

Matemática Numérica Avançada

Pedro H A Konzen

28 de março de 2022

Licença

Este trabalho está licenciado sob a Licença Atribuição-CompartilhaIgual 4.0 Internacional Creative Commons. Para visualizar uma cópia desta licença, visite http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.pt_BR ou mande uma carta para Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

Prefácio

Nestas notas de aula são abordados métodos numéricos aplicados a problemas de grande porte. Como ferramenta computacional de apoio, exemplos de aplicação de códigos [Python](#), são apresentados, mais especificamente, códigos com suporte das bibliotecas [NumPy](#) e [SciPy](#).

Agradeço a todos e todas que de modo assíduo ou esporádico contribuem com correções, sugestões e críticas. :)

Pedro H A Konzen

Sumário

Capa	i
Licença	ii
Prefácio	iii
Sumário	iv
1 Sistemas Lineares	1
1.1 Matrizes Esparsas	1
1.1.1 Sistemas Tridiagonais	3
1.1.2 Matrizes Banda	6
1.1.3 Esquemas de Armazenamento	11
1.2 Métodos Iterativos	16
1.2.1 GMRES	16
1.2.2 Método do Gradiente Conjugado	21
1.2.3 Precondicionamento	27
2 Sistemas Não Lineares e Otimização	30
2.1 Método de Newton	30
2.2 Método Tipo Newton	33
2.2.1 Atualização Cíclica da Matriz Jacobiana	34
2.3 Problemas de Minimização	35
2.3.1 Métodos de declive	36
2.3.2 Método do Gradiente	37
Referências Bibliográficas	41

Capítulo 1

Sistemas Lineares

[Vídeo] | [Áudio] | [\[Contatar\]](#)

Neste capítulo, apresentam-se métodos numéricos para a resolução de sistemas lineares de grande porte. Salvo explicitado ao contrário, assume-se que os sistemas são quadrados e têm solução única.

1.1 Matrizes Esparsas

[Vídeo] | [Áudio] | [\[Contatar\]](#)

Uma matriz é dita ser **esparsa** quando ela tem apenas poucos elementos não nulos. A ideia é que os elementos não nulos não precisam ser guardados na memória do computador, gerando um grande benefício na redução da demanda de armazenamento de dados. O desafio está no desenvolvimento de estruturas de dados para a alocação eficiente de tais matrizes, i.e. que sejam suficientemente adequadas para os métodos numéricos conhecidos.

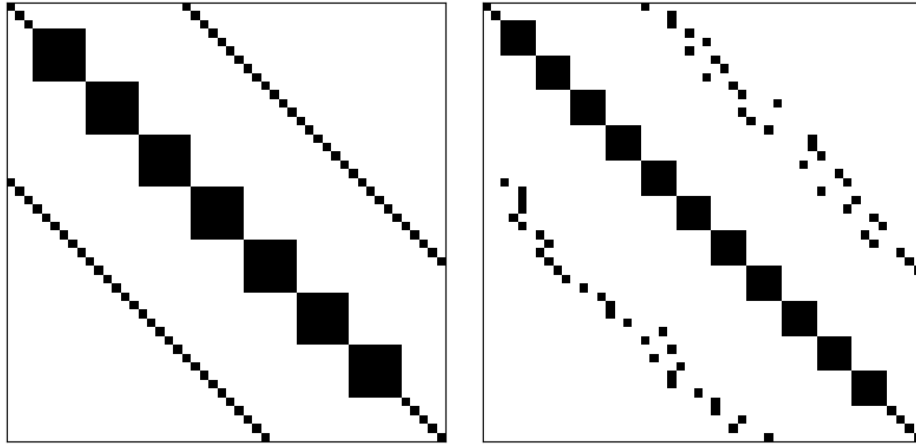


Figura 1.1: Esquerda: exemplo de uma matriz esparsa estruturada. Direita: exemplo de uma matriz esparsa não-estruturada.

Matrizes esparsas podem ser classificadas como **estruturadas** ou **não-estruturadas**. Uma matriz estruturada é aquela em que as entradas não-nulas formam um padrão regular. Por exemplo, estão dispostas em poucas diagonais ou formam blocos (submatrizes densas) ao longo de sua diagonal principal. No caso de não haver um padrão regular das entradas não-nulas, a matriz esparsa é dita ser não-estruturada. Consulte a Figura 1.1 para exemplos.

A **esparsidade** de uma matriz é a porcentagem de elementos nulos que ela tem, i.e. para uma matriz quadrada $n \times n$ tem-se que a esparsidade é

$$\frac{n_{\text{nulos}}}{n^2} \times 100\% \quad (1.1)$$

Por exemplo, a matriz identidade de tamanho $n = 100$ tem esparsidade

$$\frac{100^2 - 100}{100^2} \times 100\% = 99\% \quad (1.2)$$

1.1.1 Sistemas Tridiagonais

Um sistema tridiagonal tem a seguinte forma matricial

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

com, $a_1 = 0$ e $c_n = 0$. Ou seja, é um sistema cuja a matriz dos coeficientes é tridiagonal.

Uma **matriz tridiagonal** é uma matriz esparsa estruturada. Mais especificamente, é chamada de **matriz banda**, em que os elementos não nulos estão apenas em algumas de suas diagonais. Para armazenarmos tal matriz precisamos alocar apenas os seguintes três vetores

$$a = (0, a_2, \dots, a_n) \quad (1.4)$$

$$b = (b_1, b_2, \dots, b_n) \quad (1.5)$$

$$c = (c_1, c_2, \dots, c_{n-1}, 0) \quad (1.6)$$

Ou seja, precisamos armazenar $3n$ pontos flutuantes em vez de n^2 , como seria o caso se a matriz dos coeficientes fosse densa.

Algoritmo de Thomas

O Algoritmo de Thomas¹ é uma forma otimizada do Método de Eliminação Gaussiana aplicada à sistemas tridiagonais. Enquanto este requer $O(n^3)$ operações, esse demanda apenas $O(n)$.

Eliminando os termos abaixo da diagonal em (1.3), obtemos o sistema equivalente

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_1 & c_1 & & & 0 \\ & \tilde{b}_2 & c_2 & & \\ & & \tilde{b}_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & & \tilde{b}_n & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{d}_1 \\ \tilde{d}_2 \\ \tilde{d}_3 \\ \vdots \\ \tilde{d}_n \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

¹Llewellyn Hilleth Thomas, 1903 - 1992, físico e matemático aplicado britânico. Fonte: [Wikipedia](#).

Este é obtido pela seguinte iteração

$$w := \frac{a_i}{b_{i-1}} \quad (1.8)$$

$$b_i := b_i - wc_{i-1} \quad (1.9)$$

$$d_i := d_i - wd_{i-1} \quad (1.10)$$

onde, o \sim foi esquecido de propósito, indicando a reutilização dos vetores b e d . A solução do sistema é, então, obtida de baixo para cima, i.e.

$$x_n = \frac{d_n}{b_n} \quad (1.11)$$

$$x_i = \frac{d_i - c_i x_{i+1}}{b_i}, \quad (1.12)$$

com $i = n-1, n-2, \dots, 1$.

Listing 1.1: Algoritmo de Thomas

```

1 import numpy as np
2
3 def TDMA(a,b,c,d):
4     n = b.size
5     for i in np.arange(1,n):
6         w = a[i]/b[i-1]
7         b[i] = b[i] - w*c[i-1]
8         d[i] = d[i] - w*d[i-1]
9     x = np.empty(n)
10    x[n-1] = d[n-1]/b[n-1]
11    for i in np.arange(n-2,-1,-1):
12        x[i] = (d[i] - c[i]*x[i+1])/b[i]
13    return x

```

Exercício 1.1.1. Considere o seguinte sistema linear

$$2x_1 - x_2 = 0 \quad (1.13)$$

$$x_{i-1} - 3x_i + 4x_{i+1} = \sin\left(i\frac{\pi}{2(n-1)}\right) \quad (1.14)$$

$$x_{n-1} + x_n = 1 \quad (1.15)$$

a) Compute sua solução usando o Algoritmo de Thomas para $n = 3$.

- b) Compare a solução obtida no item anterior com a gerada pela função `scipy.linalg.solve`.
- c) Compare a solução com a obtida no item anterior com a gerada pela função `scipy.linalg.solve_banded`.
- d) Use o módulo `Python timeit` para comprar a demanda de tempo computacional de cada um dos métodos acima. Compute para $n = 10, 100, 1000, 10000$.

Exercício 1.1.2. Considere que o problema de valor de contorno (PVC)

$$-u'' = \sin \pi x, \quad 0 < x < 1, \quad (1.16)$$

$$u(0) = 0, \quad (1.17)$$

$$u(1) = 0 \quad (1.18)$$

seja simulado com o Método das Diferenças Finitas². Vamos assumir uma discretização espacial uniforme com n nodos e tamanho de malha

$$h = \frac{1}{n-1}. \quad (1.19)$$

Com isso, temos os nodos $x_i = (i-1)h$, $i = 1, 2, \dots, n$. Nos nodos internos, aplicamos a fórmula de diferenças central

$$u''(x_i) \approx \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2}, \quad (1.20)$$

onde, $u_i \approx u(x_i)$. Com isso, a discretização da EDO fornece

$$-\frac{1}{h^2}u_{i-1} + \frac{2}{h^2}u_i - \frac{1}{h^2}u_{i+1} = \sin \pi x_i \quad (1.21)$$

para $i = 2, 3, \dots, n-1$. Das condições de contorno temos $u_1 = u_n = 0$. Logo, o problema discreto lê-se: encontrar $u = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$u_1 = 0 \quad (1.22)$$

$$-\frac{1}{h^2}u_{i-1} + \frac{2}{h^2}u_i - \frac{1}{h^2}u_{i+1} = \sin \pi x_i \quad (1.23)$$

$$u_n = 0 \quad (1.24)$$

²Consulte mais em [Notas de Aula: Matemática Numérica](#).

- a) Calcule a solução analítica do PVC.
- b) Use a função `scipy.linalg.solve_banded` para computar a solução do problema discreto associado para diferentes tamanhos de malha $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$. Compute o erro da solução discreta em relação à solução analítica.
- c) Compare a demanda de tempo computacional se a função `scipy.linalg.solve` for empregada na computação da solução discreta.

1.1.2 Matrizes Banda

Uma matriz banda é aquela em que os elementos não nulos estão dispostos em apenas algumas de suas diagonais. Consulte a Figura 1.2.

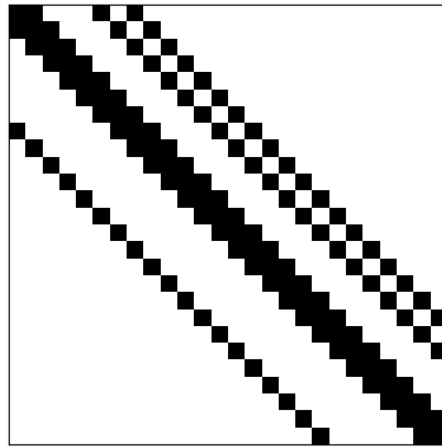


Figura 1.2: Exemplo de uma matriz banda.

Exemplo 1.1.1. Consideremos o seguinte problema de Poisson³

$$-\Delta u = f(x, y), (x, y) \in (0, \pi) \times (0, \pi), \quad (1.25)$$

$$u(0, y) = 0, y \in [0, \pi], \quad (1.26)$$

$$u(\pi, y) = 0, y \in [0, \pi], \quad (1.27)$$

$$u(x, 0) = 0, x \in [0, \pi], \quad (1.28)$$

$$u(x, \pi) = 0, x \in [0, \pi]. \quad (1.29)$$

Para fixarmos as ideias, vamos assumir

$$f(x, y) = \text{sen}(x) \text{sen}(y) \quad (1.30)$$

Vamos empregar o Método de Diferenças Finitas⁴ para computar uma aproximação para a sua solução. Começamos assumindo uma malha uniforme de n^2 nodos

$$x_i = (i - 1)h \quad (1.31)$$

$$y_j = (j - 1)h \quad (1.32)$$

com tamanho de malha $h = \pi/(n - 1)$, $i = 1, 2, \dots, n$ e $j = 1, 2, \dots, n$. Empregando a Fórmula de Diferenças Central⁵ encontramos o seguinte problema discreto associado

$$u_{i,1} = u_{1,j} = 0 \quad (1.33)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{h^2}u_{i-1,j} - \frac{1}{h^2}u_{i,j-1} + \frac{4}{h^2}u_{i,j} \\ & -\frac{1}{h^2}u_{i+1,j} - \frac{1}{h^2}u_{i,j+1} = f(x_i, y_j) \end{aligned} \quad (1.34)$$

$$u_{i,n} = u_{n,j} = 0 \quad (1.35)$$

Este é um sistema linear $n^2 \times n^2$. Tomando em conta as condições de contorno, ele pode ser reduzido a um sistema $(n - 2)^2 \times (n - 2)^2$

$$Aw = b \quad (1.36)$$

³Baron Siméon Denis Poisson, 1781 - 1840, matemático, engenheiro e físico francês. Fonte: [Wikipedia](#).

⁴Observamos que $\Delta u = u_{xx} + u_{yy}$.

⁵Consulte mais em [Notas de Aula: Matemática Numérica](#).

usando a enumeração das incógnitas $(i, j) \rightarrow k = i - 1 + (j - 2)(n - 2)$, i.e.

$$u_{i,j} = w_{k=i-1+(j-2)(n-2)}, \quad i, j = 2, \dots, n-2 \quad (1.37)$$

Consulte a Figura 1.3 para uma representação da enumeração em relação a malha.

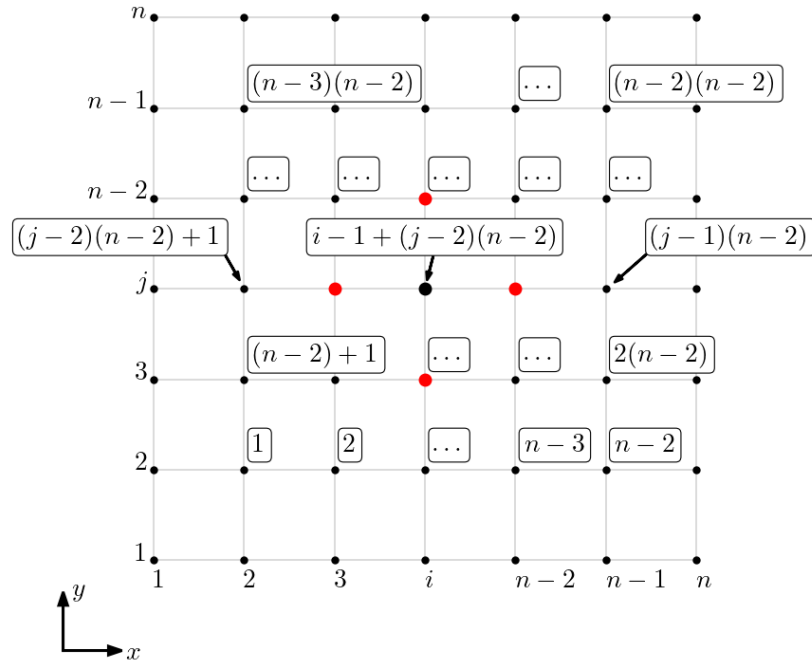


Figura 1.3: Representação da enumeração das incógnitas referente ao problema discutido no Exercício 1.1.1.

Afim de obtermos uma matriz diagonal dominante, vamos ordenar as equações do sistema discreto como segue

- $j = 2, i = 2$:

$$4w_k - w_{k+1} - w_{k+n-2} = h^2 f_{i,j} \quad (1.38)$$

- $j = 2, i = 3, \dots, n-2$:

$$-w_{k-1} + 4w_k - w_{k+1} - w_{k+n-2} = h^2 f_{i,j} \quad (1.39)$$

- $j = 2, i = n - 1$:

$$-w_{k-1} + 4w_k - w_{k+n-2} = h^2 f_{i,j} \quad (1.40)$$

- $j = 3, \dots, n - 2, i = 2$:

$$-w_{k-(n-2)} + 4w_k - w_{k+1} - w_{k+n-2} = h^2 f_{i,j} \quad (1.41)$$

- $j = 3, \dots, n - 2, i = 3, \dots, n - 2$:

$$-w_{k-1} - w_{k-(n-2)} + 4w_k - w_{k+1} - w_{k+n-2} = h^2 f_{i,j} \quad (1.42)$$

- $j = 3, \dots, n - 2, i = n - 1$:

$$-w_{k-1} - w_{k-(n-2)} + 4w_k - w_{k+n-2} = h^2 f_{i,j} \quad (1.43)$$

- $j = n - 1, i = 2$:

$$-w_{k-(n-2)} + 4w_k - w_{k+1} = h^2 f_{i,j} \quad (1.44)$$

- $j = n - 1, i = 3, \dots, n - 2$:

$$-w_{k-1} - w_{k-(n-2)} + 4w_k - w_{k+1} = h^2 f_{i,j} \quad (1.45)$$

- $j = n - 1, i = n - 1$:

$$-w_{k-1} - w_{k-(n-2)} + 4w_k = h^2 f_{i,j} \quad (1.46)$$

Com isso, obtemos uma matriz com 5 bandas, consulte a Figura 1.4.

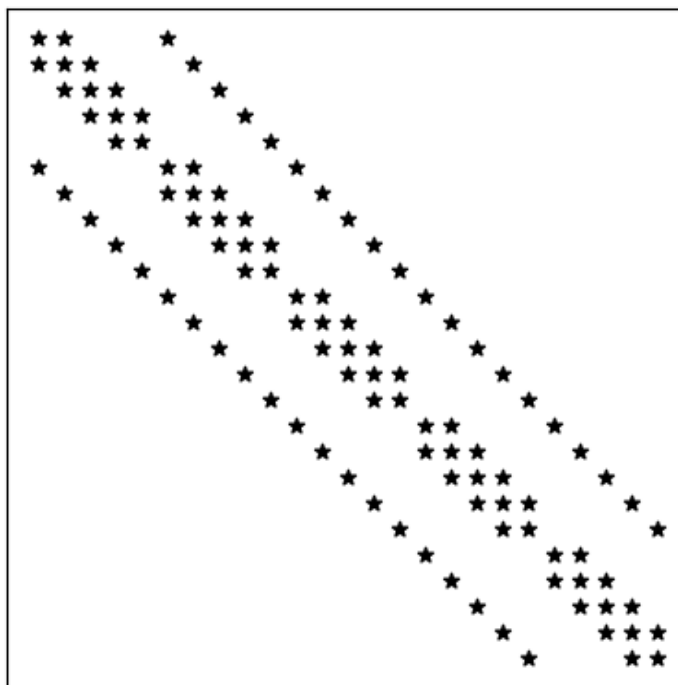


Figura 1.4: Representação da matriz do sistema discreto construído no Exemplo 1.1.1.

Exercício 1.1.3. Consideremos o problema trabalho no Exemplo 1.1.1.

- a) Use a função `scipy.linalg.solve` para computar a solução do problema discreto associado para diferentes tamanhos de malha $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$. Compute o erro da solução discreta em relação à solução analítica. Compare as aproximações com a solução analítica

$$u(x, y) = \frac{1}{2} \sin(x) \sin(y). \quad (1.47)$$

- b) Compare a demanda de tempo e memória computacional se a função `scipy.linalg.solve_banded` for empregada na computação da solução discreta.
- c) Baseado no Algoritmo de Thomas, implemente o Método de Eliminação

Gaussiana otimizado para a matriz banda deste problema. Compare com as abordagens dos itens a) e b).

1.1.3 Esquemas de Armazenamento

A ideia é armazenar apenas os elementos não-nulos de uma matriz esparsa, de forma a economizar a demanda de armazenamento computacional. Cuidados devem ser tomados para que a estrutura de armazenamento utilizada seja adequada para a computação das operações matriciais mais comuns.

Formato COO

O formato COO (*COOrdinate format*) é o esquema de armazenamento mais simples. A estrutura de dados consiste em três arranjos: (1) um arranjo contendo as entradas não-nulas da matriz; (2) um arranjo contendo seus índices de linha; (3) um arranjo contendo seus índices de coluna.

Exemplo 1.1.2. Consideremos a seguinte matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2. & 0. & 1. & 0. \\ 0. & 3. & 2. & -1. \\ 0 & -1 & -2. & 0. \\ 0 & 0 & 0 & 1. \end{bmatrix} \quad (1.48)$$

O formato COO está disponível na biblioteca SciPy com o método [scipy.sparse.coo_matrix](#)⁶. Neste caso, temos

```
1     import numpy as np
2     import scipy as sp
3     from scipy.sparse import coo_matrix
4
5     data = np.array([2.,1.,3.,2.,-1.,-1.,-2.,1.])
6     row = np.array([0,0,1,1,1,2,2,3])
7     col = np.array([0,2,1,2,3,1,2,3])
8     coo = coo_matrix((data, (row, col)), shape=(4,4))
9     print("coo = \n", coo)
10    print("A = \n", coo.toarray())
```

⁶Versões recentes do SciPy estão migrando para a nomenclatura do NumPy. Consulte mais em [SciPy Sparse](#).

- Vantagens do formato COO são:
 - permite a entrada de dados duplicados (simplicidade);
 - possível conversão rápida entre os formatos CSR e CSC⁷.
- Desvantagens do formato COO são:
 - complexidade em operações aritméticas;
 - complexidade na extração de submatrizes.

Observação 1.1.1. O SciPy conta com vários métodos para o tratamento e operação com matrizes esparsas armazenadas no formato COO. Consulte mais em [scipy.sparse.coo_matrix](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/sparse.coo_matrix.html).

Formato CSR

O formato *Compressed Sparse Row* (CSR) é uma variação do COO que busca diminuir a alocação de dados repetidos. Assim como o COO, o formato conta com três arranjos d , c , p :

- d é o arranjo contendo os elementos não-nulos da matriz, ordenados por linhas (i.e., da esquerda para direita, de cima para baixo);
- c é o arranjo contendo o índice das colunas das entradas não-nulas da matriz (como no formato COO);
- p é um arranjo cujos elementos são a posição no arranjo c em que cada linha da matriz começa a ser representada. O número de elementos de i -ésima linha da matriz dado por $p_{j+1} - p_j$.

Exemplo 1.1.3. No Exemplo 1.1.2, alocamos a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2. & 0. & 1. & 0. \\ 0. & 3. & 2. & -1. \\ 0 & -1 & -2. & 0. \\ 0 & 0 & 0 & 1. \end{bmatrix} \quad (1.49)$$

no formato COO. Aqui, vamos converter a alocação para o formato CSR e, então, verificar seus atributos.

⁷Estes formatos são mais eficientes para a computação matricial e são apresentados na sequência.


```
1 from scipy.sparse import csr_matrix
2 csr = coo.tocsr()
3 d = csr.data
4 c = csr.indices
5 p = csr.indptr
6 print(d)
7 print(c)
8 print(p)
```

Para fixarmos as ideias, temos

$$d = (2., 1., 3., 2., -1., -1., -2., 1.) \quad (1.50)$$

$$c = (0, 2, 1, 2, 3, 1, 2, 3) \quad (1.51)$$

$$p = (0, 2, 5, 7, 8) \quad (1.52)$$

Assim sendo, o elemento $p[i=2] = 5$ aponta para o $c[k=5] = 1$, o que fornece que $A[i=2, j=1] = d[k] = -1$. Verifique!

- Vantagens do formato CSR:
 - operações aritméticas eficientes;
 - fatiamento por linhas eficiente;
 - multiplicação matriz vetor eficiente.
- Desvantagens do formato CSR:
 - fatiamento por colunas não eficiente;
 - custo elevado de realocamento com alteração da esparsidade da matriz.

Observação 1.1.2. O SciPy conta com vários métodos para o tratamento e operação com matrizes esparsas armazenadas no formato CSR. Consulte mais em [scipy.sparse.csr_matrix](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/sparse.csr_matrix.html).

Formato CSC

O formato *Compressed Sparse Column* (CSC) é uma variação análoga do CSR, mas para armazenamento por colunas. O formato conta com três arranjos d , l , p :

- d é o arranjo contendo os elementos não-nulos da matriz, ordenados por colunas (i.e., de cima para baixo, da esquerda para direita);
- l é o arranjo contendo o índice das linhas das entradas não-nulas da matriz;
- p é um arranjo cujos elementos são a posição no arranjo l em que cada coluna da matriz começa a ser representada. O número de elementos de j -ésima coluna da matriz dado por $p_{j+1} - p_j$.

Exemplo 1.1.4. No Exemplo 1.1.2, alocamos a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2. & 0. & 1. & 0. \\ 0. & 3. & 2. & -1. \\ 0 & -1 & -2. & 0. \\ 0 & 0 & 0 & 1. \end{bmatrix} \quad (1.53)$$

no formato COO. Aqui, vamos converter a alocação para o formato CSC e, então, verificar seus atributos.

```

1      from scipy.sparse import csc_matrix
2      csc = coo.tocsc()
3      d = csc.data
4      l = csc.indices
5      p = csc.indptr
6      print(d)
7      print(l)
8      print(p)
```

Para fixarmos as ideias, temos

$$d = (2., 3., -1., 1., 2., -2., -1., 1.) \quad (1.54)$$

$$l = (0, 1, 2, 0, 1, 2, 1, 3) \quad (1.55)$$

$$p = (01368) \quad (1.56)$$

Assim sendo, o elemento $p[j=2] = 3$ aponta para o $l[k=3] = 0$, o que informa que $A[i=0, j=2] = d_{\{k\}=1}$. Verifique!

- Vantagens do formato CSC:
 - fatiamento por colunas eficiente;
 - operações aritméticas eficientes;

- multiplicação matriz vetor eficiente⁸.
- Desvantagens do formato CSC:
 - fatiamento por linhas não eficiente;
 - custo elevado de realocamento com alteração da esparsidade da matriz.

Observação 1.1.3. O SciPy conta com vários métodos para o tratamento e operação com matrizes esparsas armazenadas no formato CSC. Consulte mais em [scipy.sparse.csc_matrix](#).

Observação 1.1.4. Além dos formatos COO, CSR e CSC, existem ainda vários outros que podem empregados e que são mais eficientes em determinadas aplicações. Recomendamos a leitura de [4, Seção 3.4] e da documentação do [scipy.sparse](#).

Exercício 1.1.4. Considere o problema de Poisson dado no Exemplo 1.1.1.

- a) Armazene a matriz do problema discreto associado usando o formato COO.
- b) Converta a matriz armazenada para o formato CSR⁹. Então, compute a solução do problema discreto com o método [spsolve](#)¹⁰.
- c) Converta a matriz armazenada para o formato CSC¹¹. Então, compute a solução do problema discreto com o método [spsolve](#).
- d) Compare a eficiência da computação entre os itens b) e c) para tamanhos de malha $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$.

⁸CSR é mais eficiente em muitos casos.

⁹Use o método [coo_matrix.tocsr\(\)](#).

¹⁰[scipy.sparse.linalg.spsolve](#) é uma implementação do Método LU otimizado para matrizes esparsas.

¹¹Use o método [coo_matrix.tocsc\(\)](#).

1.2 Métodos Iterativos

1.2.1 GMRES

O GMRES (do inglês, *Generalized Minimal Residual Method*¹²) é um Método de Subespaço de Krylov e é considerado uma das mais eficientes técnicas para a resolução de sistemas lineares gerais e de grande porte (esparsos).

Método de Subespaço de Krylov

A ideia básica é resolver o sistema linear

$$Ax = b \quad (1.57)$$

por um **método de projeção**. Mais especificamente, busca-se uma solução aproximada $x_m \in \mathbb{R}^n$ no subespaço afim $x_0 + \mathcal{K}_m$ de dimensão m , impondo-se a **condição de Petrov¹³-Galerkin¹⁴**

$$b - Ax_m \perp \mathcal{L}_m, \quad (1.58)$$

onde \mathcal{L}_m também é um subespaço de dimensão m . Quando \mathcal{K}_m é um **subespaço de Krylov¹⁵**, i.e.

$$\mathcal{K}_m(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{m-1}r_0\}, \quad (1.59)$$

temos o Método de Subespaço de Krylov. Aqui, temos o **resíduo**

$$r_0 = b - Ax_0, \quad (1.60)$$

sendo x_0 uma aproximação inicial para a solução do sistema. Notemos que com isso, temos que a aproximação calculada é tal que

$$A^{-1}b \approx x_m = x_0 + q_{m-1}(A)r_0, \quad (1.61)$$

onde q_{m-1} é um dado polinômio de grau $m-1$. No caso particular de $x_0 = 0$, temos

$$A^{-1}b \approx q_{m-1}(A)x_0. \quad (1.62)$$

Diferentes versões deste método são obtidas pelas escolhas do subespaço \mathcal{L}_m e formas de preconditionamento do sistema.

¹²Desenvolvido por Yousef Saad e H. Schultz, 1986. Fonte: [Wikipedia](#).

¹³Georgi Iwanowitsch Petrov, 1912 - 1987, engenheiro soviético. Fonte: [Wikipedia](#).

¹⁴Boris Galerkin, 1871 - 1945, engenheiro e matemático soviético. Fonte: [Wikipédia](#).

¹⁵Alexei Nikolajewitsch Krylov, 1863 - 1945, engenheiro e matemático russo. Fonte: [Wikipédia](#).

GMRES

O GMRES é um Método de Subespaço de Krylov assumindo $\mathcal{L}_m = A\mathcal{K}_m$, com

$$\mathcal{K}_m = \mathcal{K}_m(A, v_1) = \text{span}\{v_1, Av_1, \dots, A^{m-1}v_1\}, \quad (1.63)$$

onde $v_1 = r_0/\|r_0\|$ é o vetor unitário do resíduo $r_0 = b - Ax_0$ para uma dada aproximação inicial x_0 da solução do sistema $Ax = b$.

Vamos derivar o método observando que qualquer vetor x em $x_0 + \mathcal{K}_m$ pode ser escrito como segue

$$x = x_0 + V_m y \quad (1.64)$$

onde, $V_m = [v_1, \dots, v_m]$ é a matriz $n \times m$ cujas colunas formam uma base ortogonal $\{v_1, \dots, v_m\}$ de \mathcal{K}_m e $y \in \mathbb{R}^m$. Aqui, V_m é computada usando-se o seguinte **Método de Arnoldi¹⁶- Gram¹⁷-Schmidt¹⁸ Modificado** [4, Subseção 6.3]:

1. Dado v_1 de norma 1

2. Para $j = 1, \dots, m$:

(a) $w_j := Av_j$

(b) Para $i = 1, \dots, j$:

i. $h_{i,j} := (w_j, v_i)$

ii. $w_j := w_j - h_{i,j}v_i$

(c) $h_{j+1,j} := \|w_j\|$

(d) Se $h_{j+1,j} = 0$, então pare.

(e) $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$

Seja, então, $\bar{H}_m = [h_{i,j}]_{i,j=1}^{m+1,m}$ a matriz de Hessenberg¹⁹ cujas entradas não nulas são computadas pelo algoritmo acima (Passos 2(a)i-ii). Pode-se

¹⁶Walter Edwin Arnoldi, 1917 - 1995, engenheiro americano estadunidense. Fonte: [Wikipédia](#).

¹⁷Jørgen Pedersen Gram, 1850 - 1916, matemático dinamarquês. Fonte: [Wikipédia](#).

¹⁸Erhard Schmidt, 1876 - 1959, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

¹⁹Karl Adolf Hessenberg, 1904 - 1959, engenheiro e matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

mostrar²⁰ que

$$J(y) = \|b - Ax\| \quad (1.65)$$

$$= \|b - A(x_0 + V_my)\| \quad (1.66)$$

$$= \|\beta e_1 - \tilde{H}_m y\| \quad (1.67)$$

onde, $\beta = \|r_0\|$.

A aproximação GMRES x_m é então computada como

$$x_m = x_0 + V_my_m, \quad (1.68)$$

$$y_m = \min_y \|\beta e_1 - \tilde{H}_m y\| \quad (1.69)$$

Observamos que este último é um pequeno problema de minimização, sendo que requer a solução de um sistema $(m+1) \times m$ de mínimos quadrados, sendo m normalmente pequeno.

Em resumo, a solução GMRES x_m é computada seguindo os seguintes passos:

1. Escolhemos uma aproximação inicial x_0 para a solução de $Ax = b$.
2. Calculamos o resíduo $r_0 = b - Ax_0$.
3. Calculamos o vetor unitário $v_1 = r_0/\|r_0\|$.
4. Usamos o Método de Arnoldi-Gram-Schmidt Modificado para calculamos uma base ortogonal V_m de \mathcal{K}_m e a matriz de Hessenberg \tilde{H}_m associada.
5. Calculamos $y_m = \min_y \|\beta e_1 - \tilde{H}_m y\|$.
6. Calculamos $x_m = x_0 + V_my$.

Observação 1.2.1 (Convergência). Pode-se mostrar que o GMRES converge em ao menos n passos.

Observação 1.2.2 (GMRES com a ortogonalização de Householder). No algoritmo acima, o Método Modificado de Gram-Schmidt é utilizado no processo de Arnoldi. Uma versão numericamente mais eficiente é obtida quando a **Transformação de Householder**²¹ é utilizada. Consulte mais em [4, Subsection 6.5.2].

²⁰Consulte [4, Proposição 6.5].

²¹Alston Scott Householder, 1904 - 1993, matemático americano estadunidense. Fonte: Wikipédia.

Observação 1.2.3 (GMRES com Reinicialização). O *Restarted GMRES* é uma variação do método para sistemas que requerem uma aproximação GMRES x_m com m grande. Nestes casos, o método original pode demandar um custo muito alto de memória computacional. A ideia consiste em assumir m pequeno e, caso não suficiente, recalculer a aproximação GMRES com $x_0 = x_m$. Este algoritmo pode ser descrito como segue.

1. Computamos $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = \|r_0\|$ e $v_1 = r_0/\beta$
2. Computamos V_m e \hat{H}_m pelo método de Arnoldi
3. Computamos

$$y_m = \min_y \|\beta e_1 - \hat{H}_m y\| \quad (1.70)$$

$$x_m = x_0 + V_m y_m \quad (1.71)$$

4. Se $\|b - Ax_m\|$ é satisfatória, paramos. Caso contrário, setamos $x_0 := x_m$ e voltamos ao passo 1.

A convergência do *Restarted GMRES* não é garantida para matrizes que não sejam positiva-definidas.

Exercício 1.2.1. Considere o problema discreto do Exercício 1.1.2.

- a) Compute a solução com a implementação *Restarted GMRES*

[`scipy.sparse.linalg.gmres`](#).

- b) Por padrão, o intervalo de iterações entre as inicializações é `restart=20`. Compare o desempenho para diferentes intervalos de reinicialização.

- c) Compare o desempenho entre as abordagens dos itens a) e b) frente a implementação do Método de Eliminação Gaussiana disponível em

[`scipy.sparse.linalg.spsolve`](#).

Exercício 1.2.2. Considere o problema discreto trabalhado no Exemplo 1.1.1.

- a) Compute a solução com a implementação *Restarted GMRES*

[`scipy.sparse.linalg.gmres`](#).

- b) Por padrão, o intervalo de iterações entre as inicializações é `restart=20`. Compare o desempenho para diferentes intervalos de reinicialização.
- c) Compare o desempenho entre as abordagens dos itens a) e b) frente a implementação do Método de Eliminação Gaussiana disponível em

[scipy.sparse.linalg.spsolve](#).

Exercício 1.2.3. Consideremos o seguinte problema de Poisson²² com condições de contorno não homogêneas.

$$-\Delta u = f(x,y), (x,y) \in D, \quad (1.72)$$

$$u = g, \quad \text{em } \partial D \quad (1.73)$$

Para fixarmos as ideias, vamos assumir o domínio $D = (0,1) \times (0,1)$, a fonte

$$f(x,y) = 2\pi^2 \sin \pi(x+y) \quad (1.74)$$

e os valores no contorno

$$g = \sin \pi(x+y), \quad (x,y) \in \partial D. \quad (1.75)$$

Observamos que a solução analítica deste problema é

$$u(x,y) = \sin \pi(x+y). \quad (1.76)$$

Vamos empregar o Método de Diferenças Finitas²³ para computar uma aproximação para a solução. Assumimos uma malha uniforme de n^2 nodos

$$x_i = (i-1)h \quad (1.77)$$

$$y_j = (j-1)h \quad (1.78)$$

com tamanho de malha $h = 1/(n-1)$, $i = 1, 2, \dots, n$ e $j = 1, 2, \dots, n$. Empregando a Fórmula de Diferenças Central²⁴ encontramos o seguinte problema

²²Baron Siméon Denis Poisson, 1781 - 1840, matemático, engenheiro e físico francês. Fonte: [Wikipedia](#).

²³Observamos que $\Delta u = u_{xx} + u_{yy}$.

²⁴Consulte mais em [Notas de Aula: Matemática Numérica](#).

discreto associado

$$u_{i,1} = g(x_i, 0) \quad (1.79)$$

$$u_{1,j} = g(0, y_j) \quad (1.80)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{h^2}u_{i-1,j} - \frac{1}{h^2}u_{i,j-1} + \frac{4}{h^2}u_{i,j} \\ & -\frac{1}{h^2}u_{i+1,j} - \frac{1}{h^2}u_{i,j+1} = f(x_i, y_j) \end{aligned} \quad (1.81)$$

$$u_{i,n} = g(x_i, 1) \quad (1.82)$$

$$u_{n,j} = g(1, y_j) \quad (1.83)$$

Este pode ser escrito na forma matricial

$$Aw = b \quad (1.84)$$

onde, A é $(n-2) \times (n-2)$ e assumindo a enumeração

$$u_{i,j} = w_{k=i-1+(j-2)(n-2)}, \quad i, j = 2, \dots, n-2. \quad (1.85)$$

Consulte a Figura 1.4.

1. Compute a solução do problema discreto associado usando a seguinte implementação [Python](#) do GMRES

[scipy.sparse.linalg.gmres](#)

2. Compare o desempenho com a aplicação do Método LU implemento em

[scipy.sparse.linalg.spsolve](#)

Exercício 1.2.4. Faça sua própria implementação do método GMRES. Valide-a e compare-a com a resolução do exercício anterior (Exercício 1.2.3).

1.2.2 Método do Gradiente Conjugado

O Método do Gradiente Conjugado é uma das mais eficientes técnicas iterativas para a resolução de sistema linear com matriz esparsa, simétrica e

definida positiva. Portanto, vamos assumir que o sistema

$$Ax = b \quad (1.86)$$

onde, a A é **simétrica** e **definida positiva**.

O método pode ser derivado a partir do Método de Arnoldi²⁵ [4, Seção 6.7] ou como uma variação do Método do Gradiente. Este é caminho que será adotado aqui.

Método do Gradiente

A ideia é reformular o sistema $Ax = b$ como um problema de minimização. Vamos começar definindo o funcional

$$J(y) = \frac{1}{2}y^T Ay - y^T b. \quad (1.87)$$

O vetor y que minimiza J é a solução de $Ax = b$. De fato, denotando x a solução de $Ax = b$, temos

$$J(y) = \frac{1}{2}y^T Ay - y^T b + \frac{1}{2}x^T Ax - \frac{1}{2}x^T Ax \quad (1.88)$$

$$= \frac{1}{2}(y - x)^T A(y - x) - \frac{1}{2}x^T Ax \quad (1.89)$$

O termo é independente de y e, portanto, J é mínimo quando

$$\frac{1}{2}(y - x)^T A(y - x) \quad (1.90)$$

é minimizado. Agora, como A é definida positiva²⁶, o menor valor deste termo ocorre quando $y - x = 0$, i.e. $y = x$.

Observamos, também, que o gradiente de J é

$$\nabla J = Ay - b \quad (1.91)$$

i.e., é o oposto do resíduo $r = b - Ay$. Com isso, temos que $y = x$ é a única escolha tal que $\nabla J = 0$. Ainda, temos que ∇J é o vetor que aponta na

²⁵Walter Edwin Arnoldi, 1917 - 1995, engenheiro americano estadunidense. Fonte: [Wikipédia](#).

²⁶ $x^T Ax > 0$ para todo $x \neq 0$.

direção e sentido de maior crescimento de J . Isso nos motiva a aplicarmos a seguinte iteração²⁷

$$x^{(0)} = \text{aprox. inicial} \quad (1.92)$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha_k \nabla J(x^{(k)}) \quad (1.93)$$

onde, $\alpha_k > 0$ é um escalar que regula o tamanho do passo a cada iteração. Lembrando que $-\nabla J = r$, temos que a iteração é equivalente a

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)}. \quad (1.94)$$

Notamos que $x^{(k+1)}$ é um ponto na reta $\{x^{(k)} + \alpha r^{(k)} : \alpha \in \mathbb{R}\}$ que tem a mesma direção de $\nabla J(x^{(k)})$ e passa pelo ponto $x^{(k)}$. O procedimento de escolher um $\alpha^{(k)}$ entre todos os possíveis, é conhecido como pesquisa linear (em inglês, *line search*).

A cada iteração, queremos escolher α_k de forma que $J(x^{(k+1)}) \leq J(x^{(k)})$. Isso pode ser garantido fazendo a seguinte escolha²⁸

$$J(x^{(k+1)}) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} J(x^{(k)} + \alpha r^{(k)}) \quad (1.95)$$

A fim de resolver este problema de minimização, vamos denotar

$$g(\alpha) = J(x^{(k)} + \alpha r^{(k)}). \quad (1.96)$$

Então, observamos que

$$\begin{aligned} g(\alpha) &= \frac{1}{2} (x^{(k)} + \alpha r^{(k)})^T A (x^{(k)} + \alpha r^{(k)}) - (x^{(k)} + \alpha r^{(k)})^T b \\ &= \frac{1}{2} x^{(k)T} A x^{(k)} + \frac{\alpha}{2} x^{(k)T} A r^{(k)} + \frac{\alpha}{2} r^{(k)T} A x^{(k)} \\ &\quad + \frac{\alpha^2}{2} r^{(k)T} A r^{(k)} - x^{(k)T} b - \alpha r^{(k)T} b \end{aligned} \quad (1.97)$$

Agora, usando o fato de A ser simétrica, obtemos

$$g(\alpha) = J(x^{(k)}) + \alpha r^{(k)T} A x^{(k)} + \frac{\alpha^2}{2} r^{(k)T} A r^{(k)} - \alpha r^{(k)T} b \quad (1.98)$$

$$= J(x^{(k)}) - \alpha r^{(k)T} r^{(k)} + \frac{\alpha^2}{2} r^{(k)T} A r^{(k)} \quad (1.99)$$

²⁷Iteração do Método do Máximo Declive.

²⁸Chamada de pesquisa linear exata. Qualquer outra escolha para α é conhecida como pesquisa linear não exata.

a qual, é uma função quadrática. Seu único mínimo, ocorre quando

$$0 = g'(\alpha) \quad (1.100)$$

$$= -r^{(k)T} r^{(k)} + \alpha r^{(k)T} b. \quad (1.101)$$

Logo, encontramos

$$\alpha = \frac{r^{(k)T} r^{(k)}}{r^{(k)T} A r^{(k)}} \quad (1.102)$$

Com isso, temos a iteração do Método do Gradiente

$$x^{(0)} = \text{aprox. inicial} \quad (1.103)$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)}, \quad (1.104)$$

$$\alpha_k = \frac{r^{(k)T} r^{(k)}}{r^{(k)T} A r^{(k)}} \quad (1.105)$$

Observação 1.2.4. Observamos que, a cada iteração, precisamos computar $A r^{(k)}$ (no cálculo de α_k) e $A x^{(k)}$ (no cálculo do resíduo). Essas multiplicações matriz-vetor são os passos computacionais mais custosos do método. Podemos otimizar isso usando o fato de que

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A r^{(k)}. \quad (1.106)$$

Exercício 1.2.5. Faça sua implementação do Método do Gradiente.

Exercício 1.2.6. Use a implementação feita no exercício anterior (Exercício 1.2.6) nos seguintes itens.

- Compute a solução do problema discreto do Exemplo 1.1.1 pelo Método do Gradiente. Quantas iterações são necessárias para obter um resíduo com norma $\leq 10^{-14}$?
- Compute a solução do problema discreto do Exercício 1.2.3 pelo Método do Gradiente. Quantas iterações são necessárias para obter um resíduo com norma $\leq 10^{-14}$?

- c) Compare a aplicação do Método GMRES²⁹ e do Método LU³⁰ nos itens anteriores.

Exercício 1.2.7. Considere o Exercício 1.2.3.

- a) Use sua implementação do Método do Gradiente para computar uma solução aproximada, cuja norma do resíduo $\leq 10^{-14}$.
- b) Compare o desempenho com a aplicação da implementação GMRES

[scipy.sparse.linalg.gmres](#)

Método do Gradiente Conjugado

O Método do Gradiente consiste em uma iteração da forma

$$x_0 = \text{aprox. inicial}, x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \quad (1.107)$$

com $p^{(k)} = r^{(k)}$. Ou seja, a nova aproximação $x^{(k+1)}$ é buscada na direção de $p^{(k)}$. Aqui, a ideia é usar uma melhor direção para buscar a solução.

O Método do Gradiente Conjugado é um Método de Gradiente que busca encontrar a solução de $Ax = b$ pela computação do mínimo do seguinte funcional³¹

$$J(y) = \frac{1}{2} \langle y, y \rangle_A - \langle b, y \rangle, \quad (1.108)$$

onde, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno padrão e

$$\langle x, y \rangle_A := x^T A y \quad (1.109)$$

é o **produto interno induzido por A** , lembrando que A é positiva definida³². Associada a este produto interno, temos a norma

$$\|x\|_A := \sqrt{\langle x, x \rangle_A}, \quad (1.110)$$

chamada de **norma da energia**. O produto interno associado é também conhecido como **produto interno da energia**. Com isso, definimos que

²⁹[scipy.sparse.linalg.gmres](#)

³⁰[scipy.sparse.linalg.spsolve](#)

³¹Compare com o funcional J dado em (1.87).

³²Mostre que $\langle \cdot, \cdot \rangle_A$ é de fato um produto interno.

dois vetores x e y são **conjugados**, quando eles são ortogonais com respeito ao produto interno da energia, i.e. quando

$$\langle x, y \rangle_A = 0. \quad (1.111)$$

Aqui, a ideia é desenvolver um método iterativo em que o erro a cada passo seja conjugado a todas as direções de busca anteriores. Consulte o desenvolvimento detalhado do método em [6, Seção 7.7].

Listing 1.2: Algoritmo do Gradiente Conjugado

```

1 import numpy as np
2 import scipy as sp
3 from scipy.linalg import norm
4
5 def mgc(A, b, x, tol=1e-14):
6     n, = b.shape
7     r = b - A*x
8     p = r
9     nu = np.dot(r,r)
10    for it in np.arange(n):
11        q = A*p
12        mu = np.dot(p,q)
13        alpha = nu/mu
14        x = x + alpha*p
15        r = r - alpha*q
16        nu0 = np.dot(r,r)
17        beta = nu0/nu
18        p = r + beta*p
19        nu = nu0
20        if (norm(r) < tol):
21            print(it)
22            return x
23    raise ValueError("Falha de convergencia.")

```

Exercício 1.2.8. Use a implementação acima (Listing 1.2) na resolução dos seguintes itens.

1. Compute a solução do problema discreto do Exemplo 1.1.1 pelo Método do Gradiente Conjugado. Quantas iterações são necessárias para obter um resíduo com norma $\leq 10^{-14}$?

2. Compute a solução do problema discreto do Exercício 1.2.3 pelo Método do Gradiente Conjugado. Quantas iterações são necessárias para obter um resíduo com norma $\leq 10^{-14}$?
3. Compare a aplicação do Método GMRES³³ e da implementação SciPy do Método do Gradiente Conjugado³⁴

Exercício 1.2.9. Considere o Exercício 1.2.3.

- a) Use sua implementação do Método do Gradiente Conjugado acima (Listing 1.2) para computar uma solução aproximada, cuja norma do resíduo $\leq 10^{-14}$.
- b) Compare o desempenho com a aplicação de sua implementação do Método do Gradiente (Exercício 1.2.6).
- c) Compare o desempenho com a aplicação da implementação GMRES

[scipy.sparse.linalg.gmres](#)

1.2.3 Precondicionamento

Precondicionamento refere-se a modificar o sistema linear original de forma que a computação de sua solução possa ser feita de forma mais eficiente. No lugar do sistema original

$$Ax = b \tag{1.112}$$

resolvemos o sistema equivalente

$$MAx = Mb, \tag{1.113}$$

onde $M = P^{-1}$ e a matriz P é chamada de **precondicionador** do sistema. De forma geral, a escolha do precondicionador é tal que $P \approx A$, mas com inversa fácil de ser computada. Além disso, uma característica esperada é que MA tenha esparsidade parecida com A .

Precondicionamento ILU

A ideia é tomar P igual a uma fatoração LU incompleta (ILU, do inglês, *Incomplete LU*). Incompleta no sentido que entradas de L e de U sejam

³³[scipy.sparse.linalg.gmres](#)

³⁴[scipy.sparse.linalg.cg](#)

adequadamente removidas, buscando-se uma boa esparsidade e ao mesmo tempo uma boa aproximação LU para A .

ILU(0)

O preconditionamento ILU(0) impõe que as matrizes L e U tenham o mesmo padrão de esparsidade da matriz A .

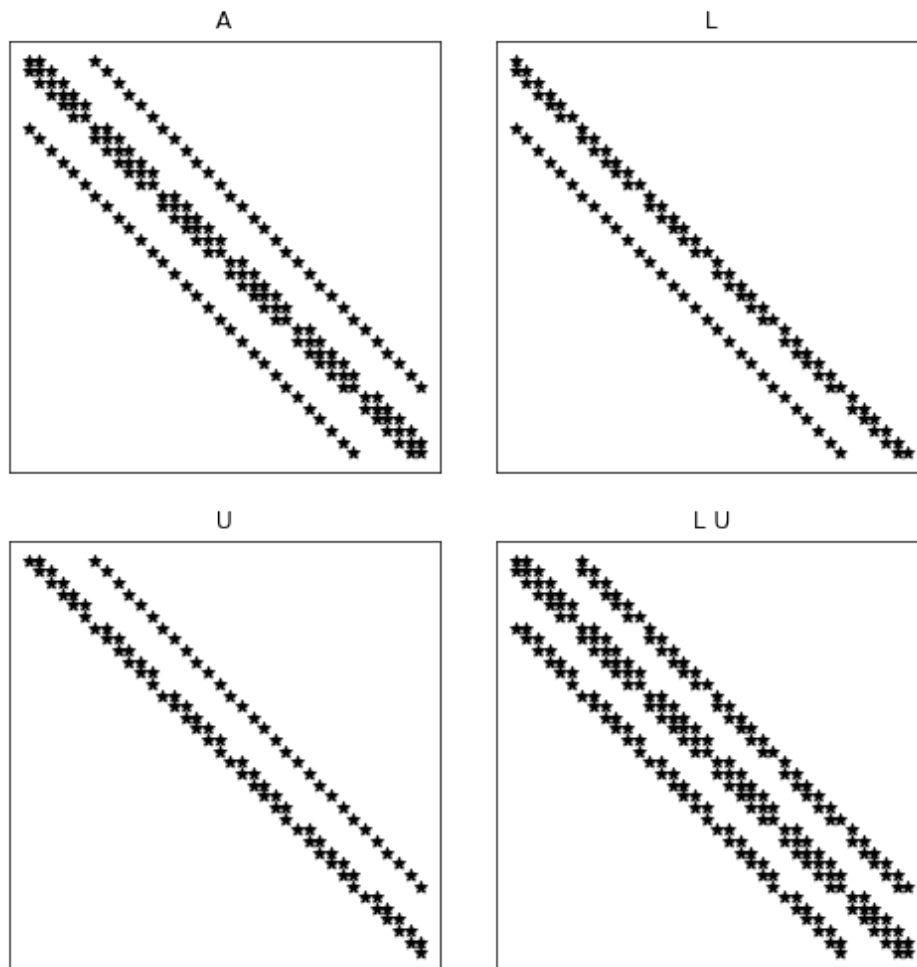


Figura 1.5: Representação das matrizes ILU(0).

Exemplo 1.2.1. ex:possoinDnhllu0 Consideramos o sistema linear $Ax = b$ associado ao problema discreto trabalhado no Exercício 1.2.3. Para uma malha $n \times n = 8 \times 8$, obtemos as matrizes representadas na Figura 1.5.

Observamos que a matriz LU contém duas diagonais com elementos não nulos a mais que a matriz original A . Estes elementos são chamados de *fill-in*.

Listing 1.3: Algoritmo ILU(0)

```

1 import scipy.sparse as sp
2
3 def ilu0(A):
4     n,n = A.get_shape()
5     LU = A.copy()
6     nz = A.nonzero()
7     for i in range(1,n):
8         for k in [_ for _ in range(i) if (i,_) in zip(nz[0],nz[1])]:
9             LU[i,k] = LU[i,k]/LU[k,k]
10            LU[i,j] = LU[i,j] - LU[i,k]*LU[k,j]
11
12     return LU

```

Exercício 1.2.10. Considere o problema discreto do Exercício 1.2.3.

- Compute a solução com o método GMRES com condicionamento ILU(0).
- Compare com a resolução com o método GMRES sem condicionamento.
- Compare com a resolução com o método CG sem condicionamento.
- O condicionamento ILU(0) é eficiente para o método CG?

Capítulo 2

Sistemas Não Lineares e Otimização

[Vídeo] | [Áudio] | [\[Contatar\]](#)

Neste capítulo, apresentam-se métodos numéricos para a resolução de problemas de otimização. Salvo explicitado ao contrário, assume-se que os problemas são bem definidos.

2.1 Método de Newton

Consideremos o seguinte problema: $F : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ encontrar $x^* \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$F(x^*) = 0. \quad (2.1)$$

Salvo explicitado ao contrário, assumiremos que $F \in C^1(D)$, i.e. F é uma função continuamente diferenciável. Vamos, também, denotar por $J_F(x) = [J_{i,j}(x)]_{i,j=1}^{n,n}$ a **matriz jacobiana**¹ com

$$J_{i,j}(x) = \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}, \quad (2.2)$$

onde $F(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x))$ e $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

¹Carl Gustav Jakob Jacobi, 1804 - 1851, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

A iteração básica do **Método de Newton**² consiste em: dada uma aproximação inicial $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$,

$$\text{resolver } J_F(x^{(k)}) \delta^{(k)} = -F(x^{(k)}) \quad (2.3)$$

$$\text{calcular } x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta^{(k)} \quad (2.4)$$

para $k = 0, 1, 2, \dots$ até convergência $x^{(k)} \rightarrow x^*$.

Observação 2.1.1. Para $x^{(0)}$ suficientemente próximo da solução x^* , o Método de Newton é quadraticamente convergente. Mais precisamente, este resultado de convergência local requer que $J_F^{-1}(x^*)$ seja não singular e que $J_F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ seja Lipschitz³ contínua. Consulte [3, Seção 7.1] para mais detalhes.

Exemplo 2.1.1. Consideremos a **Equação de Burgers**⁴

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.5)$$

com $\nu > 0$, condição inicial

$$u(0, x) = \sin(\pi x) \quad (2.6)$$

e condições de contorno de Dirichlet⁵ homogêneas

$$u(t, 0) = u(t, 1) = 0. \quad (2.7)$$

Aplicando o **Método de Rothe**⁶ com aproximação de Euler⁷ implícita, obtemos

$$\frac{u(t + h_t, x) - u(t, x)}{h_t} + u(t + h_t, x) u_x(t + h_t, x) \approx \nu u_{xx}(t + h_t, x), \quad (2.8)$$

²Isaac Newton, 1642 - 1727, matemático, físico, astrônomo, teólogo e autor inglês. Fonte: [Wikipédia](#).

³Rudolf Otto Sigismund Lipschitz, 1832 - 1903, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

⁴Johannes Martinus Burgers, 1895 - 1981, físico holandês. Fonte: [Wikipedia](#).

⁵Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet, 1805 - 1859, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

⁶Erich Hans Rothe, 1895 - 1988, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

⁷Leonhard Paul Euler, 1707 - 1783, matemático e físico suíço. Fonte: [Wikipédia](#).

onde $h_t > 0$ é o passo no tempo. Agora, aplicamos diferenças finitas para obter

$$\frac{u(t + h_t, x_i) - u(t, x_i)}{h_t} + u(t + h_t, x_i) \frac{u(t + h_t, x_{i+1}) - u(t + h_t, x_i)}{h_x} \quad (2.9)$$

$$\approx \nu \frac{u(t + h_t, x_{i-1}) - 2u(t + h_t, x_i) + u(t + h_t, x_{i+1}))}{h_x^2}, \quad (2.10)$$

onde, $x_i = (i - 1)h_x$, $i = 1, \dots, n_x$ e $h_x = 1/(n_x - 1)$ é o tamanho da malha.

Rearranjando os termos e denotando $w_i^{(k)} \approx u(t_k, x_i)$, $t_k = (k - 1)h$, obtemos o seguinte **problema discreto**

$$w_1^{(k+1)} = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{1}{h_t} w_i^{(k+1)} - \frac{1}{h_t} w_i^{(k)} + \frac{1}{h_x} w_i^{(k+1)} w_{i+1}^{(k+1)} - \frac{1}{h_x} w_i^{(k+1)} w_i^{(k+1)} \quad (2.12)$$

$$- \frac{\nu}{h_x^2} w_{i-1}^{(k+1)} + 2 \frac{\nu}{h_x^2} w_i^{(k+1)} - \frac{\nu}{h_x} w_{i+1}^{(k+1)} = 0, \quad (2.13)$$

$$w_{n_x}^{(k+1)} = 0, \quad (2.14)$$

sendo $w_i^{(0)} = \sin(\pi x_i)$, $i = 1, \dots, n_x$ e $k = 1, 2, \dots$

Este problema pode ser reescrito como segue: para cada $k = 1, 2, \dots$, encontrar $v \in \mathbb{R}^{n_x}$, tal que

$$F(v; v^{(0)}) = 0, \quad (2.15)$$

onde $v_i \approx w_i^{(k+1)}$, $v_i^{(0)} \approx w_i^{(k)}$ e

$$f_1(v; v^{(0)}) = v_1, \quad (2.16)$$

$$f_i(v; v^{(0)}) = \frac{1}{h_t} v_i - \frac{1}{h_t} v_i^{(0)} + \frac{1}{h_x} v_i v_{i+1} - \frac{1}{h_x} v_i v_i \quad (2.17)$$

$$- \frac{\nu}{h_x^2} v_{i-1} + 2 \frac{\nu}{h_x^2} v_i - \frac{\nu}{h_x} v_{i+1}, \quad (2.18)$$

$$f_{n_x}(v; v^{(0)}) = v_{n_x}. \quad (2.19)$$

A matriz jacobiana associada $J = [J_{i,j}]_{i,j}^{n_x, n_x}$ contém

$$J_{i,j} = 0, \quad j \neq i-1, i, i+1, \quad (2.20)$$

$$J_{1,1} = 1, \quad (2.21)$$

$$J_{1,2} = 0, \quad (2.22)$$

$$J_{i,i-1} = -\frac{\nu}{h_x^2}, \quad (2.23)$$

$$J_{i,i} = \frac{1}{h_t} + \frac{1}{h_x}v_{i+1} - \frac{2}{h_x}v_i + \frac{2\nu}{h_x^2}, \quad (2.24)$$

$$J_{i,i+1} = \frac{1}{h_x}v_i - \frac{\nu}{h_x^2}, \quad (2.25)$$

$$J_{n_x, n_x-1} = 0 \quad (2.26)$$

$$J_{n_x, n_x} = 1. \quad (2.27)$$

Exercício 2.1.1. Considere o problema discreto apresentado no Exemplo 2.1.1 para diferentes valores do coeficiente de difusão $\nu = 1., 0.5, 0.1, 0.01, 0.001$. Simule o problema com cada uma das seguintes estratégias e as compare quanto ao desempenho computacional.

- Simule-o aplicando o Método de Newton com o *solver* linear `npla.solve`.
- Observe que a jacobiana é uma matriz tridiagonal. Simule o problema aplicando o Método de Newton com o *solver* linear `npla.solve_banded`.
- Aloque a jacobiana como uma matriz esparsa. Então, simule o problema aplicando o Método de Newton com *solver* linear adequado para matrizes esparsas.

2.2 Método Tipo Newton

Existem várias modificações do Método de Newton⁸ que buscam reduzir o custo computacional. Há estratégias para simplificar as computações da matriz jacobiana⁹ e para reduzir o custo nas computações das atualizações de Newton.

⁸Isaac Newton, 1642 - 1727, matemático, físico, astrônomo, teólogo e autor inglês. Fonte: [Wikipédia](#).

⁹Carl Gustav Jakob Jacobi, 1804 - 1851, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

2.2.1 Atualização Cíclica da Matriz Jacobiana

Geralmente, ao simplificarmos a matriz jacobina J_F ou aproximarmos a atualização de Newton $\delta^{(k)}$, perdemos a convergência quadrática do método (consulte a Observação 2.1.1). A ideia é, então, buscar uma convergência pelo menos super-linear, i.e.

$$\|e^{(k+1)}\| \approx \rho_k \|e^{(k)}\|, \quad (2.28)$$

com $\rho_k \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$. Aqui, $e^{(k)} := x^* - x^{(k)}$. Se a convergência é superlinear, então podemos usar a seguinte aproximação

$$\rho_k \approx \frac{\|\delta^{(k)}\|}{\|\delta^{(k-1)}\|} \quad (2.29)$$

ou, equivalentemente,

$$\rho_k \approx \left(\frac{\|\delta^{(k)}\|}{\|\delta^{(0)}\|} \right)^{\frac{1}{k}} \quad (2.30)$$

Isso mostra que podemos acompanhar a convergência das iterações pelo fator

$$\beta_k = \frac{\|\delta^{(k)}\|}{\|\delta^{(0)}\|}. \quad (2.31)$$

Ao garantirmos $0 < \beta_k < 1$, deveremos ter uma convergência superlinear.

Vamos, então, propor o seguinte método tipo Newton de atualização cíclica da matriz jacobiana.

1. Escolha $0 < \beta < 1$
2. $J := J_F(x^{(0)})$
3. $J\delta^{(0)} = -F(x^{(0)})$
4. $x^{(1)} = x^{(0)} + \delta^{(0)}$
5. Para $k = 1, \dots$ até critério de convergência:
 - (a) $J\delta^{(k)} = -F(x^{(k)})$
 - (b) $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta^{(k)}$
 - (c) Se $\|\delta^{(k)}\|/\|\delta^{(0)}\| > \beta$:

$$\text{i. } J := J_F(x^{(k)})$$

Exercício 2.2.1. Implemente uma versão do Método Tipo Newton apresentado acima e aplique-o para simular o problema discutido no Exemplo 2.1.1 para $\nu = 1., 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001$. Faça uma implementação com suporte para matrizes esparsas.

2.3 Problemas de Minimização

Vamos considerar o seguinte **problema de minimização**: dada a **função objetivo** $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, resolver

$$\min_{x \in D} f(x). \quad (2.32)$$

No que segue e salvo dito explicitamente ao contrário, vamos assumir que o problema está bem determinado e que f é suficientemente suave. Ainda, vamos assumir as seguintes notações:

- gradiente de f

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right) \quad (2.33)$$

- derivada direcional de f com respeito a $d \in \mathbb{R}^n$

$$\frac{\partial f}{\partial d} = \nabla f(x) \cdot d \quad (2.34)$$

- matriz hessiana de f , $H = [h_{i,j}]_{i,j=1}^{n,n}$

$$h_{i,j}(x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2.35)$$

Observação 2.3.1 (Condições de Otimização). Se $\nabla f(x^*) = 0$ e $H(x^*)$ é positiva definida, então x^* é um mínimo local de f em uma vizinhança não vazia de x^* . Consulte mais em [3, Seção 7.2]. Um ponto x^* tal que $\nabla f(x^*) = 0$ é chamado de **ponto crítico**.

2.3.1 Métodos de declive

Um método de declive consiste em uma iteração tal que: dada uma aproximação inicial $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, computa-se

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \quad (2.36)$$

com **tamanho de passo** $\alpha_k > 0$, para $k = 0, 1, 2, \dots$ até convergência. As **direções descendentes** são tais que

$$d^{(k)} \cdot \nabla f(x^{(k)}) < 0, \quad \text{se } \nabla f(x^{(k)}) \neq 0, \quad (2.37)$$

$$d^{(k)} = 0, \quad \text{noutro caso.} \quad (2.38)$$

Observação 2.3.2. (Condição de Convergência) Da Série de Taylor¹⁰, temos que

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) - f(x^{(k)}) = \alpha_k \nabla f(x^{(k)}) \cdot d^{(k)} + \varepsilon, \quad (2.39)$$

com $\varepsilon \rightarrow 0$ quando $\alpha_k \rightarrow 0$. Como consequência da continuidade da f , para α_k suficientemente pequeno, o sinal do lado esquerdo é igual a do direito desta última equação. Logo, para tais α_k e $d^{(k)} \neq 0$ uma direção descendente temos garantido que

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) < f(x^{(k)}). \quad (2.40)$$

Notamos que um método de declive fica determinado pelas escolhas da direção de declive d_k e o tamanho do passo α_k . Primeiramente, vamos a este último item.

Pesquisa linear

A computação de α_k consiste em resolver o seguinte problema de minimização:

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}} \phi(\alpha) = f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}). \quad (2.41)$$

Entretanto, a resolução exata deste problema é muitas vezes não factível. Técnicas de aproximações para a resolução deste problema são, então, aplicadas. Tais técnicas são chamadas de **pesquisa linear não exata**.

A **condição de Armijo** é que a escolha de α_k deve ser tal que

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma \alpha_k \nabla f(x^{(k)}) \cdot d^{(k)}, \quad (2.42)$$

¹⁰Brook Taylor, 1685 - 1731, matemático britânico. Fonte: [Wikipédia](#).

para alguma constante $\sigma \in (0, 1/2)$. Ou seja, a redução em f é esperada ser proporcional à derivada direcional de f com relação a direção $d^{(k)}$ no ponto $x^{(k)}$. Em aplicações computacionais, σ é normalmente escolhido no intervalo $[10^{-5}, 10^{-1}]$.

A condição (2.42) não é suficiente para evitar escolhas muito pequenas de α_k . Para tanto, pode-se empregar a **condição de curvatura**, a qual requer que

$$\nabla f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) \cdot d^{(k)} \geq \beta \nabla f(x^{(k)}) d^{(k)}, \quad (2.43)$$

para $\beta \in [\sigma, 1/2]$. Notemos que o lado esquerdo de (2.43) é igual a $\phi'(\alpha_k)$. Ou seja, esta condição impõe que α_k seja maior que $\beta\phi'(0)$. Normalmente, escolhe-se $\beta \in [10^{-1}, 1/2]$. Juntas, (2.42) e (2.43) são conhecidas como **condições de Wolfe**¹¹.

2.3.2 Método do Gradiente

O Método do Gradiente (**Método do Máximo Declive**) é um Método de Declive tal que as direções descendentes são o oposto do gradiente da f , i.e.

$$d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)}). \quad (2.44)$$

É fácil verificar que as condições (2.37)-(2.38) são satisfeitas.

Exemplo 2.3.1. Consideremos o problema de encontrar o mínimo da **função de Rosenbrock**¹²

$$f(x) = \sum_{i=1}^n 100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)^2. \quad (2.45)$$

O valor mínimo desta função é zero e ocorre no ponto $x = 1$. Esta função é comumente usada como caso padrão para teste de métodos de otimização.

¹¹Philip Wolfe, 1927 - 2016, matemático estadunidense. Fonte: [Wikipédia](#).

¹²Howard Harry Rosenbrock, 1920 - 2010, engenheiro britânico. Fonte: [Wikipedia](#).

Para o Método do Gradiente, precisamos de suas derivadas parciais:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = -400x_1(x_2 - x_1^2) - 2(1 - x_1) \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^n 200(x_i - x_{i-1}^2)(\delta_{i,j} - 2x_{i-1}\delta_{i-1,j}) - 2(1 - x_{i-1})\delta_{i-1,j} \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_n} = 200(x_n - x_{n-1}^2) \quad (2.48)$$

Listing 2.1: Algoritmo do Gradiente

```

1 import numpy as np
2 import numpy.linalg as npla
3 import scipy.optimize as spopt
4
5 # fun obj
6 def fun(x):
7     '''
8     Funcao de Rosenbrock
9     '''
10    return sum(100.*(x[1:] - x[:-1]**2)**2. + (1. - x[:-1])**2.)
11
12 # gradiente da fun
13 def grad(x):
14     xm = x[1:-1]
15     xm_m1 = x[:-2]
16     xm_p1 = x[2:]
17     der = np.zeros_like(x)
18     der[1:-1] = 200*(xm - xm_m1**2) - 400*(xm_p1 - xm**2)*xm - 2*(1 - xm)
19     der[0] = -400*x[0]*(x[1] - x[0]**2) - 2*(1 - x[0])
20     der[-1] = 200*(x[-1] - x[-2]**2)
21
22    return der
23
24 # problem dimension
25 n = 2
26
27 # num max iters

```

```
28 maxiter = 100000
29 # tolerancia
30 tol = 1e-10
31
32 # aprox. inicial
33 x = np.zeros(n)
34
35 siga = [x]
36 for k in range(maxiter):
37     # direcao descendente
38     d = -grad(x)
39
40     # pesquisa linear
41     alpha = spopt.line_search(fun, grad, x, d)[0]
42
43     # atualizacao
44     x = x + alpha * d
45
46     nad = npla.norm(alpha * d)
47     nfun = npla.norm(fun(x))
48
49     if ((k+1) % 10 == 0):
50         print(f"{k+1}: {alpha:1.2e} {nad:1.2e} {nfun:1.2e}")
51         siga.append(x)
52
53     if ((nfun < tol) or np.isnan(nfun)):
54         break
```

Exercício 2.3.1. Aplique o Método do Gradiente para resolver o problema de minimização com as seguintes funções objetivos:

a) Função de Beale

$$f(x,y) = (1.5 - x - xy)^2 + (2.25 - x + xy^2)^2 + (2.625 - x + xy^3)^2 \quad (2.49)$$

Solução: $f(3, 0.5) = 0$.

b) Função de Goldstein-Price

$$\begin{aligned} f(x,y) = & \left[1 + (x + y + 1)^2 (19 - 14x + 3x^2 - 14y + 6xy + 3y^2) \right] \\ & \times \left[30 + (2x - 3y)^2 (18 - 32x + 12x^2 + 48y - 36xy + 27y^2) \right] \end{aligned} \quad (2.50)$$

Solução: $f(0,-1) = 3$.

c) Função de Booth

$$f(x,y) = (x + 2y - 7)^2 + (2x + y - 5)^2 \quad (2.51)$$

Solução: $f(1,3)=0$.

d) Função de Rastringin:

$$f(x) = 10n + \sum_{i=1}^n \left[x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) \right] \quad (2.52)$$

Solução: $f(0)=0$.

Referências Bibliográficas

- [1] J.P. Davis and P. Rabinowitz. *Methods of Numerical Integration*. Academic Press, Inc., San Diego, 2. edition, 1984.
- [2] C.T. Kelley. *Iterative Methods for Optimization*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1999.
- [3] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. *Numerical Mathematics*. Springer, Berlin, 2. edition, 2007.
- [4] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2003.
- [5] J. Stoer. *Approximate Calculation of Multiple Integrals*. Prentice-Hall, Inc., 1971.
- [6] D. Watkins. *Fundamentals of Matrix Computations*. John Wiley, New York, 2002.