Cálculo Numérico (521230) - Laboratorio 4

SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES: METODOS ITERATIVOS

Ejercicio 1. (*Trabajo con matrices sparse*) Escriba una función MATLAB que, dados valores $n \in \mathbb{N}$, $a, b, c, d \in \mathbb{R}$, retorne la matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ con la siguiente estructura

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b & 0 & 0 & \cdots & 0 & d & 0 & 0 \\ c & a & b & 0 & \cdots & 0 & 0 & d & 0 \\ 0 & c & a & b & \cdots & 0 & 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & c & a & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ d & 0 & 0 & 0 & \cdots & c & a & b & 0 \\ 0 & d & 0 & 0 & \cdots & 0 & c & a & b \\ 0 & 0 & d & 0 & \cdots & 0 & 0 & c & a \end{pmatrix}.$$

Nombre a su función matriz_preg1_lab4.m. Note que muchos de los elementos de la matriz anterior son iguales a cero, ella es una matriz dispersa.

- **1.1** Llame a la función por usted escrita con n = 100, a = 4, b = c = 2, d = 7. Guarde el resultado en la variable A.
- 1.2 Los comandos en MATLAB spy y nnz sirven verificar si una matriz es dispersa. Úselos con la matriz creada en el inciso anterior.
- 1.3 La matriz A puede almacenarse en MATLAB en un formato especial denominado *sparse*. Esto puede lograrse de 2 formas:
 - transformando, mediante B = sparse(A), la matriz creada en 1.1 a formato sparse,
 - usando comandos que permitan crear directamente una matriz *sparse*. Vea en matriz_preg1_lab4_sparse.m una forma de crear *A* directamente como matriz *sparse*. Abra matriz_preg1_lab4_sparse.m y, con ayuda del comando help de MATLAB, trate de entender la forma en que se usan en ella los comandos sparse y spdiags.

Escriba en la ventana de comandos MATLAB

```
>> B = sparse(A);
>> C = matriz_preg1_lab4_sparse(100,4,2,2,7);
>> whos
```

1.4 Abra el rutero preg1_lab4.m.

El objetivo de este rutero es comparar los tiempos de ejecución al multiplicar una matriz dispersa por sí misma, almacenada en forma full (guardando todas las entradas de la matriz, también aquellas que son iguales a cero) y en forma sparse. Llame al rutero y observe el gráfico que se genera. ¿Con cuál de las dos formas de almacenamiento requiere el producto de una matriz dispersa por sí misma menos tiempo computacional?

Ejercicio 2. (Jacobi, Gauss Seidel, Gradiente Conjugado) Abra la función jacobisol.m. Almacene esta función en gaussseidelsol.m y modifíquela de forma que permita obtener una aproximación a la solución exacta de un sistema de ecuaciones lineales mediante el método de Gauss-Seidel.

Escriba un rutero MATLAB en el que haga lo siguiente:

- Llame a la función matriz_preg1_lab4_sparse con n = 50, a = 4, b = c = 1, d = -1.
- Calcule, para la matriz creada antes, las matrices D, E y F de la descomposición introducida en clases para derivar los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel. Compruebe que las matrices D, E y F también se almacenan como matrices sparse.
- Calcule las correspondientes matrices de iteración de los métodos de Jacobi (M_J) y Gauss-Seidel (M_{GS}) . Dado que la matriz creada antes es estrictamente diagonal dominante, el radio espectral de las matrices M_J y M_{GS} debe ser estrictamente menor que uno. Compruébelo con ayuda de los comandos eigs, abs y max.
- Llame a las funciones jacobisol y gaussseidelsol para resolver el sistema Ax = b con A construida al inicio de este ejercicio y b igual al vector cuyas 50 componentes son iguales a uno. Tome $x^{[0]} = \Theta$, maxiter=100 y tol según se especifica en el siguiente cuadro que usted debe completar y en el que x_J denota la aproximación obtenida mediante el método de Jacobi y x_{GS} , la obtenida con Gauss-Seidel.

	iteraciones Jacobi	iteraciones Gauss-Seidel	$\ oldsymbol{x}_J - oldsymbol{x}_{GS}\ _{\infty}$
tol=1e-2			
tol=1e-4			
tol=1e-6			

Note que en este caso particular el método de Gauss-Seidel necesita menos iteraciones que el método de Jacobi para alcanzar la precisión requerida. Recuerde que éste no siempre es el caso.

Escriba un segundo rutero Matlab en el que haga lo siguiente:

- Llame a la función matriz_preg1_lab4_sparse con n = 50, a = 4, b = c = 1, d = -1.
- Compruebe que esta matriz no es mal condicionada.
- Utilice el comando pcg para resolver el sistema Ax = b (siendo A la matriz creada antes y b el vector con 50 componentes iguales a 1) con ayuda del método del gradiente conjugado (haciendo help pcg podrá ver cómo debe llamarse esta función). Complete el siguiente cuadro:

	iteraciones GC	$egin{array}{c} \ oldsymbol{b} - oldsymbol{A} oldsymbol{x}_{gc}\ \ \ oldsymbol{b}\ \end{array}$
tol=1e-2		
tol=1e-4		
tol=1e-6		

Genere mediante A = gallery('poisson',100) una matriz de orden 10000 cuyo número de condición es mucho mayor que el de la matriz en los incisos anteriores (compruébelo haciendo condest(A)). Resuelva el sistema Ax = b con b = ones(10000,1) y el método del gradiente conjugado con tol = 1e-3. ¿Logra el método calcular una aproximación aceptable a la solución exacta de Ax = b?

Llame al método del gradiente conjugado precondicionado con distintos precondicionadores y tol=1e-3. El precondicionador puede generarse mediante un llamado a ichol o a cholinc (en última versión de MATLAB se recomienda el uso de ichol) como sigue:

```
>> tolp = 0.2;
>> L = ichol(A,struct('type','ict','droptol',tolp));
>> P = L*L';
```

o como sigue:

```
>> tolp = 0.2;
>> R = cholinc(A,tolp);
>> P = R'*R;
```

Complete el siguiente cuadro, en él P es el precondicionador calculado en cada caso.

	iteraciones GCP	$\ oldsymbol{P}-oldsymbol{A}\ _{\infty}$
tolp=0.2		
tolp=0.01		
tolp=0.001		

Ejercicio 3. (Google Matrix) Actualmente google se ha establecido como la página de búsqueda en internet más utilizada. Esto ha sido en gran parte gracias al novedoso algoritmo que esta compañía utiliza para, una vez encontradas las páginas que cumplen con el criterio de búsqueda de un usuario, escoger el orden en que éstas serán presentadas. Para escoger este orden google asocia a cada página un número, llamado pagerank, que calcula teniendo en cuenta el número de enlaces desde y hacia cada una de las páginas web en el mundo. El orden en que se presentan las páginas depende de su pagerank (las de mayor pagerank se presentan primero). Para calcular el pagerank de cada página web, google crea una matriz G que tiene una fila y una columna por cada página web, las entradas de esta matriz son

$$\boldsymbol{G}(i,j) = \begin{cases} 1, & \text{si hay un enlace de página } j \text{ a página } i, \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases}.$$

El pagerank de una página depende no sólo del número de páginas que contengan enlaces a ella, sino también del pagerank de esas páginas. Así una página que sea referenciada en muchas páginas de poca importancia podrá tener menos importancia que una que sea referenciada en pocas páginas de mucha importancia. Si x es un vector con el pagerank de cada una de las páginas web del mundo, google lo encuentra resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones lineales

$$Ax = e, \quad A = I - pGD \tag{1}$$

dónde \boldsymbol{I} es la matriz de identidad, p es la probabilidad de que una persona, en su búsqueda de alguna información en internet, siga uno de los enlaces en la página donde se encuentra y se toma igual a 0,85, \boldsymbol{G} es la matriz mencionada antes, \boldsymbol{D} es una matriz diagonal tal que $\boldsymbol{D}(i,i)$ es el número de enlaces en la página i y e es el vector que contiene todas sus entradas iguales a 1. Encontremos experimentalmente, de entre todos los algoritmos que hemos estudiado para la solución de sistemas de ecuaciones lineales, cuál es el más conveniente para resolver este sistema de ecuaciones.

3.1 Otros archivos en lab4_2015_1.zip son elsurdata.mat, creatematrix_pagerank.m y mostrarrangos.m. Cargue las variables almacenadas en elsurdata.mat en MATLAB. Para ello usted debe escribir en la ventana de comandos de MATLAB

>> load elsurdata

Escriba

>> whos

y observe que la matriz Gelsur y el vector Uelsur se han cargado en memoria (éstas eran las variables guardadas en elsurdata.mat). La matriz Gelsur es como la matriz G mencionada antes, pero se creó suponiendo que la web está formada sólo por 500 páginas (www.elsur.cl, los enlaces contenidos en ella, los enlaces en esos enlaces y así sucesivamente, 3 direcciones fueron borradas de la lista por ser no válidas). La variable Uelsur contiene los nombres de las 497 páginas consideradas en la red que parte en www.elsur.cl.

Escribiendo $A = \text{creatematrix_pagerank(Gelsur)}$ se construye la matriz A en (1).

- **3.2** Con spy(A) observe la estructura de A. ¿Es una matriz dispersa? ¿Es simétrica? Determine, mediante un llamado a lu, las matrices L y U de la descomposición LU de A. ¿Cuántos elementos distintos de cero tiene A? ¿Cuántos tienen L y U?
- 3.3 Busque una aproximación a la solución exacta a este sistema de ecuaciones con los métodos iterativos que usted conoce. ¿Cuáles métodos iterativos le permitieron obtener una aproximación a la solución exacta de (1)? ¿Cuál tolerancia usó? ¿En cuántas iteraciones alcanzó cada uno de ellos la precisión requerida? ¿Cuál es la diferencia entre las soluciones obtenidas? Si alguno de los métodos no le permite obtener una aproximación con la precisión requerida, ¿a qué se debe esto?
- 3.4 Una vez encontrada una aproximación a la solución exacta de (1) usted podrá, llamando a la función mostrarrangos, ver un código de barras con los rangos de las 10 páginas que tienen mayor pagerank, así como una lista con sus direcciones, número de enlaces en y hacia ellas y el pagerank de cada una.

SOBRE METODOS ITERATIVOS

Métodos Clásicos

Esquema General

Descomponiendo la matriz A = N - P, con N invertible obtenemos el esquema iterativo general para resolver el sistema Ax = b:

Dado
$$\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$$
;
Para $k = 0, 1, 2, \ldots$, resolver:
 $\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{b}$
hasta satisfacer un criterio de detención.

Matriz de iteración y convergencia del esquema

Se define la matriz de iteración del esquema anterior como $M = N^{-1}P$. Luego, el esquema general construye una sucesión convergente a la solución del sistema Ax = b si y sólo si $\rho(M) < 1$.

Criterio de detención

Un criterio usual de detención es iterar hasta que se satisfaga la condición:

$$\frac{m_k}{1 - m_k} || \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)} || < \mathtt{tol},$$

donde

$$m_k = \frac{||{m x}^{(k+1)} - {m x}^{(k)}||}{||{m x}^{(k)} - {m x}^{(k-1)}||} pprox ||{m M}||,$$

y tol es un valor de tolerancia para el error, prefijado por el usuario.

Descomposición de una matriz

Descomponemos la matriz $\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{E} - \mathbf{F}$, para $\mathbf{A} = (a_{ij})$, con:

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{E} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{y} \quad \boldsymbol{F} = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Método de Jacobi

Eligiendo N = D y P = E + F tenemos el siguiente esquema iterativo

Dado
$$\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$$
;
Para $k = 0, 1, 2, \ldots$, resolver:
 $\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\boldsymbol{E} + \boldsymbol{F})\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{b}$
hasta satisfacer un criterio de detención.

donde el sistema a resolver es diagonal.

Método de Gauss-Seidel

Eligiendo N = D - E y P = F tenemos el siguiente esquema iterativo

$$egin{aligned} \operatorname{Dado} \, oldsymbol{x}^{(0)} &\in \mathbb{R}^n; \ \operatorname{Para} \, k = 0, 1, 2, \ldots, \, \operatorname{resolver}: \ oldsymbol{(D-E)} oldsymbol{x}^{(k+1)} &= oldsymbol{F} oldsymbol{x}^{(k)} + oldsymbol{b} \ \operatorname{hasta} \, \operatorname{satisfacer} \, \operatorname{un} \, \operatorname{criterio} \, \operatorname{de} \, \operatorname{detención}. \end{aligned}$$

donde el sistema a resolver es triangular inferior.

Métodos de Descenso

Se utilizan para resolver el sistema Ax = b, con A una matriz simétrica y definida positiva. Bajo esta condición, los métodos que se muestran a continuación son convergentes.

Método del Gradiente

Dado
$$\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^{n}$$
;
 $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)}$;
Para $k = 0, 1, 2, \dots$:

$$\alpha_{k} = \frac{\langle \boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)} \rangle}{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)} \rangle};$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_{k}\boldsymbol{r}^{(k)};$$

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_{k}\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)};$$
hasta satisfacer un criterio de detención.

Este método converge muy lentamente cuando $\operatorname{cond}_2(A) >> 1$.

Método del Gradiente Conjugado

Dado
$$\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^{n};$$
 $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)};$
 $\boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)};$
Para $k = 0, 1, 2, \dots;$

$$\alpha_{k} = \frac{\langle \boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)} \rangle}{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)} \rangle};$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_{k}\boldsymbol{p}^{(k)};$$

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_{k}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)};$$

$$\beta_{k+1} = \frac{\langle \boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)} \rangle}{\langle \boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)} \rangle};$$

$$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} + \beta_{k+1}\boldsymbol{p}^{(k)};$$
hasta satisfacer un criterio de detención.

Este método converge en a lo más n pasos, pero sigue convergiendo lento cuando $\operatorname{cond}_2(\boldsymbol{A}) >> 1$.

Método del Gradiente Conjugado Precondicionado

Dado
$$\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^{n};$$
 $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)};$
Resolver $\boldsymbol{P}\boldsymbol{z}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)};$
 $\boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{z}^{(0)};$
Para $k = 0, 1, 2, \ldots$:
$$\alpha_{k} = \frac{\langle \boldsymbol{z}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)} \rangle}{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)} \rangle};$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_{k}\boldsymbol{p}^{(k)};$$

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_{k}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)};$$
resolver $\boldsymbol{P}\boldsymbol{z}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)};$

$$\beta_{k+1} = \frac{\langle \boldsymbol{z}^{(k+1)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)} \rangle}{\langle \boldsymbol{z}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)} \rangle};$$

$$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{z}^{(k+1)} + \beta_{k+1}\boldsymbol{p}^{(k)};$$
hasta satisfacer un criterio de detención.

La matriz P se llama precondicionador, y permite acelerar la convergencia del método del gradiente conjugado. Una forma de obtener un precondicionador adecuado es aplicando la factorización incompleta de Cholesky a la matriz A, donde para los elementos no nulos de esta matriz la componente l_{ij} se obtiene

mediante el método de Cholesky, mientras que para los elementos nulos de \boldsymbol{A}, l_{ij} una matriz \boldsymbol{L} y construimos $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^t$. Notar que $\boldsymbol{P} \approx \boldsymbol{A}$.	s=0. De aquí obtenemos
MVH/FMP/MSP/mvh	12 de octubre de 2016