistemas lineares: Gradientes Conjugados

Este exercício programa tem como objetivo estudar métodos iterativos para sistemas lineares. Os métodos diretos para sistemas lineares são métodos que num número finito de passos resolvem o problema. Em contraposição a isso, os métodos iterativos são métodos que geram uma seqüência de pontos que, sob certas hipóteses, converge à solução do problema.

Evidentemente, a primeira pergunta que surge é: por que utilizar um método iterativo se podemos usar um método direto? A resposta é simples: nem sempre podemos utilizar um método direto. Ou, quiçá, podemos sim, mas é caro demais. Exemplos disso são: (i) a matriz é tão grande que não consigo armazená-la no computador; (ii) consigo armazená-la, mas ela é tão grande que fazer $O(n^3)$ operações é muito demorado.

O método de Gradientes Conjugados para sistemas lineares, objeto de estudo deste exercício programa, é um método iterativo para resolver sistemas de equações lineares da forma Ax = b com A definida positiva. A cada iteração o método precisa, dado um vetor v, calcular o produto Av. Essa é a única operação no método onde aparece a matriz A. Isto permite que, na implementação, dependendo do formato da matriz A, o cálculo desse produto seja muito mais rápido do que alguma coisa $O(n^2)$. Já com isso, se o método precisasse de n iterações, o seu custo total seria menor do que $O(n^3)$. Porém, dá para fazer mais ainda, pois, provavelmente, sejam necessárias menos do que n iterações para obter uma boa aproximação da solução. E o que é uma boa aproximação?

O que deve ser feito:

- Ler os capítulos 32 e 38 de [1]. O primeiro trata de métodos iterativos em geral e o segundo trata de gradientes conjugados em particular.
- Fazer um resumo descrevendo o método de Gradientes Conjugados.
- Implementar o método de Gradientes Conjugados. A implementação deve permitir resolver sistemas lineares com matrizes "bem grandes" e esparsas (poucos elementos não nulos). No relatório, explique quais foram os motivos pelos quais não resolveu sistemas maiores dos que resolveu.
- Fazer experimentos com o método e, quando possível, comparar com Cholesky. Estes experimentos devem, no mínimo, reproduzir o exemplo do Capítulo 38 de [1]. Mas você deve também inventar alguma forma de gerar matrizes "bem grandes", esparsas e definidas positivas (ou pode também procurar matrizes que, de alguma forma, saiba-se que têm essas propriedades).
- Fazer um relatório explicando TUDO o que você fez e analisando os resultados obtidos. Veja que o relatório será o reflexo de tudo o que você fez e, portanto, será a parte mais importante deste exercício-programa.

[1] Lloyd N. Trefethen, David Bau, Numerical Linear Algebra, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1997.