Laboratorio de Análisis Aplicado
Gradiente Conjugado

1. Introducción

Sean $A \in \mathbb{R}^{nx}$, $\quad b \in \mathbb{R}^n$ tales que A es simétrica y positiva definida. Encontrar la solución del sistema lineal

$$Ax = b, \tag{1}$$

es equivalente a determinar el único mínimo de

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

Notación: $\nabla f(x) = Ax - b$, se denominará como la función residual y se denotará como $r(x)$.

Supongamos que $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ satisface que $r(\hat{x}) \neq 0$. Sea $p \in \mathbb{R}^n - \{0\}$. Resolvemos el problema

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(\hat{x} + \alpha p) \\ & \alpha \in \mathbb{R} \end{array}$$

Notemos que

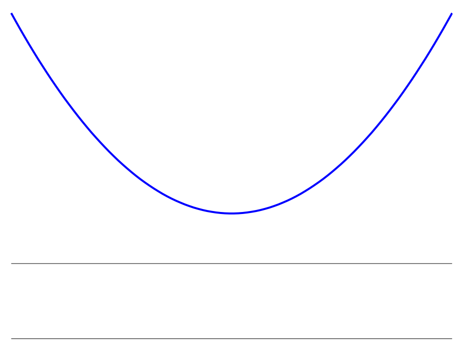
$$f(\hat{x} + \alpha p) = \frac{1}{2}\alpha^2(p^T Ap) + r(\hat{x})^T p + f(\hat{x})(\equiv g(\alpha)).$$

Se tiene que

$$g'(\alpha) = \alpha(p^T Ap) + r(\hat{x})^T p,$$

de donde

$$g'(\alpha) = 0 \text{ si y sólo si } \alpha^* = -\frac{r(\hat{x})^T p}{p^T Ap}.$$



2. Direcciones conjugadas

Definición. Sea $A \in \mathbb{R}^{nxn}$ simétrica y positiva definida. Decimos que los vectores $u,\ v \in \mathbb{R}^n - \{0\}$ son A-conjugados si y sólo si $u^T A v = 0$.

Sea $\mathcal{P} = \{p_1,\ p_2,\ \ldots,\ p_n\}$ un conjunto de vectores A-conjugados dos a dos, es decir $\mathcal{P}$ es una base de $\mathbb{R}^n$.

El método de direcciones conjugadas para (2) con el conjunto $\mathcal{P}$ minimiza la función $f(x)$ a lo largo de las direcciones p_k en forma consecutiva.

Método de direcciones conjugadas

1. Sea $x_0 \in \mathbb{R}^n$ tal que $r(x_0) \neq 0$.
2. Para $k = 1,\ \ldots,\ n$ hacer

   a)
$$\alpha_k = -\frac{r(x_{k-1})^T p_k}{p_k^T A p_k}$$

   b)
$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k.$$

Al terminar todas las iteraciones, se tiene que $Ax_n = b$.

El problema con este método es que no se tiene un esquema económico para calcular las n direcciones conjugadas en $\mathcal{P}$.

3. Gradiente conjugado

La idea es ir construyendo en cada paso iterativo la nueva dirección conjugada.

La primer dirección conjugada será $p_1 = -r(x_0)$. De tal forma que el punto x_1 puede ser calculado.

Supongamos que se han realizado k iteraciones del método de direcciones conjugadas con las direcciones $\mathcal{P}_k = \{p_1, \ldots, p_k\}$ y se obtienen los vectores $x_1, \ldots, x_k$ y los residuales $r_1, \ldots, r_k$.

La nueva dirección p_{k+1} se determina con un escalar β_k tal que

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

sea A-conjugado con p_k. Es decir

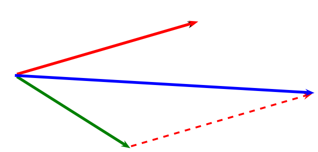
$$p_{k+1}^T A p_k = 0.$$

Desarrollando la ecuación se tiene que

$$-r_k^T A p_k + \beta_k p_k^T A p_k = 0.$$

Concluimos que

$$\beta_k = \frac{r_k^T A p_k}{p_k^T A p_k}.$$



4. Método de Gradiente Conjugado(Versión Preliminar)

1. Escoga $x_1 \in \mathbb{R}^n$ y defina $r_1 = Ax_1 - b$ y $p_1 = -r_1$. Hacer $k \leftarrow 1$
2. Mientras $\|r_k\| > 0$

   a)
   $$\alpha_k = -\frac{(r_k)^T p_k}{(p_k)^T A p_k}, \quad \textbf{(minimización a lo largo de } p_k.\textbf{)}$$

   b)
   $$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad \textbf{(nuevo punto)}$$

   c)
   $$r_{k+1} = Ax_{k+1} - b \quad \textbf{(nuevo residual)}$$

   d)
   $$\beta_k = \frac{(r_{k+1})^T A p_k}{(p_k)^T A p_k},$$

   e)
   $$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_k p_k \quad \textbf{(nueva dirección)}$$

   f)
   $$k \leftarrow k + 1.$$

Programar en Matlab el método de gradiente conjugado de la forma:

function $[x, k] = migc(A, x1)$

donde A es la matriz, $x1$ es el punto inicial. En la salida, x es el vector solución y $k(\leq n)$ es el número de iteraciones que toma el método.

Con la función.**matcalor.m**, mueste los siguientes valores, script, **calor.m**:

% Distribución de calor en una placa metálica.
% Demostración de gradiente conjugado.

% Análisis Aplicado
% ITAM
% 5 de octubre de 2020
%

$m = 30;$
$[A,\ b] = matcalor(m)$
$[x,\ k] = migc(A, b);$
$k = 132$
% Graficación
%

$u = [1 : m]';\ v = [1 : m]';\ Z = zeros(m);$
%
for $\quad k = 1 : m$
$\qquad Z(k, 1 : m) = x((k-1) * m + 1 : k * m)';$
end
%
% Graficación de la placa de calor
%
$[U, V] = meshgrid(u, v);$
%
$surf(U,\ V\ , Z)$
title('Distribución de Calor en una Placa Metálica','Fontsize',16)
xlabel('Eje X','Fontsize',16)
ylabel('Eje Y', 'Fontsize',16)
zlabel('Calor','Fontsize',16)

Se obtiene la gráfica