Método de Gradientes Conjugados.

Lourdes Fabiola Uribe Richaud & Juan Esaú Trejo Espino.

Instituto Politécnico Nacional
Escuela Superior de Física y Matemáticas

February 17, 2015

1 Método de Direcciones Conjugadas.

El método de direcciones conjugadas es un método iterativo para resolver un sistema lineal de ecuaciones $Ax = b$ donde $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R}^n)$ es simétrica y definida positiva.

Como sabemos el resolver el sistema de ecuaciones es equivalente al problema de minimizar la función $\phi(x)$ definida como:

$$\phi(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b$$

Notemos que $\nabla\phi(x) = Ax - b$. Entonces definimos el resido en cada iteración como $r(x_k) = \nabla\phi(x_k) = Ax_k - b$.

Definición 1 *Sea $\mathbf{P} = \{p_0, \ldots, p_k\}$ un conjunto de vectores no nulos, sea $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R}^n)$ simétrica y definida positiva. Se dice que $\mathbf{P}$ es un conjunto conjugado con respecto a A si*

$$< p_i, p_j >_A = p_i^T Ap_j = 0 \qquad \textit{para toda} \quad i \neq j$$

Se puede demostrar que cualquier conjunto de vectores que es conjugado, es además un conjunto linealmente independiente. Así, dado un punto x_0 y un conjunto conjugado $\{p_0, \ldots, p_{n-1}\}$, el método de direcciones conjugadas genera la sucesión

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

donde α_k es el valor que minimiza la función $g(\alpha) = \phi(x_k + \alpha p_k)$ y está definido por

$$\alpha_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k A p_k}$$

Teorema 1 *Sea $x_0 \in \mathbb{R}^n$ y $\{p_1, \ldots, p_{n-1}\}$ un conjunto conjugado. Entonces la sucesión generada por el algoritmo de direcciones conjugadas converge a la solución del sistema $Ax = b$ en a lo más n iteraciones.*

Demostración 1 *Denotemos por x^* a la solución del sistema $Ax = b$. Dado que el conjunto de direcciones $\{p_0, p_1, \ldots, p_{n-1}\}$ es linealmente independiente éste genera al espacio y podemos escribir la diferencia de x^* y x_0 de la siguiente manera:*

$$x^* - x_0 = \sigma_0 p_0 + \sigma_1 p_1 + \ldots + \sigma_{n-1} p_{n-1} \tag{1}$$

donde $\sigma_k \in \mathbb{R}$ para $k = 0, \ldots, n-1$. Al multiplicar (1) por $p_k^T A$ y usando la propiedad de conjugados tenemos

$$\begin{aligned} p_k^T A(x^* - x_0) &= \sigma_0 p_k^T A p_0 + \ldots + \sigma_k p_k^T A p_k + \ldots + \sigma_{n-1} p_k^T A p_{n-1} \\ p_k^T A(x^* - x_0) &= \sigma_k p_k^T A p_k \\ \sigma_k &= \frac{p_k^T A(x^* - x_0)}{p_k^T A p_k} \end{aligned} \tag{2}$$

Como x_k es generada por el método de direcciones conjugados, tenemos que

$$x_k = x_0 + \alpha_0 p_0 + \ldots + \alpha_{k-1} p_{k-1}$$

Multiplicamos ésta expresión por $p_k^T A$ y usando la propiedad de conjugado

$$\begin{aligned} p_k^T A(x_k - x_0) &= \alpha_0 p_k^T A p_0 + \ldots + \alpha_{k-1} p_k^T A p_{k-1} = 0 \\ p_k^T A x_k &= p_k^T A x_0 \end{aligned}$$

por lo que

$$p_k^T A(x^* - x_0) = p_k^T A(x^* - x_k) = p_k^T (Ax^* - Ax_k) = p_k^T (b - Ax_k) = -p_k^T r_k$$

Usando esta expresión en (2) encontramos que

$$\sigma_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k A p_k} = \alpha_k$$

Finalmente de (1) tenemos que

$$x^* = x_0 + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j p_j = x_n$$

Por lo que la solución x^* se obtiene a lo más al calcular en el $n-$ésimo paso a x_n.

Teorema 2 *Sea $x_0 \in \mathbb{R}^n$ un punto inicial y supongamos que la sucesión $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ es generada por el algoritmo de Direcciones Conjugadas. Entonces:*

1. $r_k^T p_i = 0$ *para* $i = 0, \ldots, k-1$
2. x_k *es el punto que minimiza* $\phi(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ *sobre* $x + gen\{p_0, \ldots, p_{k-1}\}$.

Demostración 2 *Primero mostraremos que* $r_k^T p_i = 0$ *para* $i = 0, \ldots, k-1$. *Procedemos por inducción.*

Para $k = 0$. *Tenemos la fórmula recursiva del residuo* $r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$, *entonces:*

$$r_1 = r_0 + \alpha_0 A p_0,$$

trasponiendo esta expresión y multiplicandola por p_0, *tenemos:*

$$r_1^T p_0 = r_0^T p_0 + \alpha_0 p_0^T A p_0,$$

sustituyendo $alpha_0$ *por su expresión en el algoritmo vemos que:*

$$r_1^T p_0 = r_0^T p_0 - \frac{r_0^T p_0}{p_0^T A p_0} p_0^T A p_0 = 0.$$

Por lo tanto se cumple para $k = 0$.

Ahora suponemos que se cumple para algún $k-1$, *es decir,* $r_{k-1}^T p_i = 0$ *para* $i = 0, \ldots, k-2$. *Queremos probar que se cumple para* k. *Observe que:*

$$r_k = r_{k-1} + \alpha_{k-1} A p_{k-1},$$

trasponiendo esta expresión y multiplicando la por p_{k-1}, *tenemos:*

$$r_k^T p_{k-1} = r_{k-1}^T p_{k-1} + \alpha_{k-1} p_{k-1}^T A p_{k-1},$$

sustituyendo $alpha_{k-1}$ *por su expresión en el algoritmo vemos que:*

$$r_k^T p_{k-1} = r_{k-1}^T p_{k-1} - \frac{r_{k-1}^T p_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}} p_{k-1}^T A p_{k-1} = 0.$$

Falta ver que sucede con las direcciones conjudas p_i *para* $i = 0, \ldots, k-2$. *Note que:*

$$r_k = r_{k-1} + \alpha_{k-1} A p_{k-1},$$

trasponiendo esta expresión y multiplicando la por p_i, *tenemos:*

$$r_k^T p_i = r_{k-1}^T p_i + \alpha_{k-1} p_{k-1}^T A p_i = 0 \ \ parai = 0, \ldots, k-2.$$

Esto debido a la hipótesis inductiva y a que p_i *para* $i = 0, \ldots, k-2$ *son direcciones conjugadas. Por lo tanto* $r_k^T p_i = 0$ *para* $i = 0, \ldots, k-1$.

Ahora mostraremos que un punto $\bar{x}$ *minimiza* ϕ *sobre* $x + gen\{p_0, \ldots, p_{k-1}\}$ *si y sólo si* $r(\bar{x}^T) p_i = 0$ *para* $i = 0, \ldots, k-1$, *esto por las condiciones de optimalidad* $r(x) = \bigtriangledown \phi(x) = 0$. *Definimos una función:*

$$h(\sigma) := \phi(x_0 + \sigma_0 p_0 + \ldots + \sigma_{k-1} p_{k-1}),$$

como h *es un función cuadrática y convexa, posee un único punto* σ^* *que minimiza la función que satisface:*

$$\frac{\delta h(\sigma^*)}{\delta \sigma_i} = 0 \ \ para \ \ i = 0, \ldots, k-1,$$

por la regla de la cadena tenemos entonces que

$$\bigtriangledown\phi(x_0+\sigma_0^* p_0+\ldots+\sigma_{k-1}^* p_{k-1})^T p_i = 0 \;\; para \;\; i=0,\ldots,k-1,$$

$$\Rightarrow r(\bar{x})^T p_i = 0 \;\; para \;\; i=0,\ldots,k-1.$$

Por lo tanto $\bar{x}$ minimiza ϕ sobre $x + gen\{p_0,\ldots,p_{k-1}\}$. Por lo primero sabemos que x_k satisface que $r(x_k)^T p_i = 0$ para $i=0,\ldots,k-1$, pero $\bar{x}$ es único, por lo tanto $x_k = \bar{x}$.

2 Método de Gradientes Conjugados.

Este método es un método de direcciones conjugadas con una propiedad especial. Esta propiedad es la de generar un nuevo vector p_k usando solamente la dirección anterior p_{k-1}.Por lo que este método no necesita conocer $p_0,\ldots,p_{k-2}$ del conjunto de direcciones conjugadas, automáticamente el vector p_k es conjugados a estos. Esto es una ventaja muy importante computacionalmente, debido a la poca memoria que necesita.

2.1 Características.

Cada dirección se escoge para que sea una combinación lineal de la dirección de máximo descenso $-\bigtriangledown\phi(x_k)$, que es lo mismo que el negativo del residuo $-r_k$ y la dirección previa p_{k-1}, de este modo tenemos:

$$p_k = -r_k + \beta_k p_{k-1}, \tag{3}$$

donde el escalar β_k se determina por la necesidad de que p_k y p_{k-1} sean conjugados respecto a A. Entonces si multiplicamos 3 por $p_{k-1}^T A$ e imponiendo la condición $p_{k-1}^T A p_k = 0$, encontramos que

$$\beta_k = \frac{r_k^T A p_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}}.$$

2.1.1 Algoritmo.

```
function[xn,its]=cg(A,b,tol,its_max)
n=length(b);
xn=zeros(n,1);
r=-b;
p=-r;
its=0;
 while (norm(r)>tol) &&(its<=its_max)
q=A*p;
alpha=(-r'*p)/(p'*q);
xn=xn+alpha*p;
r=r+alpha*q;
beta=(r'*q)/(p'*q);
p=-r+beta*p;
its=its+1;
 end
end
```

Cada dirección de búsqueda p_k y cada residuo r_k esta contenido en un *subespacio de Krylov.*

2.1.2 Preeliminares.

Definición 2 *Sean* $a_1, \ldots, a_m \in \mathbb{R}^n$. *Denotamos por* $gen(a_1, \ldots, a_m)$ *al conjunto de todas las combinaciones lineales de los vectores* $a_1, \ldots, a_m$*:*

$$gen(a_1, \ldots, a_m) := \{x \in \mathbb{R}^n : \exists \lambda_1, \ldots, \lambda_m \in \mathbb{R}, \quad x = \sum_{j=1}^{m} \lambda_j a_j\}$$

Corolario 1 *Sean* $a_1, \ldots, a_k, b_1, \ldots, b_k \in \mathbb{R}^n$ *tales que*

$$gen(a_1, \ldots, a_{k-1}) = gen(b_1, \ldots, b_{k-1}), \quad a_k \in gen(b_1, \ldots, b_k), \quad b_k \in gen(a_1, \ldots, a_k)$$

Entonces $gen(a_1, \ldots, a_k) = gen(b_1, \ldots, b_k)$

Definición 3 *Sean* $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ *y* $v \in \mathbb{R}^n$*, un subespacio de Krylov se define como:*

$$K_j(A, v) := gen\{v, Av, \ldots, A^{j-1}v\}.$$

Lema 1 *Sean* $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, $v \in \mathbb{R}^n$ *y* $x \in K_j(A, v)$. *Entonces* $Ax \in K_{j+1}(A, v)$.

Teorema 3 *Sea* $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ *simétrica y definida positiva. Sea* $p_0 = -r_0$. *Definimos las siguientes fórmulas del método del gradiente conjugado*

$$\begin{aligned} \alpha_k &= -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k} & \qquad r_{k+1} &= r_k + \alpha_k A p_k \\ \beta_k &= \frac{r_k^T A p_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}} & \qquad p_k &= -r_k + \beta_k p_{k-1} \end{aligned}$$

Entonces para la k-ésima iteración del método se cumplen las siguientes propiedades:

i) $gen(r_0, r_1, \ldots, r_k) = gen(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0)$

ii) $gen(p_0, p_1, \ldots, p_k) = gen(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0)$

iii) $p_k^T A p_i = 0 \;\; \forall\, i = 0, \ldots, k-1$

iv) $r_k^T r_i \;\; \forall\, i = 0, \ldots, k-1$

Demostración 3 *Primero procedemos por inducción para demostrar simultáneamente I) y II). Para* $k = 0$*, tenemos que* $gen(r_0) = gen(r_0)$*. Luego por hipótesis sabemos que* $p_0 = -r_0$ *por lo que es claro que* $gen(p_0) = gen(r_0)$*. Ahora suponemos que se cumple para algún* k *y demostraremos que se cumple para* $k+1$*, por lo que nuestra hipotesis inductiva es:*

$$gen(r_0, r_1, \ldots, r_k) = gen(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0) \tag{4}$$

$$gen(p_0, p_1, \ldots, p_k) = gen(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0) \tag{5}$$

Por (5) *tenemos que* $p_k \in gen(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0)$. *Si multiplicamos por* A *obtenemos*

$$Ap_k \in gen(Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^{k+1} r_0)$$

tomando esta expresión y recordando que $r_{k+1} = r_k + \alpha_k Ap_k$ *se puede notar que*

$$r_{k+1} \in gen(r_0, Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^{k+1} r_0) \tag{6}$$

De nuevo por (5) *sabemos que* $A^k r_0 \in gen(p_0, p_1, \ldots, p_k)$. *Si multiplicamos esta expresión por la matriz* A *obtenemos* $A^{k+1} r_0 \in gen(Ap_0, Ap_1, \ldots, Ap_k)$. *Además sabemos que* $Ap_i = \dfrac{r_{i+1} - r_i}{\alpha_i}$ *para* $i = 0, 1, \ldots, k$ *por lo que*

$$A^{k+1} r_0 \in gen(r_0, r_1, \ldots, r_{k+1}) \tag{7}$$

Usando el Corolario 1 con las expresiones (4), (6), (7) *concluimos que*

$$gen(r_0, r_1, \ldots, r_{k+1}) = gen(r_0, Ar_0, \ldots, A^{k+1} r_0)$$

con lo que queda demostrada la propiedad $I)$

Por demostrar la propiedad $II)$. *Note que:*

$$\begin{aligned} gen(p_0, \ldots, p_{k+1}) &= gen(p_0, \ldots, p_k, r_{k+1}) && (8) \\ &= gen(r_0, \ldots, A^k r_0, r_{k+1}) && (9) \\ &= gen(r_0, \ldots, r_k, r_{k+1}) && (10) \\ &= gen(p_0, \ldots, A^k r_0, A^{k+1} r_0) && (11) \end{aligned}$$

Donde (8) *se obtiene por la forma de calcular* p_{k+1}, (9) *y* (10) *suceden por la hipótesis inductiva y* (11) *por la demostración anterior.*

Para demostrar la propiedad $III)$ *de nuevo usamos inducción matemática. Tomando* $k = 1$ *vemos que*

$$p_1^T = -r_1^T + \beta_1 p_0^T = -r_1^T + \frac{r_1^T Ap_0}{p_0^T Ap_0} p_0^T$$

Multiplicando por Ap_0 *obtenemos* $p_1^T Ap_0 = -r_1^T Ap_0 + \dfrac{r_1^T Ap_0}{p_0^T Ap_0} p_0^T Ap_0 = 0$.

Ahora suponemos que se cumple para agún k *y lo demostraremos para* $k+1$, *así nuestra hipótesis de inducción es que* $p_k^T Ap_i = 0$ *para* $i = 0, 1, \ldots, k-1$ *y demostraremos que* $p_{k+1}^T Ap_i = 0$ *para* $i = 0, 1, \ldots, k$

$$p_{k+1}^T Ap_i = -r_{k+1}^T Ap_i + \beta_{k+1} p_k^T Ap_i \tag{12}$$

Notemos que si $i = k$ *tenemos que*

$$p_{k+1}^T Ap_k = -r_{k+1}^T Ap_k + \frac{r_{k+1}^T Ap_k}{p_k^T Ap_k} p_k^T Ap_k = 0$$

Ahora veamos que ocurre cuando $i \leq k-1$. *Por la de inducción podemos observar que la expresión* (12) *se reduce*

$$p_{k+1}^T A p_i = -r_{k+1}^T A p_i$$

y como demostramos antes $p_i \in gen(r_0, Ar_0, \ldots, A^i r_0)$ *por lo que*

$$\begin{aligned} Ap_i \in gen(Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^{i+1} r_0) \subset \; & gen(r_0, Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^{i+1} r_0) = \\ & gen(p_0, p_1, \ldots, p_{i+1}) \end{aligned}$$

Usando está relación y el Teorema 2 tenemos que $r_{k+1}^T A p_i = 0$. *Por la tanto* $p_{k+1}^T A p_i = 0$ *para toda* $i = 0, 1, \ldots, k$ *y la demostración para la propiedad* $III)$ *queda concluida.*

Por último se demuestra la propiedad $IV)$ *por argumentos no inductivos. Dado que el conjunto de direcciones es conjugado, por el Teorema 2 tenemos que* $r_k^T p_i = 0 \;\; \forall \;\; i = 0, \ldots, k-1$. *Recordemos que:*

$$p_i = -r_i + \beta_i p_{i-1},$$

multiplicando esta expresión por r_k^T, *tenemos entonces*

$$r_k^T p_i = -r_k^T r_i + \beta_i r_k^T p_{i-1}$$

y por el Teorema 2,

$$\Rightarrow r_k^T r_i = 0 \;\; \forall \;\; i = 0, \ldots, k-1.$$

Por lo tanto queda demostrada dicha propiedad.