

# 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  $d^1, \dots, d^k$  SÃO DITOS  $A$ -CONJUGADOS

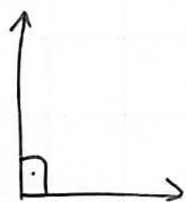
SE

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

EXEMPLOS:

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

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



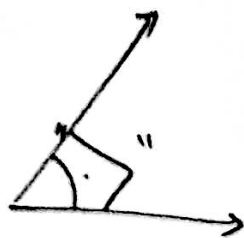
$$2) A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$

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

(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  $d^0, \dots, d^k$  VETORES  $A$ -CONJUGADOS.

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

$\{d^0, \dots, d^k\}$  É L.I.

PROVA: SEJAM  $\alpha_i$  TAIS QUE

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

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

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

ISSO VALE PARA QUALQUER  $i$ , DE ONDE SEGUE O RESULTADO  $\square$

## 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  $d^0, d^1: [d^0, d^1]$ .

⋮

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

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

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

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  $d^k$ .

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

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

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

$$\Rightarrow \underbrace{[Ax^k + b]}^T d^k + t_k (d^k)^T A d^k = 0$$

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

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

TEOREMA: DADO  $x^0 \in \mathbb{R}^m$  QUALQUER, TEMOS  $x^m = x^*$ , 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  $m-1$  PASSOS).

FALTA: DIZER COMO CONSTRUIR  $d^k \dots$



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

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

PROVA: DA DEFINIÇÃO DE  $t_{k-1}$ , TEMOS

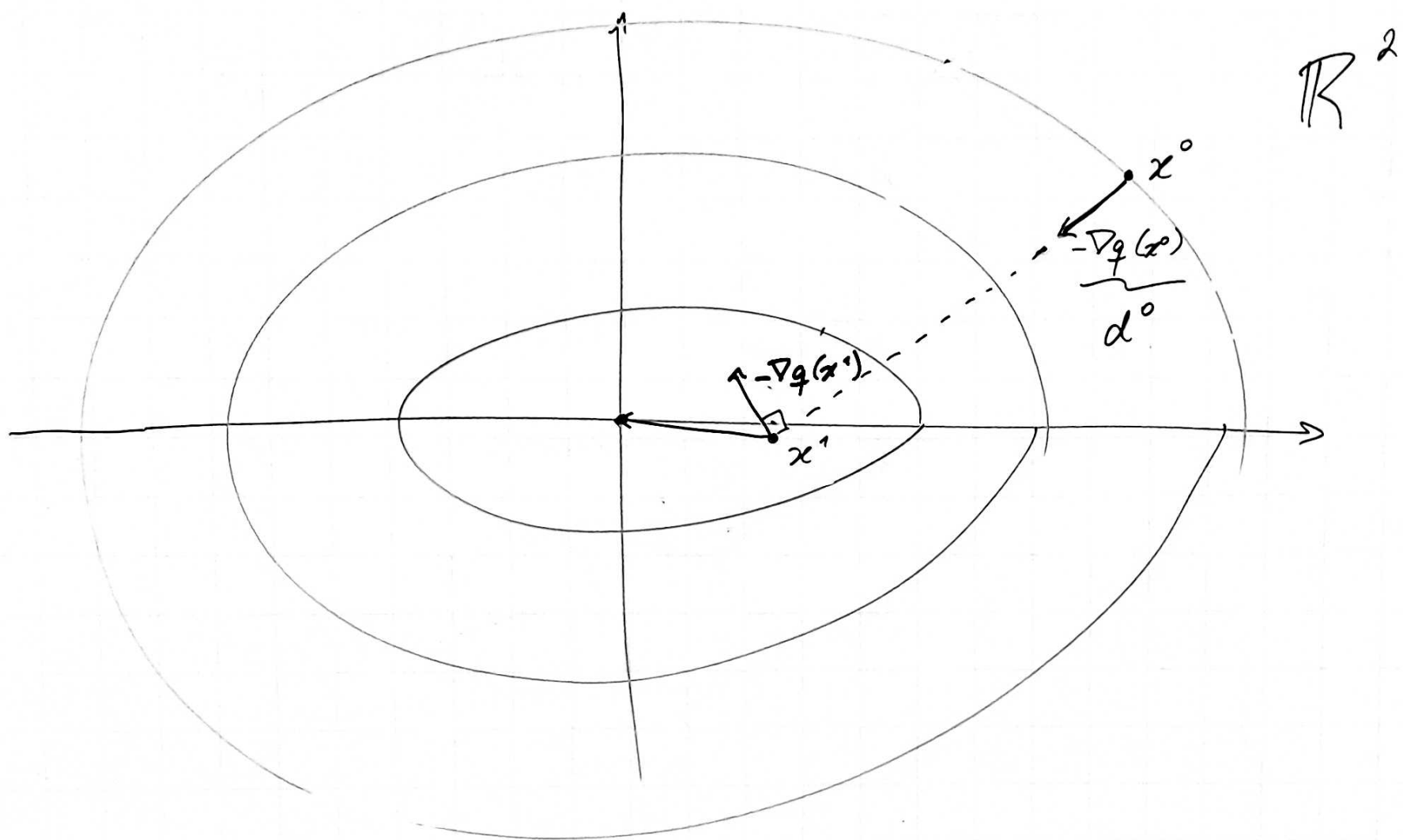
$$\begin{aligned} \varphi'(x^{k-1} + t_{k-1} d^{k-1}) &= \nabla q(x^{k-1} + t_{k-1} d^{k-1})^T d^{k-1} = 0 \\ \Rightarrow \nabla q(x^k)^T d^{k-1} &= 0. \end{aligned}$$

SEJA  $j < k-1$ .

$$\begin{aligned} \nabla q(x^k)^T d^j &= [Ax^k + b]^T d^j = [A(x^{k-1} + t_{k-1} d^{k-1}) + b]^T d^j \\ &= \nabla q(x^{k-1})^T d^j + t_{k-1} \underbrace{(d^{k-1})^T A d^j}_0 = \nabla q(x^{k-1})^T d^j \end{aligned}$$

REPETINDO ESSE ARGUMENTO,

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



$\mathbb{R}^2$

$x^0$

$-\nabla f(x^0)$

$d^0$

$-\nabla f(x^1)$

$x^1$

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

PROVA: EXERCÍCIO. USE O LEMA ANTERIOR.  $\square$

MÉTODO GRADIENTES CONJUGADOS (GC).

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

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

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

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

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

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

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

$$\Leftrightarrow$$

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

# MÉTODO GC (A DEFINIDA POSITIVA)

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

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

PASSO 2: DEFINA

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

PASSO 3: CALCULE

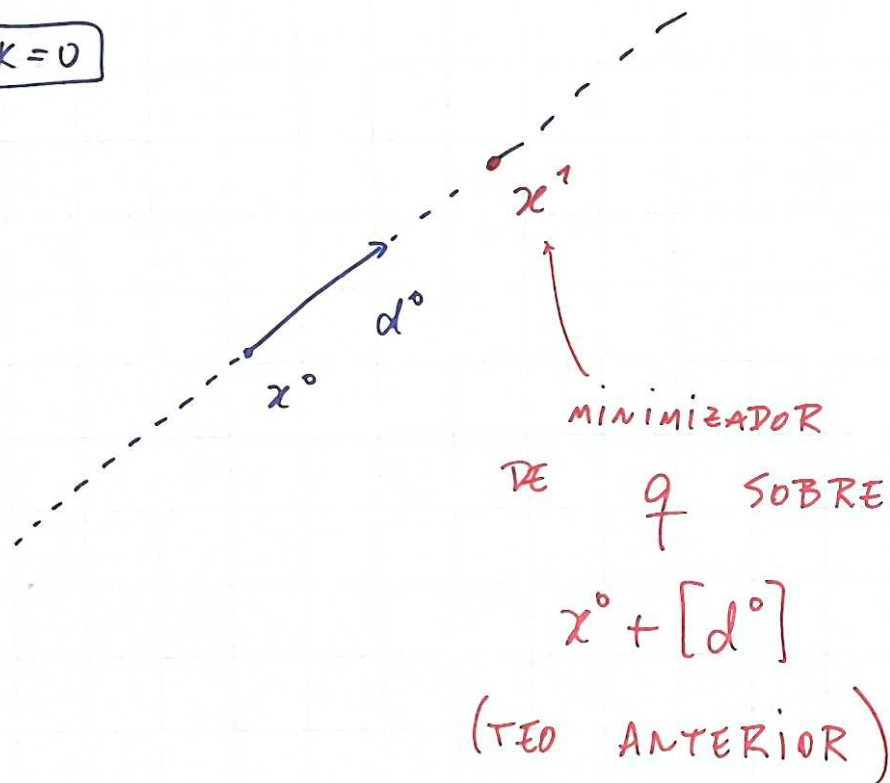
$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k$$

PASSO 4: CALCULE

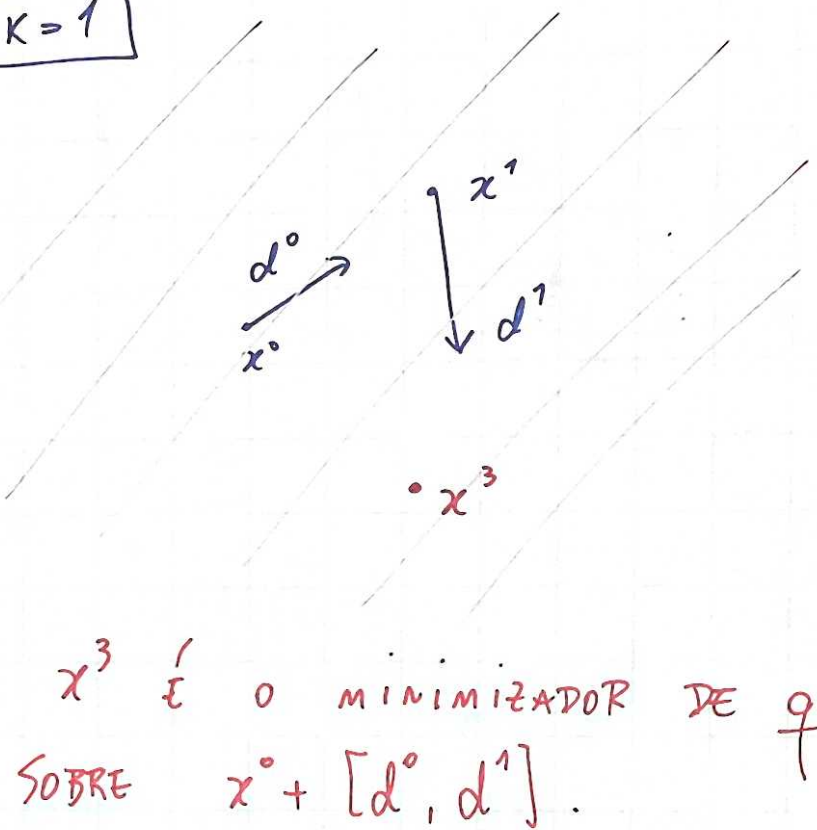
$$\beta_k = \frac{(d^k)^T A \nabla g(x^{k+1})}{(d^k)^T A d^k} \quad \text{E} \quad d^{k+1} = -\nabla g(x^{k+1}) + \beta_k d^k$$

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

$K=0$



$K=1$



• GC TERMINA EM NO MÁX.  $m$  PASSOS.

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

EX:  $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$

$m=4$ , MAS  $A$  TEM 2 AUTOVALORES DISTINTOS (1 E 2).

(A DEMONSTRAÇÃO NECESSITA DA DECOMPOSIÇÃO ESPECTRAL DE  $A \dots$ ).

---

# 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

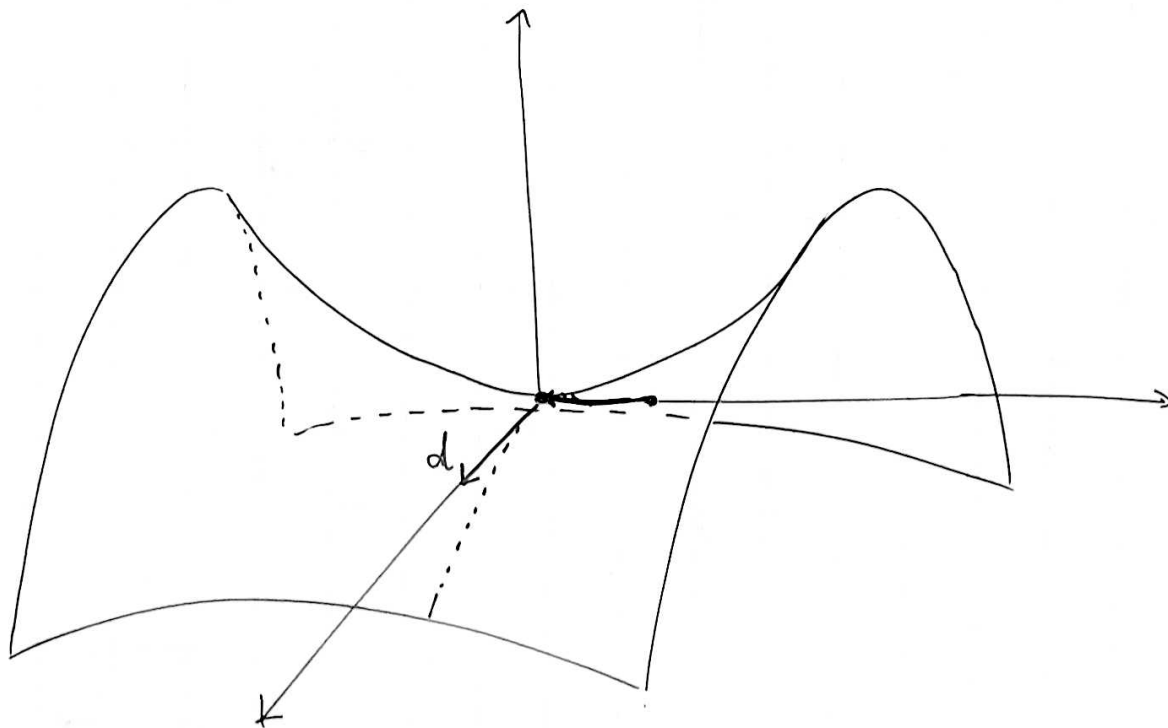
$$q(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c.$$

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  $t \rightarrow \infty$  ("CAMINHANDO INDEFINIDAMENTE NA DIREÇÃO  $d$ ") CONCLUÍMOS QUE  $q(x+td) \rightarrow -\infty$ . ▣



# GC PARA A QUALQUER (SIMÉTRICA)

INICIALIZAÇÃO:  $x^0 \in \mathbb{R}^m$  QUALQUER,  $d^0 = -\nabla g(x^0)$ ,  $k = 0$ .

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

PASSO 2 (2ª PARADA): SE  $(d^k)^T \nabla^2 g(x^k) d^k = (d^k)^T A d^k \leq 0$   
ENTÃO PARE:  $g$  É ILIMITADA INFERIORMENTE.

PASSO 3 (TAMANHO DO PASSO): DEFINA

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

PASSO 4 (MINIMIZAÇÃO): CALCULE

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

PASSO 5 (DIREÇÃO A-CONJUGADA): CALCULE

$$\beta_k = \frac{(d^k)^T A \nabla f(x^{k+1})}{(d^k)^T A d^k}, \quad d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k d^k.$$

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

---