MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS

- RESOLVER SISTEMAS LINEARES $Ax + b = 0$. A $m \times m$ SIMÉTRICA.
- CÁLCULO DA DIREÇÃO DE NEWTON: RESOLVER O SISTEMA

$$\nabla^2 f(x^k)\, d = -\nabla f(x^k).$$

- $q(x) = \frac{1}{2} x^t A x + b^t x + c$, A $m \times m$ SIMÉTRICA.

$$\nabla q(x) = Ax + b.$$

MINIMIZAR q É RESOLVER $\nabla q(x) = Ax + b = 0$.

O MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS PODE SER INTERPRETADO COMO UM MÉTODO DE MINIMIZAÇÃO DE QUADRÁTICAS.

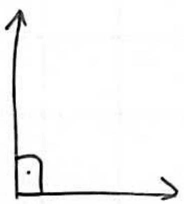
DEFINIÇÃO: OS VETORES $d^0, \dots, d^k$ SÃO DITOS A-CONJUGADOS SE

$$(d^i)^T A d^j = 0, \quad \forall i \neq j.$$

EXEMPLOS:

1) $A = I$: VETORES ORTOGONAIS NO SENTIDO DA ÁLGEBRA LINEAR.

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = 0.$$



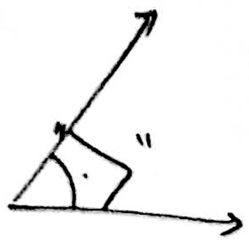
2) $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 1 \neq 0$$

((1,0) E (0,1) NÃO SÃO A-CONJUGADOS)

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix} = 0$$

((1,0) E (-1,2) SÃO A-CONJUGADOS)



TEOREMA: SEJAM $d^0, \ldots, d^K$ VETORES A-CONJUGADOS.

SE $(d^i)^T A d^i \neq 0, \forall i$, ENTÃO

$\{d^0, \ldots, d^K\}$ É L.I.

PROVA: SEJAM α_i TAIS QUE

$$\sum_{i=0}^{K} \alpha_i d^i = 0.$$

MULTIPLICANDO POR $(d^j)^T A$, OBTEMOS

$$0 = \sum_{i=0}^{K} \alpha_i (d^j)^T A d^i = \alpha_i \underbrace{(d^i)^T A d^i}_{\neq 0} \Longrightarrow \alpha_i = 0.$$

ISSO VALE PARA QUALQUER i, DE ONDE SEGUE O RESULTADO ∎

IDEIA:

- COMECE COM UM VETOR $d^0 \neq 0$.

  ↳ MINIMIZE q AO LONGO DA RETA COM DIREÇÃO d^0.

- CONSTRUA d^1, A-CONJ. COM d^0.

  ↳ MINIMIZE q NO ESPAÇO GERADO POR d^0, d^1: $[d^0, d^1]$.

$\vdots$

- CONSTRUA d^k, A-CONJ. COM $d^0, \ldots, d^{k-1}$.

  ↳ MINIMIZE q SOBRE $[d^0, \ldots, d^{k-1}, d^k]$.

OBS: 1) ESTE PROCEDIMENTO TERMINA EM NO MÁX. $n-1$ PASSOS (NO PASSO $n-1$, MINIMIZAMOS q SOBRE $[d^0, \ldots, d^{n-1}] = \mathbb{R}^n$).

2) GRADIENTES CONJUGADOS É UMA REALIZAÇÃO PRÁTICA DESTA IDEIA.

CASO A DEFINIDA POSITIVA

- NESTE CASO, O SISTEMA $\nabla q(x) = Ax + b = 0$ TEM ÚNICA SOLUÇÃO (DADA QUE A É INVERSÍVEL), E QUE SÓ PODE SER O MINIMIZADOR GLOBAL DE q.

- AQUI, $(d^i)^T A d^i > 0$.

- CONSIDERE A SEQUÊNCIA $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$.
(CONSTRUÍDA UMA DIREÇÃO d^k, DAMOS UM PASSO).

QUAL O TAMANHO DO PASSO t_k?

- CONSEGUIMOS "O MELHOR" PASSO: AQUELE QUE MINIMIZA q AO LONGO DA DIREÇÃO d^k.

$$\min_{t \geq 0} \varphi(t) = q(x^k + t d^k).$$

$$\varphi'(t_k) = \nabla q(x^k + t_k d^k)^T d^k = 0$$

$$\Longrightarrow \left[A(x^k + t_k d^k) + b\right]^T d^k = 0$$

$$\Longrightarrow \underbrace{\left[A x^k + b\right]^T d^k} + t_k (d^k)^T A d^k = 0$$

$$\Longrightarrow \nabla q(x^k)^T d^k + t_k (d^k)^T A d^k = 0$$

$$\Longrightarrow \boxed{t_k = \frac{-\nabla q(x^k)^T d^k}{(d^k)^T A d^k}} \qquad (*)$$

TEOREMA: DADO $x^0 \in \mathbb{R}^n$ QUALQUER, TEMOS $x^n = x^*$, ONDE x^* É O MINIMIZADOR DE $q(x)$.

PROVA: VEJA O LIVRO DE KARAS E RIBEIRO //.

CONCLUSÃO: O TEOREMA DIZ QUE A SEQ. $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$ COM O PASSO EXATO $(*)$ ATINGE O MINIMIZADOR DE q (EM $n-1$ PASSOS).

FALTA: DIZER COMO CONSTRUIR d^k...

LEMA: DADO $x^0 \in \mathbb{R}^n$, TEMOS

$$\nabla q(x^k)^T d^j = 0 \quad , \quad j = 0, \dots, k-1.$$

PROVA: DA DEFINIÇÃO DE t_{k-1}, TEMOS

$$\varphi'(x^{k-1} + t_{k-1} d^{k-1}) = \nabla q(x^{k-1} + t_{k-1} d^{k-1})^T d^{k-1} = 0$$

$$\Longrightarrow \nabla q(x^k)^T d^{k-1} = 0 .$$

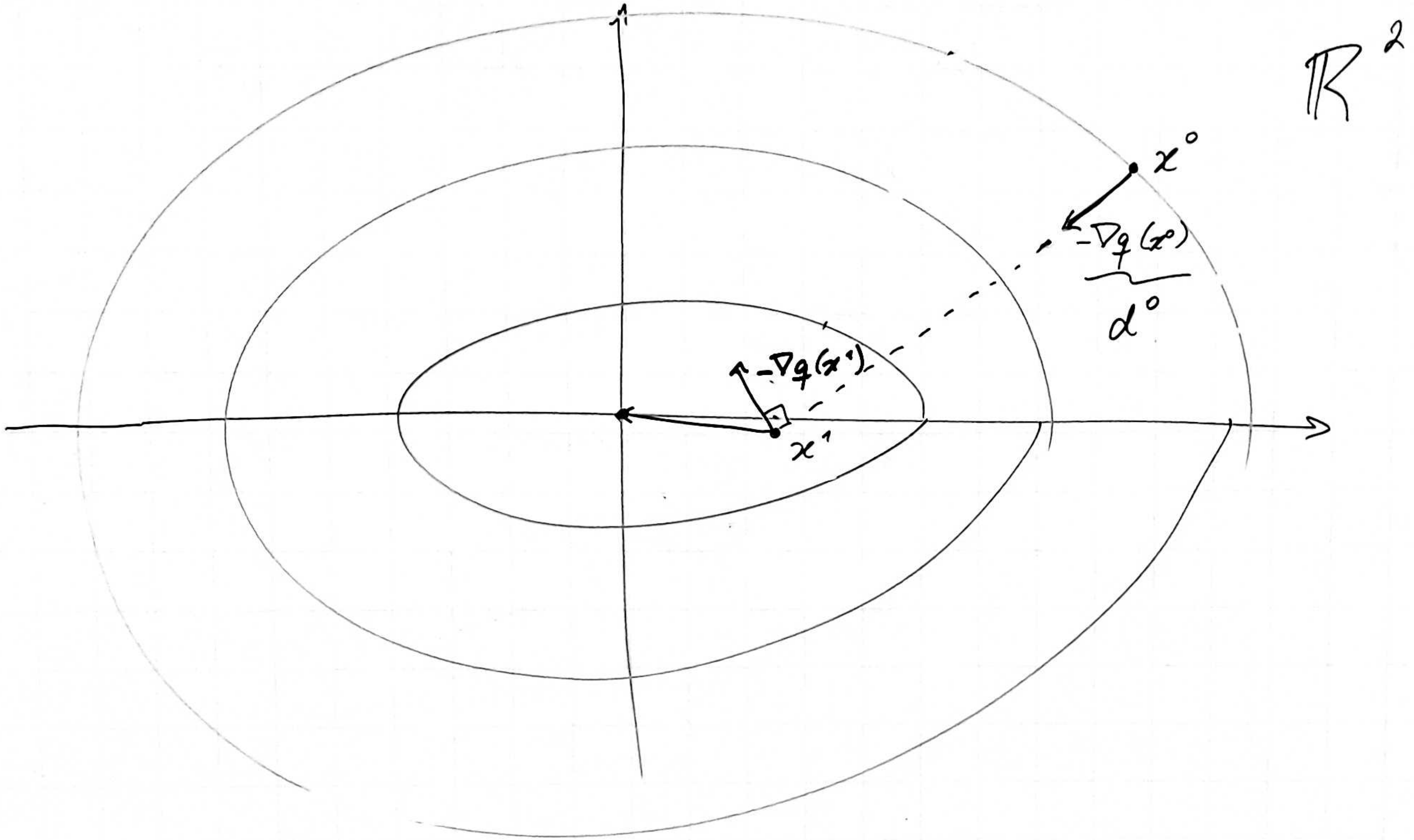
SEJA $j < k-1$.

$$\nabla q(x^k)^T d^j = [A x^k + b] d^j = [A(\underline{x^{k-1}} + \underline{t_{k-1} d^{k-1}}) + \underline{b}]^T d^j$$

$$= \nabla q(x^{k-1})^T d^j + t_{k-1} \underbrace{(d^{k-1})^T A d^j}_{0} = \nabla q(x^{k-1})^T d^j$$

REPETINDO ESSE ARGUMENTO,

$$\nabla q(x^k)^T d^j = \nabla q(x^{j+1})^T d^j = 0 . \qquad \blacksquare$$



$\mathbb{R}^2$
x^0
$\underbrace{-\nabla q(x^0)}_{d^0}$
$-\nabla q(x^1)$
x^1

TEOREMA: DADO $x^0 \in \mathbb{R}^n$ QUALQUER, x^k MINIMIZA $q(x)$ SOBRE O ESPAÇO $x^0 + [d^0, \ldots, d^{k-1}]$.

PROVA: EXERCÍCIO. USE O LEMA ANTERIOR. ■

MÉTODO GRADIENTES CONJUGADOS (GC).

1) $d^0 = -\nabla q(x^0)$.

2) QUEREMOS d^1 SEJA A-CONJ. COM d^0:

- $x^1 = x^0 + t_0 d^0$ (SEI CALCULAR t_0).

- $d^1 = -\nabla q(x^1) + \beta_0 d^0$. QUAL β_0 TORNA d^0, d^1 A-CONJ?

$$(d^0)^T A d^1 = 0$$

$$\iff (d^0)^T A \left(-\nabla q(x^1) + \beta_0 d^0 \right) = 0$$

$$\iff -(d^0)^T A \nabla q(x^1) + \beta_0 \underbrace{(d^0)^T A d^0}_{>0} = 0$$

$$\iff \boxed{\beta_0 = \frac{(d^0)^T A \nabla q(x^1)}{(d^0)^T A d^0}}$$

MÉTODO GC (A DEFINIDA POSITIVA)

INICIALIZAÇÃO: $x^0 \in \mathbb{R}^n$ QUALQUER. FAÇA $d^0 = -\nabla q(x^0)$ E $k \leftarrow 0$.

PASSO 1 (PARADA): SE $\nabla q(x^k) = 0$, PARE. x^k É MINIMIZADOR!

PASSO 2: DEFINA

$$t_k = -\frac{\nabla q(x^k)^T d^k}{(d^k)^T A d^k}.$$

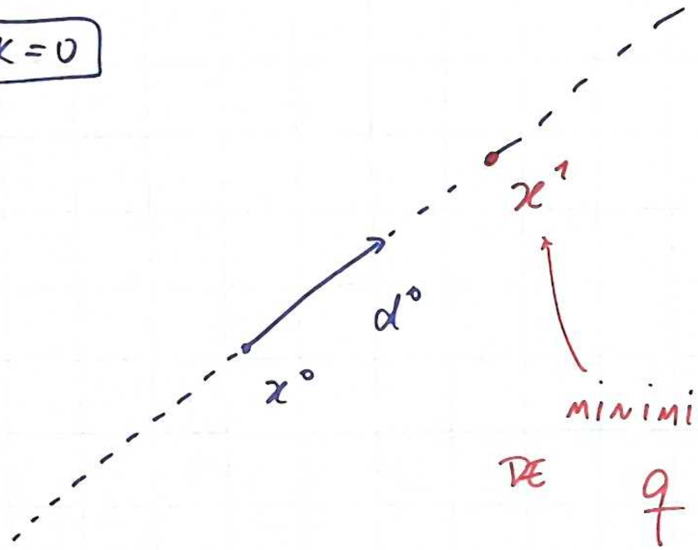
PASSO 3: CALCULE

$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k.$$

PASSO 4: CALCULE $\beta_k = \dfrac{(d^k)^T \nabla q(x^{k+1})}{(d^k)^T A d^k}$ E $d^{k+1} = -\nabla q(x^{k+1}) + \beta_k d^k$.

PASSO 5: $K \leftarrow K+1$ E VOLTE AO PASSO 1.

$\boxed{K=0}$

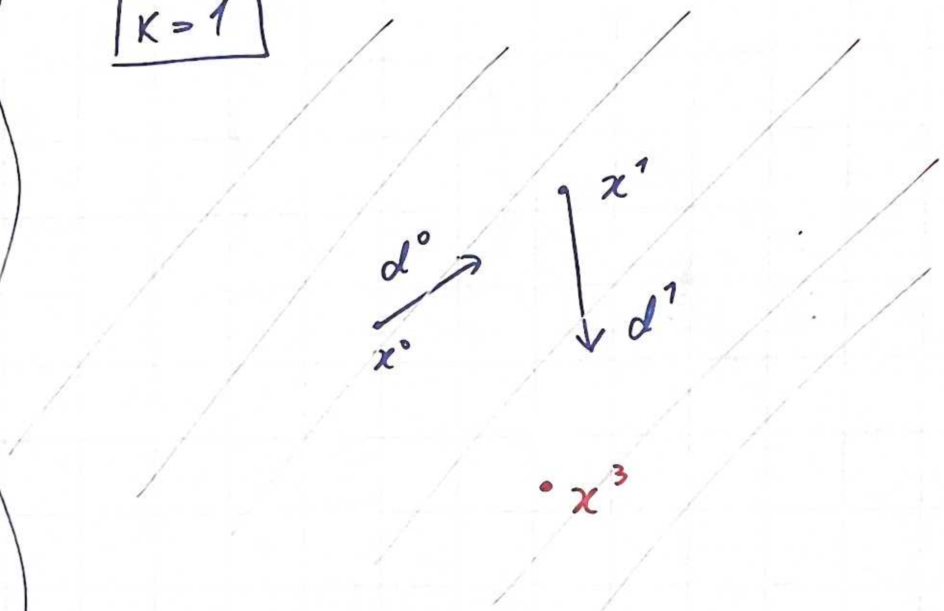


MINIMIZADOR DE q SOBRE

$x^0 + [d^0]$

(TEO ANTERIOR)

$\boxed{K=1}$



x^3 É O MINIMIZADOR DE q SOBRE $x^0 + [d^0, d^1]$.

- GC TERMINA EM NO MÁX. n PASSOS.

- MELHOR: O NÚMERO MÁX. DE ITERAÇÕES É A QUANT. DE AUTOVALORES DISTINTOS DE A.

EX: $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$ $n=4$, MAS A TEM 2 AUTOVALORES DISTINTOS $(1$ E $2)$.

(A DEMONSTRAÇÃO NECESSITA DA DECOMPOSIÇÃO ESPECTRAL DE A...).

GRADIENTES CONJUGADOS (GC)

CASO: A PODE NÃO SER DEFINIDA POSITIVA

- PODE OCORRER $(d^i)^T A d^i \leq 0$.

TEOREMA: SE d É TAL QUE $\nabla q(x)^T d < 0$ E $d^T A d \leq 0$, ENTÃO q É ILIMITADA INFERIORMENTE.

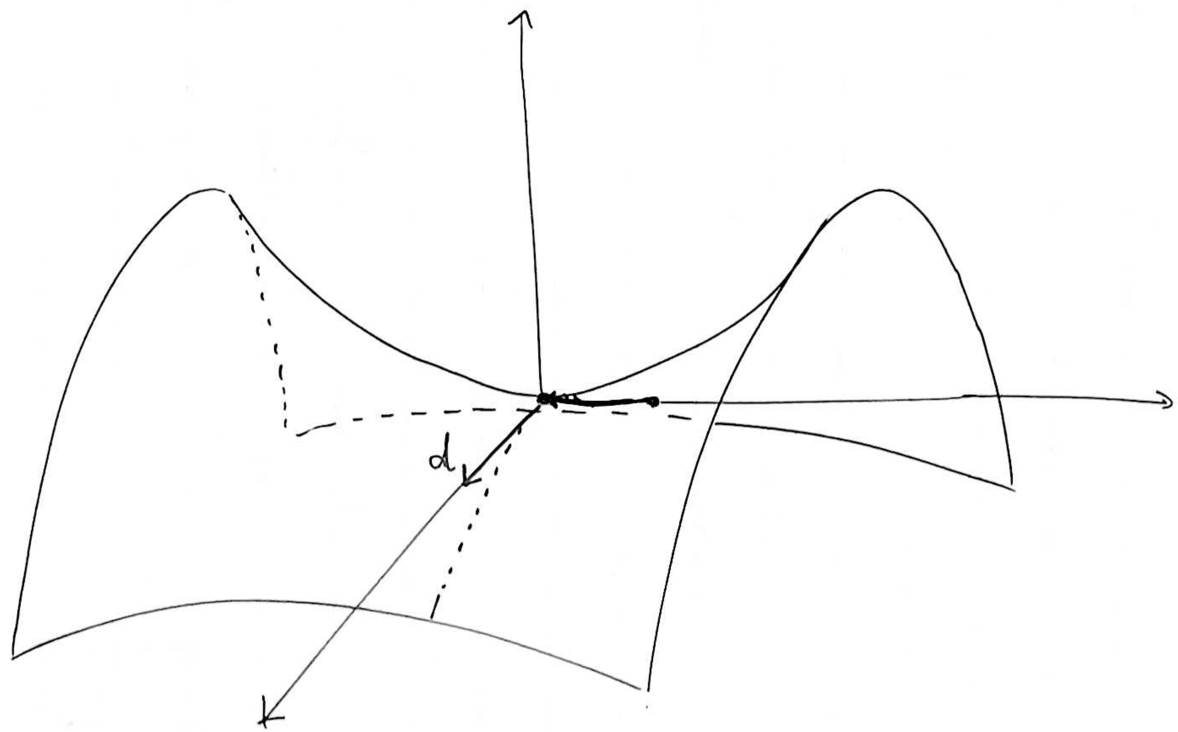
PROVA: LEMBRE QUE

$$q(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c.$$

É FÁCIL VERIFICAR QUE

$$q(x+td) = q(x) + t\,\underbrace{\nabla f(x)^T d}_{<0} + \frac{t^2}{2}\,\underbrace{d^T \nabla^2 q(x)\, d}_{= d^T A d \,\leq\, 0}$$

ASSIM, FAZENDO $t \to \infty$ ("CAMINHANDO INDEFINIDAMENTE NA DIREÇÃO d") CONCLUÍMOS QUE $q(x+td) \longrightarrow -\infty$. ■



GC PARA A QUALQLER (SIMÉTRICA).

INICILIZAÇÃO: $x^0 \in \mathbb{R}^n$ QUALQLER, $d^0 = -\nabla q(x^0)$, $k = 0$.

PASSO 1 (1º PARADA): SE $\nabla q(x^k) = 0$ ENTÃO PARE: x^k É SOLUÇÃO.

PASSO 2 (2ª PARADA): SE $(d^k)^T \nabla^2 q(x^k) d^T = (d^k)^T A d^k \leq 0$

ENTÃO PARE: q É ILIMITADA INFERIORMENTE.

PASSO 3 (TAMANHO DO PASSO): DEFINA

$$t_k = -\frac{\nabla q(x^k)^T d^k}{(d^k)^T A d^k}.$$

PASSO 4 (MINIMIZAÇÃO): CALCULE

$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k.$$

PASSO 5 (DIREÇÃO A-CONJUGADA): CALCULE

$$\beta_K = \frac{(d^K)^T \nabla q(x^{K+1})}{(d^K)^T A d^K}, \quad d^{K+1} = -\nabla q(x^{K+1}) + \beta_K d^K.$$

PASSO 6: $K \leftarrow K+1$, VÁ PARA O PASSO 1.

APLICAÇÃO DE GC AO CÁLCULO DE DIREÇÕES NEWTONIANAS

- ESQUEMA DE DESCIDA + NEWTON.
- TEMOS QUE CALCULAR (OU PELO MENOS TENTAR) UMA DIREÇÃO d TAL QUE $\nabla^2 f(x^K)\, d = -\nabla f(x^K)$.

RESOLVER ESTE SISTEMA É MINIMIZAR A QUADRÁTICA

$$q(d) = \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x^k) d + \nabla f(x^k)^T d + c.$$

(DE FATO, $0 = \nabla q(d) = \nabla^2 f(x^k)^T d + \nabla f(x^k)$).