O MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS

Joelson Joventino Santos[1] - joelson.joventino@estudante.ufcg.edu.br
Sabrina Kely Jacinto Xavier[1] - sabrina.kely@estudante.ufcg.edu.br
Luiz Antônio da Silva Medeiros[1] - luiz.silva@professor.ufcg.edu.br

[1]Universidade Federal de Campina Grande, Unidade Acadêmica de Matemática - Campina Grande, PB, Brasil

Resumo: *Os Métodos Gradientes Conjugados têm sido estudados desde a década de 1950, a motivação para tal era a solução de sistemas provenientes da discretização de equações diferenciais parciais viabilizadas pela entrada dos computadores nos cálculos científicos. Neste presente trabalho, buscamos apresentar e introduzir o Método dos Gradientes Conjugados, desde a sua fundamentação teórica à implementação do algoritmo estabelecido pelo Método, estabelecendo assim suas propriedades e aplicações.*
Palavras-chave*: Gradiente Conjugado; Otimização; Programação Não-Linear; Métodos Computacionais*

1. Introdução

Os Métodos Gradientes Conjugados (MGC) têm sido estudados desde a década de 1950, a motivação para tal era a solução de sistemas provenientes da discretização de equações diferenciais parciais viabilizadas pela entrada dos computadores nos cálculos científicos. A base para o que seria futuramente desenvolvido é amplamente creditado ao trabalho de Hestenes e Stiefel (1952).

Para uma matriz A definida positiva, resolver sistemas da forma $Ax = b$, equivale a minimizar a função vetorial

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c,$$

onde $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \in \mathbb{R}^n$. Com efeito, sendo A definida positiva, a função quadrática é convexa e portanto possui um único ponto critico que é seu minimizador. Ou seja,

$$x^* = argmin\left\{\frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c, \quad x \in \mathbb{R}^n\right\} \Leftrightarrow \nabla f(x^*) = 0 \Leftrightarrow Ax^* = b.$$

Iremos inicialmente, apresentar algumas definições e resultados importantes acerca da construção do Método dos Gradientes Conjugados de forma a apresentar as ferramentas utilizadas no desenvolvimento teórico. Dessa forma, os resultados a seguir são cruciais para um melhor entendimento da parte prática do MGC.

Seja A uma matriz $n \times n$ simétrica definida positiva. Os vetores $d_0, d_1, \cdots, d_k$ são chamados A-conjugados se

$${d_i}^T Ad_j = 0, \quad \text{para todo} \quad i \neq j.$$

com $i, j = 0, 1, \cdots, k$.

Perceba que essa definição pode ser ampliada para matrizes que não sejam definidas positivas. Porém, caso A seja definida positiva e $d_0, d_1, \cdots, d_k$ não nulos, então esses vetores são linearmente independentes.

Teorema 1. *Considere o problema*

$$minimize \quad f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c,$$

onde $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ é simétrica definida positiva, $b \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$. Sejam $d_0, d_1, \cdots, d_{n-1}$ direções A-conjugadas e seja $x_0 \in \mathbb{R}^n$ um ponto inicial arbitrário. Definimos

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k,$$

onde λ_K é o passo ótimo da minimização de $f(x_k + \lambda d_k)$. Segue daí os seguintes resultados:

(i) $\lambda_k = \dfrac{-\nabla f(x_k)^T d_k}{{d_k}^T A d_k}$;

(ii) $\nabla f(x_k)^T d_j = 0,\ j = 0, 1, \cdots, k-1$;

(iii) x_n *é o mínimo de* f *em* $\mathbb{R}^n$.

Teorema 2. ***(Teorema dos Subespaços Expandidos)*** *Sob as mesmas hipóteses do Teorema 1, temos que* x_k *minimiza* f *em* $B_k = \{d_0, d_1, \cdots, d_{k-1}\}$*, para* $k = 1, \cdots, n$.

2. Metodologia

Esta foi uma pesquisa realizada de forma exploratória, onde estudamos os principais livros e artigos de autores que são referência na área de Otimização, dentre eles Friedlander (1994), Bertsekas (1996), Burden e Faires (2003), Martinez e Santos (2020), Izmailov e Solodov (2018). Semanalmente eram expostos, em encontros; nossos estudos na forma de seminários, nesses seminários sob orientação do Prof. Dr. Luiz Antônio da Silva Medeiros discutimos e demonstramos todos os conceitos aqui apresentados.

3. Resultado e discussão

O método de Gradiente Conjugado (MGC) proposto por Hestenes e Stiefel, no ano de 1952, gera um conjunto de n direções conjugadas e de descida para $f : d_0, d_1, \cdots, d_{n-1}$, com $d_0 = -\nabla f(x_0)$ e

$$d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k, \tag{1}$$

onde β_k é um escalar e deve ser escolhido de modo que duas direções seguidas d_k e d_{k+1} sejam A-conjugadas, ou seja, $d_{k+1}^T A d_k = 0$, assim

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^T A d_k}{d_k^T A d_k}. \tag{2}$$

Teorema 3. *As direções* d_k, $k = 0, 1, \cdots, n-1$ *gerados por 1 e 2 são direções A-conjugadas.*

Teorema 4. *Depois de* k *iterações do MGC, os gradientes* $\nabla f(x_0), \nabla f(x_1), \cdots, \nabla f(x_{k-1})$ *são mutuamente ortogonais.*

A maneira de calcular o resíduo r_k em uma iteração k ($r_k = b - Ax_k = -\nabla f(x_k)$), assim como λ_k e β_k, não é única, existem diversas fórmulas cujas combinações fornecem várias versões do MGC. No entanto, apesar de que todas essas versões sejam matematicamente equivalentes, sua implementação computacional não é. Buscamos a versão que apresenta em termos de trabalho computacional, memória gasta e precisão. Segundo Bertsekas (1996) tal versão calcula r_k, λ_k e β_k da seguinte forma:

(i) $\lambda_k = \dfrac{{r_k}^T r_k}{{d_k}^T A d_k}$;

(ii) $r_{k+1} = r_k - \lambda_k A d_k$;

(iii) $\beta_k = \dfrac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{{r_k}^T r_k}$.

Através da construção feita até aqui com base nos últimos resultados, podemos exibir um algoritmo de Gradiente Conjugado propício ao uso com fins de otimização de funções quadráticas:

- Inicialização: São dados a estimativa $0 < x_0 \in \mathbb{R}^n$ e $\epsilon > 0$;

  $d_0 = r_0 = -\nabla f(x_0) = b - Ax_0$; (se $d_0 = 0$ paramos)

  $\delta_0 = {r_0}^T r_0$;

  $k = 0$;

- Para $k = 0, 1, \cdots$

  $h_k = Ad_k$; $\lambda_k = \dfrac{\delta_0}{{d_k}^T h_k}$;

  $x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$; $r_{k+1} = r_k + \lambda_k d_k$; (se $< r_k$ devolve)

  Se $||r_{k+1}|| < \epsilon$, saída com $x_* = x_{k+1}$; (paramos)

  $\delta_1 = {r_{k+1}}^T r_{k+1}$;

  $\beta_k = \dfrac{\delta_1}{\delta_0}$;

  $\delta_0 = \delta_1$; (aqui muda a iteração)

  $d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k d_k$.

Quanto à memória ocupada: são necessários vetores de dimensão n para armazenar h, x, r, d e uma matriz de dimensão $n \times n$ para armazenar A (numa implementação para sistemas esparsos, o armazenamento de A depende de seu número de elementos não nulos e da estrutura de dados usada).

Quanto ao esforço computacional gasto: temos, por iteração, um produto de matriz por vetor (Ad_k) e dois produtos internos, além das multiplicações por escalar e adições envolvidas nas fórmulas recursivas. Logo, o número de operações por iteração é $O(2n^2)$.

Com considerações adicionais pode se mostrar um resultado "mais forte"sobre a convergência do MGC, conforme estabelece o teorema a seguir.

Teorema 5. *Se a matriz A de ordem n possui n autovalores distintos, então O MGC converge, no máximo, em n iterações.*

Por fim, apresentamos em prática o algoritmo recém exibido e a aplicação do Método do Gradiente Conjugado. Optamos por exibir um exemplo de uma função quadrática bidimensional, justamente para acompanhar geometricamente as sequências geradas pelo métodos evidenciando as suas propriedades.

Exemplo 1. *Dada a função quadrática $f(x) = \dfrac{3}{2}x^2 - 2x + 2xy + 8y + 3y^2$, ao aplicarmos o algoritmo apresentado, tomando como ponto inicial $x_0 = (-2, 2)$, obtemos os seguintes resultados:*

	d_i	δ_i	h_i	λ_i	x_{i+1}	r_{i+1}	β_i
$i = 0$	$(12; 8)$	208	$(52; 72)$	$13/75$	$(0.08; -0.613)$	$(2.986; -4.48)$	0.139
$i = 1$	$(4.654; -3.368)$	28.9865	$(7.226; -10.9)$	0.4121	$(2; -2)$	$(0; 0)$	-

Tabela 1: Resultado do Algoritmo MGC aplicado à função do Exemplo 1

Dessa forma, como $r_2 = (0; 0)$ *podemos concluir que* $x_2 = (2; -2)$ *é o minimizador desta função, ou seja, o vetor* $x^* = x_2 = (2; -2)$ *é solução do sistema* $Ax = b$*, onde*

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \quad e \quad b = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}$$

Graficamente, temos a seguinte representação do processo de minimização desta função através do algoritmo:

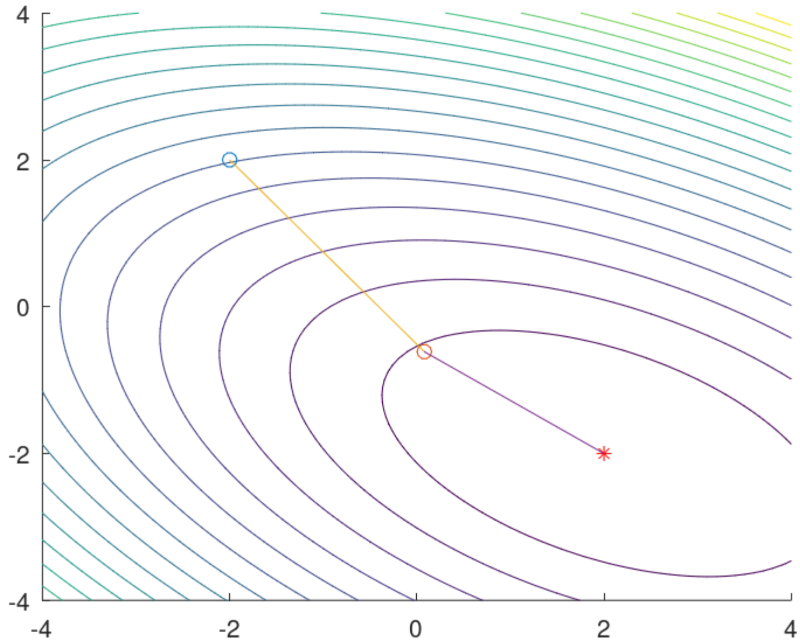

Figura 1: Algoritmo MGC do Exemplo 1 utilizando o OCtave.

4. Conclusões

A pesquisa permitiu estabelecer o Método dos Gradientes Conjugados, bem como suas propriedades, de modo a permitir definir o seu algoritmo para obter os pontos criticos de funções quadráticas ao tempo de analisar a sua convergência. Para isto, aplicamos o método em exemplos bidimensionais para melhor visualização e entendimento do algoritmo. Entretanto, da pesquisa, entendemos que o MGC pode ser utilizado também para matrizes definidas negativas e algumas vezes, para matrizes quadradas arbitrárias, estas sem garantias de que o algoritmo convirja.

Agradecimentos

O presente trabalho é fruto de uma Iniciação Científica parcialmente financiada pelo MEC/FNDE/PET.

Referências

BERTSEKAS, D. P. *Nonlinear programming*. Belmont, Massachusetts: Athena Scientific, 1996. Citado na página 2.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Análise Numérica*. São Paulo - SP: Thompson Learning, 2003. Citado na página 2.

FRIEDLANDER, A. *Elementos de programação não linear*. Campinas - SP: Editora da Unicamp, 1994. Citado na página 2.

HESTENES, M. R.; STIEFEL, E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of research of the National Bureau of Standards*, v. 49, p. 409–436, 1952. Citado na página 1.

IZMAILOV, A.; SOLODOV, M. *Otimização: Métodos Computacionais. Volume 2*. Rio de Janeiro - RJ: IMPA, 2018. Citado na página 2.

MARTINEZ, J. M.; SANTOS, S. A. *Métodos Computacionais de Otimização*. Campinas - SP: Editora da Unicamp, 2020. Citado na página 2.