Método del gradiente conjugado

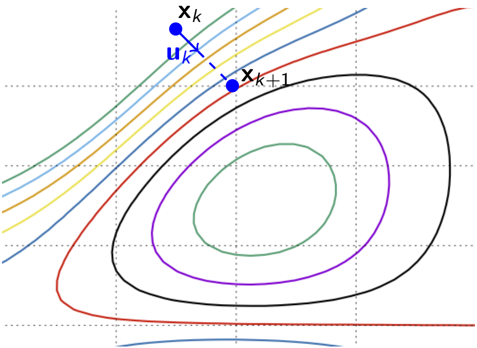
Marco V. Bayas

Noviembre 24, 2022

Método del descenso más pronunciado "steepest descent"

$F(\mathbf{x}_k)$: función de n variables $\mathbf{x} = (x_1, x_2, .., x_n)$

Búsqueda del mínimo de F: $$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - a \underbrace{\frac{\nabla F(\mathbf{x}_k)}{|\nabla F(\mathbf{x}_k)|}}_{\mathbf{u}_k}$$



$\mathbf{u}_k$: Vector unitario en la dirección definida por el gradiente

Método de Newton

$F(\mathbf{x})$: función de n variables $\quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$

Condición para el mínimo: $\quad \nabla F(\mathbf{x}) = 0$

Aproximación:

$$F(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}_0) + \sum_i \frac{\partial F}{\partial x_i}\Big|_0 (x_i - x_0) + \frac{1}{2}\sum_{ij} \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j}\Big|_0 (x_i - x_0)(x_j - x_0) + \cdots$$

Entonces:

$$\underbrace{\frac{\partial F(\mathbf{x})}{\partial x_i}}_{\nabla F} = \underbrace{\frac{\partial F}{\partial x_i}\bigg|_0}_{\nabla F_0} + \sum_j \underbrace{\frac{\partial^2 F}{\partial x_i x_j}\bigg|_0}_{\mathbf{A}} \underbrace{(x_j - x_0)}_{\mathbf{x}-\mathbf{x}_0} + \cdots$$

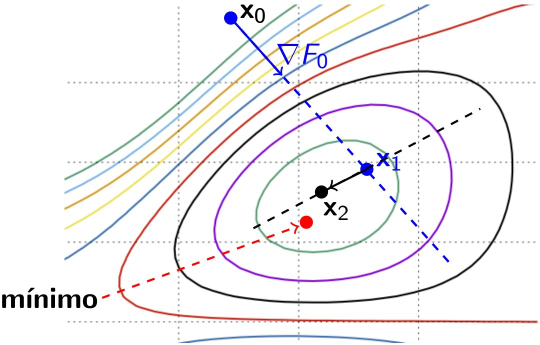
Ecuación para el mínimo: $\quad \nabla F_0 + \mathbf{A} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0$

Método de Newton

Ecuación para el mínimo: $\nabla F_0 + \mathbf{A} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0$

$$\rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{x}_0 - \mathbf{A}^{-1} \cdot \nabla F_0$$

Esquema iterativo: $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \cdot \nabla F_k$



Método de Newton

Algoritmo

Requerimientos:

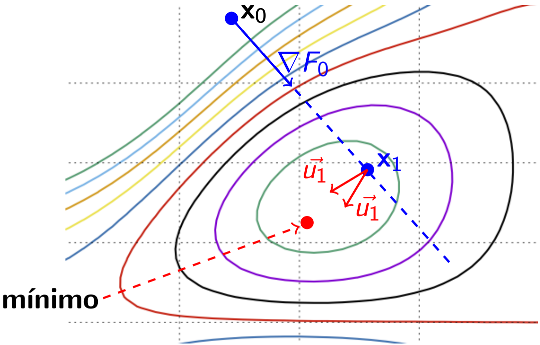
- $F(\mathbf{x})$ y ∇F
- Estimación inicial $\mathbf{x}_0$

1. Definir la estimación inicial: $\mathbf{x}_0$ y la tolerancia δ
2. Para cada valor de $k \geq 0$:
   - Evaluar $\mathbf{A}_k$ y ∇F_k
   - $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \cdot \nabla F_k$
3. Repetir el paso 2 hasta que $|\nabla F_k| < \delta$

Método del gradiente conjugado

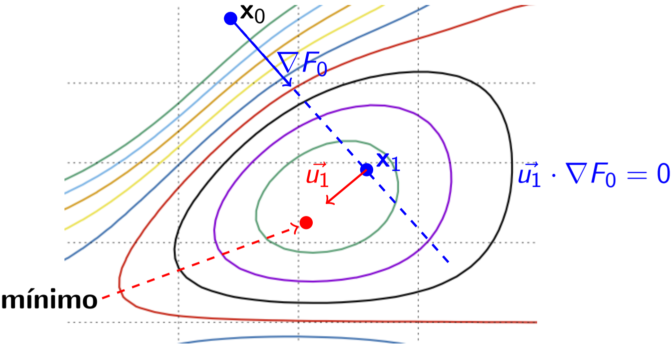
Método de Newton: $$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \cdot \nabla F_k$$

Alternativamente: $$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \cdot \mathbf{u}_k$$



$\mathbf{u}_k$ puede ajustarse considerando la dirección dada por ∇F_{k-1}

Método del gradiente conjugado



En general:

$$\vec{u}_k \cdot \vec{u}_{k-1} = 0$$

Método del gradiente conjugado

Algoritmo

Requerimientos:

- $F(\mathbf{x})$
- Estimación inicial $\mathbf{x}_0$
- ∇F_0

1. Definir la estimación inicial: $\mathbf{x}_0$, ∇F_0 y la tolerancia δ
2. Para cada valor de $k \geq 0$:
   - Evaluar $\mathbf{A}_k$
   - Evaluar u_k tal que $\vec{u}_k \cdot \vec{u}_{k-1} = 0$
   - Calcular $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \cdot u_k$
3. Repetir el paso 2 hasta que $|\nabla F_k| < \delta$