– Typeset by GMNI & FoilTEX **–**

MÉTODOS SEMI-ITERATIVOS:
Direcciones Conjugadas. Gradientes Conjugados

F. Navarrina, I. Colominas, M. Casteleiro, H. Gómez, J. París

GMNI — GRUPO DE MÉTODOS NUMÉRICOS EN INGENIERÍA

Departamento de Métodos Matemáticos y de Representación
Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos
Universidad de A Coruña, España

e-mail: fnavarrina@udc.es
página web: http://caminos.udc.es/gmni

ÍNDICE

Direcciones Conjugadas (Ia)

Sea el sistema

$$\underset{\sim}{A}\bar{x} = \bar{b}, \qquad \text{con} \quad \begin{cases} \underset{\sim}{A} = \underset{\sim}{A}^T & (\underset{\sim}{A} \text{ SIMÉTRICA}), \\ \bar{v}^T \underset{\sim}{A} \bar{v} > 0 \quad \forall \bar{v} \neq \bar{0} & (\underset{\sim}{A} \text{ DEF. +}). \end{cases}$$

Sean los vectores conjugados respecto a la matriz $\underset{\sim}{A}$ (o $\underset{\sim}{A}$–conjugados),

$$\{\bar{s}_i\}_{i=1,n}, \quad \text{tales que} \quad \bar{s}_i^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_j \begin{cases} = 0 \text{ si } i \neq j, \\ \neq 0 \text{ si } i = j, \end{cases}$$

$\Longrightarrow$ **FORMAN UNA BASE.**

Direcciones Conjugadas (Ib)

Pues…

REDUCCIÓN AL ABSURDO

Hipótesis: $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \bar{s}_i = \bar{0}$ con algún $\lambda_j \neq 0$,

entonces $\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \bar{s}_i \right) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left(\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_i \right) = \lambda_j \underbrace{\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_j}_{>0} = 0,$

luego $\lambda_j = 0 \quad \forall j$ (ABSURDO).

Por tanto, los vectores conjugados son linealmente independientes y (puesto que su número n iguala al orden de la matriz) forman una base del correspondiente espacio vectorial.

EXPRESIÓN DE LA SOLUCIÓN

Sean

$\bar{x} = \underset{\sim}{A}^{-1}\bar{b}$ la solución del problema, y

$\bar{x}_0$ una aproximación a $\bar{x}$.

El vector $(\bar{x} - \bar{x}_0)$ se puede escribir como combinación lineal de los elementos de la base de vectores conjugados.

Luego,

$$\bar{x} - \bar{x}_0 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \bar{s}_i \Longrightarrow \boxed{\bar{x} = \bar{x}_0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \bar{s}_i.}$$

Pero,

$$\underset{\sim}{A}\bar{x} = \bar{b} \qquad \Longrightarrow \qquad \underset{\sim}{A}\left(\bar{x}_0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \bar{s}_i\right) = \bar{b}$$

$$\Longrightarrow \qquad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \underset{\sim}{A}\bar{s}_i = \left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right)$$

y premultiplicando por $\bar{s}_j^T$ obtenemos

$$\bar{s}_j^T\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \underset{\sim}{A}\bar{s}_i\right) = \bar{s}_j^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right) \qquad \Longrightarrow \qquad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \left(\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A}\bar{s}_i\right) = \bar{s}_j^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right),$$

$$\Longrightarrow \qquad \alpha_j \left(\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A}\bar{s}_j\right) = \bar{s}_j^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right).$$

Por tanto

$$\boxed{\alpha_j = \frac{\bar{s}_j^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right)}{\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A}\bar{s}_j}, \qquad j = 1, \ldots, n.}$$

FORMULACIÓN SEMI–ITERATIVA:

$$
\begin{aligned}
&\text{Dados}\quad \bar{x}_0 \quad y \quad \bar{s}_1 && \longrightarrow \quad \bar{x}_1 = \bar{x}_0 + \alpha_1 \bar{s}_1, && \text{con} \quad \alpha_1 = \frac{\bar{s}_1^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right)}{\bar{s}_1^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_1},\\
&\bar{x}_1 \quad y \quad \bar{s}_2 && \longrightarrow \quad \bar{x}_2 = \bar{x}_1 + \alpha_2 \bar{s}_2, && \text{con} \quad \alpha_2 = \frac{\bar{s}_2^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right)}{\bar{s}_2^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_2},\\
&\vdots && && \\
&\bar{x}_{n-1} \quad y \quad \bar{s}_n && \longrightarrow \quad \bar{x}_n = \bar{x}_{n-1} + \alpha_n \bar{s}_n, && \text{con} \quad \alpha_n = \frac{\bar{s}_n^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right)}{\bar{s}_n^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_n}.
\end{aligned}
$$

Finalmente

$$
\begin{aligned}
\bar{x}_n &= \left(\left(\ldots\left((\bar{x}_0 + \alpha_1\bar{s}_1) + \alpha_2\bar{s}_2\right) + \ldots\right) + \alpha_n\bar{s}_n\right)\\
&= \bar{x}_0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \bar{s}_i = \bar{x} = \underset{\sim}{A}^{-1}\bar{b}.
\end{aligned}
$$

Métodos de Direcciones Conjugadas (IIa)

EN GENERAL:

Dados $\bar{x}_0, \quad \{\bar{s}_i\}_{i=1,n}$

$$\boxed{\bar{x}_{k+1} = \bar{x}_k + \alpha_{k+1}\bar{s}_{k+1}, \quad \text{con} \quad \alpha_{k+1} = \frac{\bar{s}_{k+1}^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right)}{\bar{s}_{k+1}^T\underset{\sim}{A}\bar{s}_{k+1}}, \quad k = 0, \ldots, n-1}$$

y $\bar{x}_n = \bar{x} = \underset{\sim}{A}^{-1}\bar{b}$ (SALVO ERRORES DE REDONDEO).

Pero también,

$$\alpha_{k+1} = \frac{\bar{s}_{k+1}^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right)}{\bar{s}_{k+1}^T\underset{\sim}{A}\bar{s}_{k+1}} = \frac{\bar{s}_{k+1}^T\left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_k\right)}{\bar{s}_{k+1}^T\underset{\sim}{A}\bar{s}_{k+1}},$$

pues

$$\bar{x}_k = \bar{x}_0 + \alpha_1\bar{s}_1 + \ldots + \alpha_k\bar{s}_k \quad \Longrightarrow \quad \bar{s}_{k+1}^T\underset{\sim}{A}\bar{x}_k = \bar{s}_{k+1}^T\underset{\sim}{A}\bar{x}_0 +$$

$$\alpha_1 \underbrace{\bar{s}_{k+1}^T\underset{\sim}{A}\bar{s}_1}_{0} + \ldots + \alpha_k \underbrace{\bar{s}_{k+1}^T\underset{\sim}{A}\bar{s}_k}_{0}.$$

Y FINALMENTE:

Dados $\bar{x}_0, \quad \{\bar{s}_i\}_{i=1,n}$

$$\boxed{\boxed{\left.\begin{array}{l} \bar{r}_k = \bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_k, \quad \alpha_{k+1} = \dfrac{\bar{s}_{k+1}^T \bar{r}_k}{\bar{s}_{k+1}^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_{k+1}}, \\ \\ \bar{x}_{k+1} = \bar{x}_k + \alpha_{k+1}\bar{s}_{k+1}, \end{array}\right\} \qquad k = 0, \ldots, n-1,}}$$

y $\quad \bar{x}_n = \bar{x} = \underset{\sim}{A}^{-1}\bar{b}$ (SALVO ERRORES DE REDONDEO).

PROBLEMA:

¿Cómo se genera la base de vectores conjugados $\{\bar{s}_i\}_{i=1,n}$?

OBTENCIÓN DE UNA BASE DE VECTORES CONJUGADOS $\{\bar{s}_i\}_{i=1,n}$

- **MÉTODO DE GRAM-SCHMIT**

- **MÉTODO DE GRADIENTES CONJUGADOS**
  (caso particular de Gram-Schmit)

Método de Gram-Schmit

Se eligen los vectores $\{\bar{v}_i\}_{i=1,n}$ linealmente independientes.

Se obtienen los vectores conjugados $\{\bar{s}_i\}_{i=1,n}$ en la forma:

$$\begin{cases} \bar{s}_1 = \bar{v}_1 \\ \bar{s}_2 = \bar{v}_2 + \beta_1^2 \bar{s}_1 \\ \bar{s}_3 = \bar{v}_3 + \beta_1^3 \bar{s}_1 + \beta_2^3 \bar{s}_2 \\ \ldots \\ \bar{s}_k = \bar{v}_k + \beta_1^k \bar{s}_1 + \beta_2^k \bar{s}_2 + \ldots + \beta_{k-1}^k \bar{s}_{k-1} \\ \ldots \\ \bar{s}_n = \bar{v}_n + \beta_1^n \bar{s}_1 + \beta_2^n \bar{s}_2 + \ldots \qquad + \beta_{n-1}^n \bar{s}_{n-1} \end{cases}$$

con las condiciones (que permiten calcular los coeficientes $\left\{\beta_i^k\right\}_{i=1,k-1}$)

$$\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_k = 0, \quad j = 1, \ldots, k-1.$$

Métodos de Direcciones Conjugadas (IIIc)

Luego

$$\left.\begin{array}{l} \bar{s}_k = \bar{v}_k + \displaystyle\sum_{i=1}^{k-1} \beta_i^k \bar{s}_i \\ \bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_k = 0, \end{array}\right\} \Longrightarrow \quad \bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \left(\bar{v}_k + \sum_{i=1}^{k-1} \beta_i^k \bar{s}_i \right) = 0, \qquad j = 1, \ldots, k-1,$$

y por consiguiente

$$\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{v}_k + \overbrace{\sum_{i=1}^{k-1} \beta_i^k \left(\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_i \right)}^{\beta_j^k \left(\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_j \right)} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \beta_j^k = -\frac{\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{v}_k}{\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_j} \qquad j = 1, \ldots, k-1.$$

Métodos de Direcciones Conjugadas (IIId)

Y FINALMENTE:

Dados $\{\bar{v}_i\}_{i=1,n}$

$$\boxed{\boxed{\begin{array}{l} \bar{s}_1 = \bar{v}_1, \\ \left\{ \begin{array}{l} \beta_j^k = -\dfrac{\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{v}_k}{\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_j}, \quad j = 1, \ldots, k-1, \\ \\ \bar{s}_k = \bar{v}_k + \displaystyle\sum_{i=1}^{k-1} \beta_i^k \bar{s}_i, \end{array} \right\} \quad k = 2, \ldots, n. \end{array}}}$$

PROBLEMA: **Gran coste computacional, $\mathcal{T}(n^3)$.**

Métodos de Direcciones Conjugadas (IV)

PREGUNTA:

¿Es posible elegir (hábilmente) los vectores $\{\bar{v}_i\}_{i=1,n}$ de forma que la mayor parte de los coeficientes $\{\beta_i^k\}_{i=1,k-1;\ k=2,n}$ sean nulos?

Respuesta:

SÍ: Método de Gradientes Conjugados

Método de Gradientes Conjugados [CG] (Ia)

Dado el sistema

$$\underset{\sim}{A}\bar{x} = \bar{b},$$

definimos la función cuadrática

$$f(\bar{x}) = \frac{1}{2}\bar{x}^T \underset{\sim}{A}\bar{x} - \bar{b}^T\bar{x} + c,$$

cuyo gradiente es

$$\bar{\nabla} f = \left(\frac{df}{d\bar{x}}\right)^T = \underset{\sim}{A}\bar{x} - \bar{b}.$$

Luego,

$\bar{\nabla} f(\bar{x}_i) = -\bar{r}_i,$ siendo $\bar{r}_i = \bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_i$ el residuo en la aproximación $\bar{x}_i$.

Si elegimos como vectores $\{\bar{v}_i\}_{i=1,n}$ los gradientes (cambiados de signo)

$$\begin{cases} \bar{v}_1 = -\bar{\nabla} f(\bar{x}_0) & = \bar{r}_0 & = \left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0\right) \\ \bar{v}_2 = -\bar{\nabla} f(\bar{x}_1) & = \bar{r}_1 & = \left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_1\right) \\ \bar{v}_3 = -\bar{\nabla} f(\bar{x}_2) & = \bar{r}_2 & = \left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_2\right) \\ \dots \\ \bar{v}_k = -\bar{\nabla} f(\bar{x}_{k-1}) & = \bar{r}_{k-1} & = \left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_{k-1}\right) \\ \dots \\ \bar{v}_n = -\bar{\nabla} f(\bar{x}_{n-1}) & = \bar{r}_{n-1} & = \left(\bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_{n-1}\right) \end{cases}$$

entonces sucede que (*)

$$\beta_j^k = -\frac{\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{r}_{k-1}}{\bar{s}_j^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_j} \begin{cases} = 0, & j = 1, \dots, k-2 \\ \neq 0, & j = k-1 \end{cases}$$

(*) Se comprueba que esto es así aunque no es evidente (ver equivalencias).

FINALMENTE, LA BASE DE **GRADIENTES CONJUGADOS** ES (*):

$$\boxed{\boxed{\begin{array}{ll}\left\{\begin{array}{l}\bar{r}_0 = \bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0 \\ \\ \bar{s}_1 = \bar{r}_0,\end{array}\right\} & \\ \left\{\begin{array}{l}\bar{r}_{k-1} = \bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_{k-1} \\ \\ \beta_{k-1}^{k} = -\dfrac{\bar{s}_{k-1}^{T}\underset{\sim}{A}\bar{r}_{k-1}}{\bar{s}_{k-1}^{T}\underset{\sim}{A}\bar{s}_{k-1}}, \\ \\ \bar{s}_k = \bar{r}_{k-1} + \beta_{k-1}^{k}\bar{s}_{k-1},\end{array}\right\} & k = 2, \ldots, n.\end{array}}}$$

(*) EN LO SUCESIVO PRESCINDIREMOS DEL SUPERÍNDICE k EN β_{k-1}^{k}
(ya que no es necesario).

Método de Gradientes Conjugados [CG] (IIa)

PRIMERA ITERACIÓN $k = 0$

Dado $\bar{x}_0 \quad \longrightarrow \quad \bar{r}_0 = \bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_0,$

$$\bar{s}_1 = \bar{r}_0, \qquad \longrightarrow \alpha_1 = \frac{\bar{s}_1^T \; \bar{r}_0}{\bar{s}_1^T \; \underset{\sim}{A} \; \bar{s}_1},$$

$$\bar{x}_1 = \bar{x}_0 + \alpha_1 \bar{s}_1.$$

Método de Gradientes Conjugados [CG] (IIb)

ITERACIONES SIGUIENTES $k = 1, \dots, n-1$

Dado $\bar{x}_k \longrightarrow \bar{r}_k = \bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_k, \longrightarrow \beta_k = -\dfrac{\bar{s}_k^T \underset{\sim}{A} \bar{r}_k}{\bar{s}_k^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_k},$

$$\bar{s}_{k+1} = \bar{r}_k + \beta_k \bar{s}_k, \longrightarrow \alpha_{k+1} = \frac{\bar{s}_{k+1}^T \bar{r}_k}{\bar{s}_{k+1}^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_{k+1}},$$

$$\bar{x}_{k+1} = \bar{x}_k + \alpha_{k+1}\bar{s}_{k+1},$$

Y $\bar{x}_n$ verifica $\underset{\sim}{A}\bar{x}_n = \bar{b}$ (SALVO ERRORES DE REDONDEO).

Método de Gradientes Conjugados [CG] (IIc)

El algoritmo se detendrá al finalizar el paso $k\dots$

- si $k = n - 1$, pues $\bar{x}_{k+1} = \bar{x}_n$ y por tanto verifica

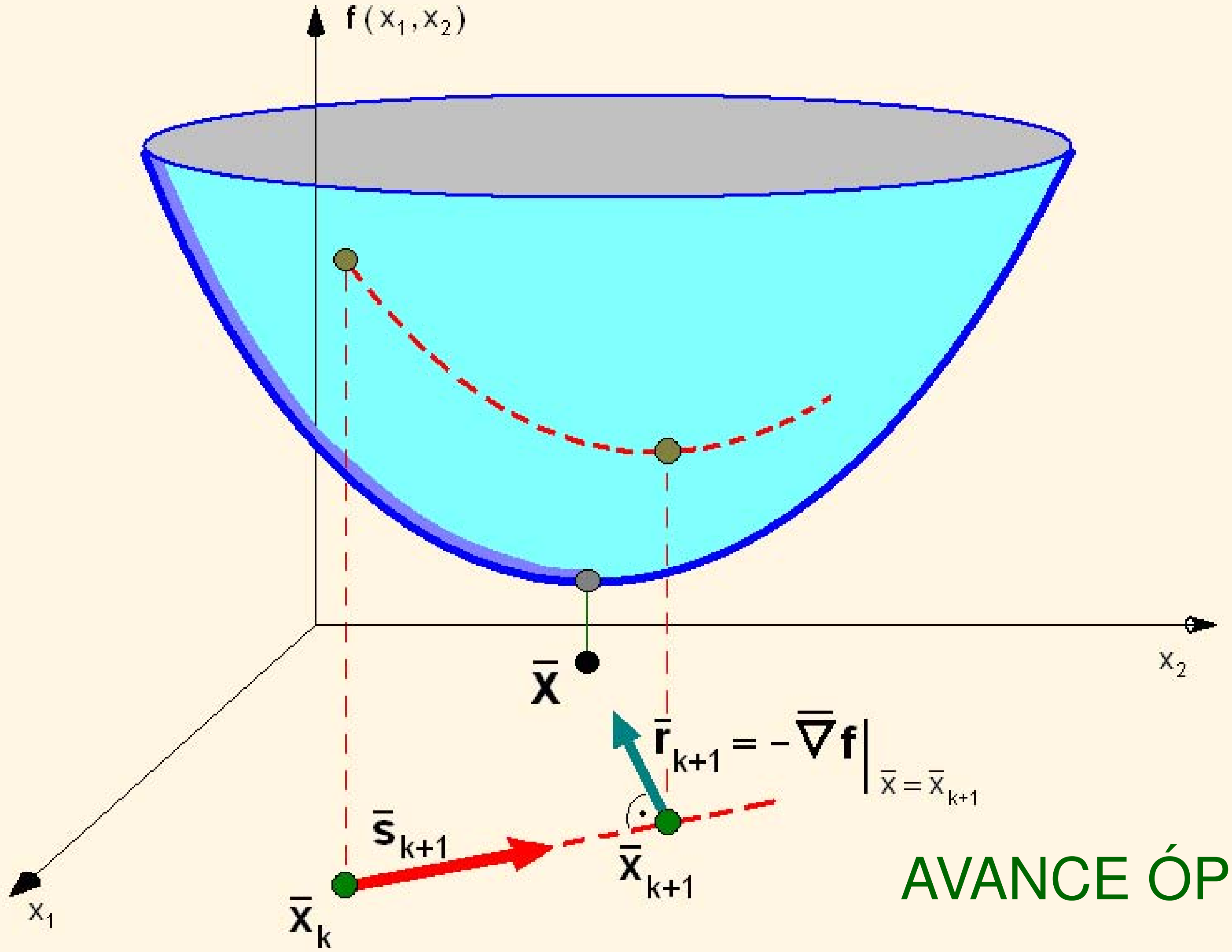
$$\bar{r}_{k+1} = \bar{b} - \underset{\sim}{A}\bar{x}_{k+1} = 0 \qquad \text{(salvo errores de redondeo *)},$$

- o si ha convergido según un criterio tipo

$$\begin{cases} \|\bar{x}_{k+1} - \bar{x}_k\| \leq \max\{\varepsilon_x, r_x \|\bar{x}_k\|\} & \text{y} \\ \|\bar{r}_{k+1}\| \leq \max\{\varepsilon_r, r_r \|\bar{b}\|\} & \end{cases}$$

(*) Se suelen realizar algunas iteraciones más para refinar la solución.

Método de Gradientes Conjugados [CG] (IIIe)



AVANCE ÓPTIMO

Método de Gradientes Conjugados [CG] (IV)

Fórmulas equivalentes para el cálculo del coeficiente β_k

$$\beta_k = -\frac{\bar{s}_k^T \underset{\sim}{A} \bar{r}_k}{\bar{s}_k^T \underset{\sim}{A} \bar{s}_k}$$

$$\beta_k = \frac{[\bar{r}_k - \bar{r}_{k-1}]^T \bar{r}_k}{-[\bar{r}_k - \bar{r}_{k-1}]^T \bar{s}_k}$$ HESTENES–STIEFEL

$$\beta_k = \frac{\bar{r}_k^T \bar{r}_k}{\bar{r}_{k-1}^T \bar{r}_{k-1}}$$ FLETCHER–REEVES

$$\beta_k = \frac{[\bar{r}_k - \bar{r}_{k-1}]^T \bar{r}_k}{\bar{r}_{k-1}^T \bar{r}_{k-1}}$$ POLAK–RIBIERE

$$\beta_k = \frac{\bar{r}_k^T \bar{r}_k}{-[\bar{r}_k - \bar{r}_{k-1}]^T \bar{s}_k}$$ MYERS