

① TEORÍA

1. Gradiente conjugado.

- i. • Demuestre que si los vectores no nulos p_1, p_2, \dots, p_l satisfacen que :

$$p_i^T A p_j = 0, \forall i \neq j,$$

y A es simétrica y positiva definida, entonces los vectores son linealmente independientes.

Solución:

L.d. $\{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ son linealmente independientes

L.d. $a_1 p_1 + a_2 p_2 + \dots + a_n p_n = 0$ con $a_i = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n$.

Supongamos que no y procedamos por contradicción.

Supongamos pues que el vector p_k (SPS) puede escribirse como combinación lineal de los otros $n-1$ p_i , esto es:

$$(1) \quad p_k = \beta_1 p_1 + \beta_2 p_2 + \dots + \beta_{k-1} p_{k-1} + \beta_{k+1} p_{k+1} + \dots + \beta_n p_n \text{ con al menos un } \beta_j \neq 0.$$

Ahora, multiplicamos (1) ambos lados por la izquierda por $p_k^T A$ y obtenemos lo siguiente:

$$p_k^T A p_k = p_k^T A (\beta_1 p_1 + \beta_2 p_2 + \dots + \beta_{k-1} p_{k-1} + \beta_{k+1} p_{k+1} + \dots + \beta_n p_n)$$

$$\Rightarrow p_k^T A p_k = p_k^T A \beta_1 p_1 + p_k^T A \beta_2 p_2 + \dots + p_k^T A \beta_{k-1} p_{k-1} + p_k^T A \beta_{k+1} p_{k+1} + \dots + p_k^T A \beta_n p_n$$

como β_j es un escalar $\neq j$, podemos "sacarlo" de cada multiplicación:

$$\Rightarrow p_k^T A p_k = \beta_1 (p_k^T A p_1) + \beta_2 (p_k^T A p_2) + \dots + \beta_{k-1} (p_k^T A p_{k-1}) + \beta_{k+1} (p_k^T A p_{k+1}) + \beta_n (p_k^T A p_n)$$

Por hipótesis tenemos que $p_i^T A p_j = 0 \quad \forall i \neq j$.

$$\Rightarrow p_k^T A p_k = \beta_1 (0) + \beta_2 (0) + \dots + \beta_{k-1} (0) + \beta_{k+1} (0) + \dots + \beta_n (0)$$

$\therefore p_k^T A p_k = 0$! pues p_k es no nulo y por hipótesis tenemos que $p_k^T A p_k > 0$ pues A positiva definida

$\therefore p_k$ no puede expresarse como combinación lineal de $\{p_i\}$

$\therefore \{p_1, \dots, p_n\}$ es linealmente independiente !

2. • Dado este resultado, ¿Por qué el gradiente conjugado converge en a lo más n iteraciones?

Solución:

→ Teorema 5.1 (Noedal)

En clase probamos que $\forall x_0 \in \mathbb{R}^n$ la secuencia $\{x_k\}$ generada por el algoritmo de direcciones conjugadas converge a la solución x^* del sistema lineal $Ax = b$ en a lo más n iteraciones.

A grandes rasgos, la razón de eso es que, dado que las direcciones conjugadas $\{p_i\}$ son linealmente independientes, entonces podemos expresar $x^* - x_0$ como combinación lineal de p_i 's:

$$x^* - x_0 = \sigma_0 p_0 + \dots + \sigma_{n-1} p_{n-1} \quad \text{para ciertos } \sigma_k$$

Haciendo álgebra lleganmos a $\sigma_k = \frac{p_k^T A(x^* - x_0)}{p_k^T A p_k}$

como x_k es generada por el algoritmo de direcciones conjugadas por hipótesis, entonces:

$$x_k = x_0 + d_0 p_0 + d_1 p_1 + \dots + d_{k-1} p_{k-1}$$

Nuevamente con un poco de álgebra lleganmos a:

$$p_k^T A (x_k - x_0) = 0$$

$$\Rightarrow p_k^T A (x^* - x_0) = p_k^T A (x^* - x_k) = p_k^T (b - A x_k) = -p_k^T r_k$$

$$\text{comb. } \alpha_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k} \quad \text{y} \quad \sigma_k = \frac{p_k^T A (x^* - x_0)}{p_k^T A p_k} = -\frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$$

Entonces $\alpha_k = \sigma_k$ y nos queda que efectivamente llegamos a x^* en a lo más n iteraciones.

Ahora, el **método de gradiente conjugado** es un método de direcciones conjugadas con la particularidad de que al ir generando los vectores conjugados, p_k se genera únicamente con p_{k-1} .

En particular, cada p_k se elige como la combinación lineal de $-r_k$ (residual) que es la máxima dirección de descenso y de p_{k-1} .

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

De esta manera, $\{p_1, p_2, \dots, p_{n-1}\}$ son direcciones conjugadas y (por la pregunta anterior) linealmente independientes. En consecuencia, por el teorema expuesto y explicado anteriormente, el **método de gradiente conjugado** converge a la solución x^* en a lo más n pasos. ↴

2. BFGS

- Verifique que B_{k+1} y H_{k+1} son inversas una de la otra.

Solución:

$$\text{P.d. } H_{k+1} B_{k+1} = B_{k+1} H_{k+1} = I$$

① ②

Tanto ① como ② se verifican de forma análoga, por lo que solo desarrollaremos ①

Por definición tenemos:

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad B_{k+1} S_k &= y_k \\ \textcircled{2} \quad B_{k+1} &= (I - \rho_k y_k S_k^T) B_k (I - \rho_k S_k y_k^T) + \rho_k y_k y_k^T \\ \textcircled{3} \quad \rho_k &= \frac{1}{y_k^T S_k} \\ \textcircled{4} \quad H_{k+1} y_k &= S_k \\ \textcircled{5} \quad H_{k+1} &= H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{S_k S_k^T}{y_k^T S_k} \end{aligned}$$

Calculamos directamente:

$$\begin{aligned} H_{k+1} B_{k+1} &= H_{k+1} \left((I - \rho_k y_k S_k^T) B_k (I - \rho_k S_k y_k^T) + \rho_k y_k y_k^T \right) \\ &= \underset{\text{A}}{H_{k+1} (B_k - \rho_k y_k S_k^T B_k)} (I - \rho_k S_k y_k^T) + \underset{\text{B}}{H_{k+1} \rho_k y_k y_k^T} \end{aligned}$$

Desarrollamos primero A:

$$\begin{aligned} H_{k+1} (B_k - \rho_k y_k S_k^T B_k) (I - \rho_k S_k y_k^T) &= \\ &= \left[H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{S_k S_k^T}{y_k^T S_k} \right] (B_k - \rho_k y_k S_k^T B_k) (I - \rho_k S_k y_k^T) \\ &= \left[\cancel{H_k} - \cancel{\frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k}} + \frac{S_k S_k^T B_k}{y_k^T S_k} - \cancel{H_k \rho_k y_k S_k^T B_k} \right. \\ &\quad \left. + \frac{H_k y_k y_k^T H_k \rho_k y_k S_k^T B_k}{y_k^T H_k y_k} - \cancel{\frac{S_k S_k^T \rho_k y_k S_k^T B_k}{y_k^T S_k}} \right] (I - \rho_k S_k y_k^T) \\ &= \left[I - \frac{H_k y_k y_k^T}{y_k^T H_k y_k} + \frac{S_k S_k^T B_k}{y_k^T S_k} - \cancel{\frac{H_k y_k S_k^T B_k}{y_k^T S_k}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{H_k y_k (y_k^T H_k \cancel{y_k}) S_k^T B_k}{(y_k^T S_k)(y_k^T H_k \cancel{y_k})} - \cancel{\frac{S_k S_k^T (y_k^T S_k)^T B_k}{(y_k^T S_k)(y_k^T S_k)}} \right] (I - \rho_k S_k y_k^T) \\ &\quad \rho_k = \frac{1}{y_k^T S_k} \end{aligned}$$

• ρ_k es escalar

(2)

$$= \left[I - \frac{H_k Y_k Y_k^T}{Y_k^T H_k Y_k} \right] \left[I - \frac{S_k Y_k^T}{Y_k^T S_k} \right] = I - \frac{H_k Y_k Y_k^T}{Y_k^T H_k Y_k} - \frac{S_k Y_k^T}{Y_k^T S_k} + \frac{H_k Y_k (Y_k^T S_k) Y_k^T}{Y_k^T H_k Y_k (Y_k^T S_k)}$$

$$= I - \frac{S_k Y_k^T}{Y_k^T S_k} \quad (\text{A})$$

Ahora desarrollamos B:

$$H_{k+1} F_k Y_k Y_k^T = F_k H_{k+1} Y_k Y_k^T = \frac{S_k Y_k^T}{Y_k^T S_k} \quad (\text{B})$$

(1) $H_{k+1} Y_k = S_k$

Nos queda entonces:

$$H_{k+1} B_{k+1} = I - \frac{S_k Y_k^T}{Y_k^T S_k} + \frac{S_k Y_k^T}{Y_k^T S_k} = I$$

$$\therefore H_{k+1} B_{k+1} = I$$

\therefore son inversas la una de la otra \Leftrightarrow