

## MÉTODO DEL GRADIENTE CONJUGADO

Una gran cantidad de métodos iterativos para resolver sistemas de ecuaciones lineales pueden usarse como métodos de minimización. Si  $A$  es simétrica y definida positiva, entonces la función cuadrática.

$$\begin{aligned} q : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto q(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle + c \end{aligned} \quad (1)$$

tiene un único mínimo que es la solución del sistema  $Ax = b$ . Varios métodos de minimización pueden ser escritos como:

$$\begin{cases} \text{Dado } x^{(0)} : \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (2)$$

cuando los vectores de dirección  $p^{(k)}$  son conocidos. Un camino para elegir el escalar  $\alpha_k$  es minimizando  $q$  a lo largo de la recta  $x^{(k)} + \alpha p^{(k)}$ ,  $\alpha \in \mathbb{R}$  tal que

$$q(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} q(x^{(k)} + \alpha p^{(k)}). \quad (3)$$

Para  $x^{(k)}$  y  $p^{(k)}$  fijos,  $q(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})$  es una función cuadrática en  $\alpha$  y puede ser minimizada explícitamente haciendo

$$\alpha_k = \frac{\langle p^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle p^{(k)}, Ap^{(k)} \rangle} \quad (4)$$

donde  $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ .

Existe una gran variedad de maneras de escoger  $p^{(k)}$ . Una elección simple es  $p^{(k)} = r^{(k)}$  que lleva al método del [máximo descenso o de Richarson](#):

$$\begin{cases} \text{Dado } x^{(0)} : \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k (b - Ax^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots \end{cases}$$

sin embargo, su convergencia es en general lenta.

## MÉTODO DE DIRECCIONES CONJUGADAS

Corresponde al caso cuando los vectores de direcciones  $p^{(k)}$  satisfacen

$$\langle Ap^{(j)}, p^{(i)} \rangle = 0, \quad i \neq j, \quad (5)$$

es decir, son ortogonales con respecto al producto interior,

$$\langle x, y \rangle_A := \langle Ax, y \rangle = 0.$$

Por esta razón, los vectores se dirán  $A$ -ortogonales o conjugados con respecto de  $A$ .

### Teorema

Sea  $A$  una matriz real, simétrica y definida positiva. Si  $p^{(0)}, \dots, p^{(n-1)}$  son vectores no nulos que satisfacen (5), entonces para cualquier  $x^{(0)}$  la iteración (2), con  $\alpha_k$  dado por (4), es convergente a la solución de  $Ax = b$ , en a lo más  $n$  pasos.

## Observación

1. Cuando se trabaja en presencia de errores de redondeo, en las condiciones del teorema anterior, pueden ser necesarios más de  $n$  pasos (proceso iterativo).
2. Una elección clásica de conjuntos de vectores  $A$ -conjugados  $p^{(0)}, \dots, p^{(n-1)}$  consiste en el conjunto de vectores propios de  $A$ .  
En efecto, si  $x^{(1)}, \dots, x^{(n)}$  son vectores propios ortogonales con sus correspondientes valores propios  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ , entonces

$$\langle x^{(i)}, x^{(j)} \rangle_A = \alpha_i \langle x^{(i)}, x^{(j)} \rangle = 0, \quad i \neq j.$$

## ALGORITMO MGC

Dados:

- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  matriz simétrica y definida positiva,
- $b \in \mathbb{R}^n$ ,
- tol: tolerancia para el residuo relativo y

```

x0: dato inicial
r0 = b - Ax0
p0 = r0
k = 0, 1, 2, ..., mientras ||rk||/||b|| > tol
    αk = < rk, pk > / < pk, Apk >
    xk+1 = xk + αkpk
    rk+1 = rk - αkApk
    βk+1 = < rk+1, rk+1 > / < rk, rk >
    pk+1 = rk+1 + βk+1pk
fin

```

**Teorema.** La aproximación  $x^{(j)}$  obtenida por el algoritmo M.G.C. verifica,

$$\|x - x^{(j)}\|_A \leq 2\gamma^j \|x - x^{(0)}\|_A$$

donde

$$\gamma = \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \quad \text{para} \quad \kappa = \text{Cond}_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2.$$

y  $x$  es la solución exacta de  $Ax = b$ .

Note que  $\gamma \rightarrow 0$  cuando  $\kappa \rightarrow 1$  y que  $\gamma \rightarrow 1$  cuando  $\kappa \rightarrow \infty$ .

Así mientras mayor sea el número de condición de  $A$ , peor será la (tasa de) convergencia.

## PRECONDICIONADORES

Muchas veces la matriz  $A$  del sistema  $Ax = b$  es mal condicionada. Una estrategia usual es encontrar una matriz  $P$  tal que  $P^{-1}A$  sea bien condicionada y luego resolver el sistema equivalente

$$P^{-1}Ax = P^{-1}b. \quad (6)$$

A la matriz  $P$  llamaremos un preconditionador a izquierda de  $A$ . Un requerimiento es que  $P$  sea fácil de invertir.

### Observación.

1. ¿Sera  $P^{-1}A$  simétrica y definida positiva?.  
Lamentablemente, no siempre. Una alternativa es considerar un preconditionador que verifique que  $P = C^2$ , para una matriz  $C$  simétrica y no singular. En este caso se tiene:

$$\begin{aligned} P^{-1}Ax = P^{-1}b &\Rightarrow CC^{-2}AC^{-1}Cx = CC^{-2}b \\ &\Rightarrow C^{-1}AC^{-1}Cx = C^{-1}b \\ &\Rightarrow A_*x_* = b_* \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} A_* &= C^{-1}AC^{-1} \\ b_* &= C^{-1}b \\ Cx &= x_*. \end{aligned}$$

y la matriz  $A_*$  resulta simétrica y definida positiva.

2. Otro preconditionador es:

$$P = HH^t$$

donde  $H$  es una matriz no singular, por ejemplo la matriz triangular inferior obtenida de la descomposición de Cholesky. Entonces,

$$A^*x^* = b^*$$

donde

$$A^* := H^{-1}AH^{-t}, \quad b^* := H^{-1}b, \quad x^* := H^tx$$

3. Otro preconditionador es tomar la diagonal de  $A$ , es decir,

$$P := D = \text{diag}(a_1, \dots, a_n), \quad (\text{Jacobi}).$$

Este preconditionador es generalmente efectivo cuando  $A$  es simétrica y definida positiva y con elementos diagonales no todos iguales.

4. Otra estrategia es la siguiente descomposición incompleta de Cholesky de  $A$ , y eligiendo (si  $H$  es no singular )

$$P := HH^t$$

Una alternativa simple para calcular  $H$  es

```

para  $k = 1, \dots, n$  se tiene
|
|    $h_{kk} = \left( a_{kk} - \sum_{p=1}^{k-1} h_{kp}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$ 
|   para  $i = k + 1, \dots, n, k \neq n$  tenemos
|   |
|   |   si  $a_{ik} = 0, h_{ik} = 0$ 
|   |   en otro caso  $h_{ik} = \frac{1}{h_{kk}} \left( a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} h_{ip} h_{kp} \right)$ 
|   fin  $i$ 
fin  $k$ 

```

## ALGORITMO MGCP

```

 $\mathbf{x}^0$ : dato inicial
 $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^0$ 
 $\mathbf{P}$ : preconditionador para el MGC
resolver  $\mathbf{P}\mathbf{z}^0 = \mathbf{r}^0$ 
 $\mathbf{p}^0 = \mathbf{z}^0$ 
 $k = 0, 1, 2, \dots$ , mientras  $\|\mathbf{r}^k\|/\|\mathbf{b}\| > \text{tol}$ 
|
|    $\alpha_k = \langle \mathbf{z}^k, \mathbf{p}^k \rangle / \langle \mathbf{p}^k, \mathbf{A}\mathbf{p}^k \rangle$ 
|    $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{p}^k$ 
|    $\mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}^k$ 
|   resolver  $\mathbf{P}\mathbf{z}^{k+1} = \mathbf{r}^{k+1}$ 
|    $\beta^{k+1} = \langle \mathbf{z}^{k+1}, \mathbf{r}^{k+1} \rangle / \langle \mathbf{z}^k, \mathbf{r}^k \rangle$ 
|    $\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{z}^{k+1} + \beta^{k+1} \mathbf{p}^k$ 
fin

```

## Comparación de costos computacionales

- $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{b}$ , como se vera en el laboratorio correspondiente (proviene de un programa MATLAB para la resolución de un problema de EDPs que modela la deformación de una membrana bajo la acción de una fuerza),
- $\text{tol} = 10^{-6}$ ,
- $\mathbf{P}$  (para el caso MGCP) obtenido mediante el comando MATLAB `cholinc`, con el parámetro `droptol` =  $10^{-2}$ .

$n$	145	632	2629	10821	44071
MGC	32	66	125	261	500
MGCP	5	10	16	35	65

Tabla I: Número de iteraciones para cada método

