3 Descenso del gradiente y Gradiente Conjugado.

Objetivo.

Describir e implementar los métodos de descenso del gradiente y de gradiente conjugado para la solución de sistemas de ecuaciones lineales.

Trabajo realizado con el apoyo del Programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE101922

```
import numpy as np
import ipywidgets as widgets
import macti.visual as mvis
import macti.matem as mmat
```

La siguiente función será usada para graficar algunos resultados.

```
def grafica(x, y1, y2, sol = [], xs = [], ys = [], vA = [], xg = [], yg = [], z =
    """
    Esta función grafica las líneas rectas, la solución, los pasos y los eigenvec
    """
    v = mvis.Plotter(1,1,[dict(aspect='equal')],title='Cruce de rectas')
    v.set_coordsys(1)

    # Graficamos las líneas rectas
    v.plot(1, x, y1, lw = 3, c = 'seagreen', label = '$3x+2y=2$') # Línea recta 1
    v.plot(1, x, y2, lw = 3, c = 'mediumorchid', label = '$2x+6y=-8$') # Línea re

    if len(sol):
        # Graficamos la solución
        v.scatter(1, sol[0], sol[1], fc='sandybrown', ec='k', s = 75, alpha=0.75,

    if len(xs) and len(ys):
        # Graficamos los pasos
        v.scatter(1, xs[0], ys[0], fc='yellow', ec='k', s = 75, alpha=0.75, zorde
        v.scatter(1, xs[1:], ys[1:], c='navy', s = 10, alpha=0.5, zorder=8)
        v.plot(1, xs, ys, c='grey', ls = '--', lw=1.0, zorder=8, label='Pasos del

    if len(vA):
        # Graficamos los eigenvectores
        v.quiver(1, [sol[0], sol[0]], [sol[1], sol[1]], vA[0], vA[1], scale=10, z

    if len(xg) and len(yg) and len(z):
        v.contour(1, xg, yg, z, levels = 25, cmap='twilight', linewidths=1.0, zor
```

```
    v.legend(ncol = 1, frameon=True, loc='best', bbox_to_anchor=(1.90, 1.02))
    v.grid()
    v.show()
```

3.1 Ejemplo 1. Cruce de líneas rectas.

Las siguientes dos rectas se cruzan en algún punto.

$$
\begin{aligned}
3x + 2y &= 2 \\
2x + 6y &= -8
\end{aligned}
$$

Las ecuaciones de las rectas se pueden escribir como:

$$
\begin{array}{rcl}
\dfrac{3}{2}x + y & = & 1 \\
\dfrac{2}{6}x + y & = & -\dfrac{8}{6}
\end{array}
\Longrightarrow
\begin{array}{l}
y = m_1 x + b_1 \\
y = m_2 x + b_2
\end{array}
\text{donde}
\begin{array}{ll}
m_1 = -\dfrac{3}{2} & b_1 = 1 \\
m_2 = -\dfrac{2}{6} & b_2 = -\dfrac{8}{6}
\end{array}
$$

Las ecuaciones de las rectas se pueden escribir en forma de un sistema lineal:

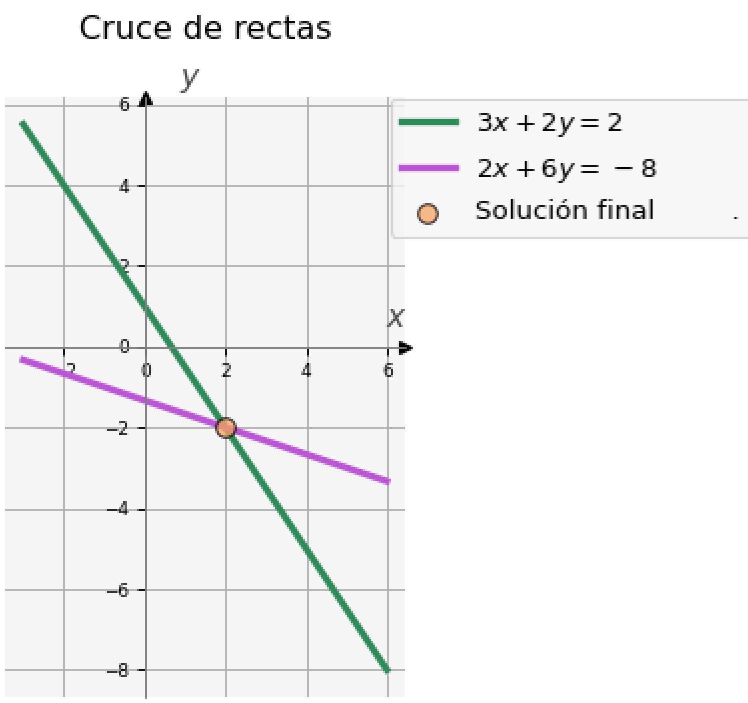
$$
\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}
\tag{1}
$$

Podemos calcular el cruce de las rectas resolviendo el sistema lineal:

```
# Dominio
x = np.linspace(-3,6,10)

# Línea recta 1
m1 = -3/2
b1 = 1
y1 = m1 * x + b1

# Línea recta 2
m2 = -2/6
b2 = -8/6
y2 = m2 * x + b2

# Definimos el sistema de ecuaciones lineales
A = np.array([[3, 2],[2,6]] )
b = np.array([2,-8])
print("Matriz A : \n",A)
print("Vector b : \n", b)

# Resolvemos el sistema
sol = np.linalg.solve(A,b)
print("Solución del sistema: ", sol)
```

```
    # Usamos la función grafica() para mostrar las rectas y la solución
    grafica(x, y1, y2, sol)
```

```
Matriz A :
 [[3 2]
 [2 6]]
Vector b :
 [ 2 -8]
Solución del sistema:  [ 2. -2.]
```



En general, un sistema de ecuaciones de $n \times n$ se escribe como sigue:

$$
\begin{array}{ccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + \cdots + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\
a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + \cdots + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
a_{i1}x_1 & + & a_{i2}x_2 & + \cdots + & a_{in}x_n & = & b_i \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + \cdots + & a_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}
$$

Es posible usar métodos más eficientes que el de Jacobi, Gauss-Seidel y SOR para resolver este tipo de sistemas. A continuación veremos los métodos del descenso del gradiente y método de gradiente conjugado.

4 Métodos del subespacio de Krylov

Una excelente referencia para comenzar con estos métodos es la siguiente:

Shewchuk, J. R. (1994). An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain. Carnegie-Mellon University. Department of Computer Science.

4.1 Cálculo de eigenvectores

Los eigenvalores y eigenvectores de una matriz son herramientas muy útiles para entender ciertos comportamientos. Una descripción la puedes ver en la notebook 05_Matrices_Normas_Eigen.ipynb. Los eigenvalores y eigenvectores se pueden calcular como sigue:

```
# Usando la función np.linalg.eig()
np.linalg.eig(A)  # w: eigenvalues, v: eigenvectors
```

```
EigResult(eigenvalues=array([2., 7.]), eigenvectors=array([[-0.89442719, -0.4472136 ],
       [ 0.4472136 , -0.89442719]]))
```

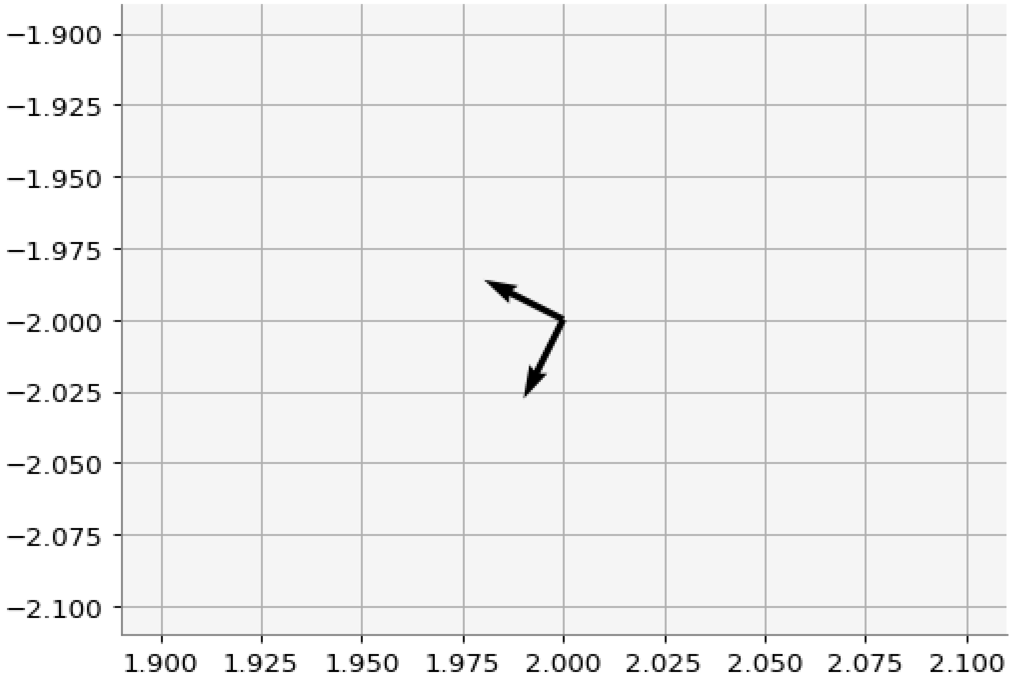
La función `eigen_land()` de la biblioteca `macti` utiliza la función `np.linalg.eig()` para ofrecer una salida más entendible:

```
# Usando la función eigen_land() de macti
wA, vA = mmat.eigen_land(A)
```

```
eigenvalores = [2. 7.]
eigenvectores:
 [-0.89442719  0.4472136 ]
 [-0.4472136  -0.89442719]
ángulo entre eigenvectores = 90.0
```

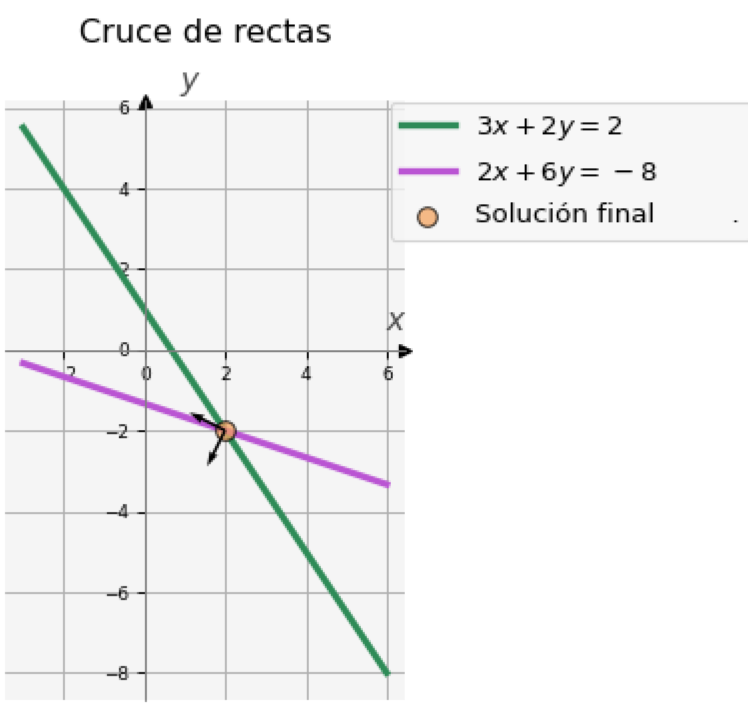
Los eigenvectores se pueden visualizar, cuando la matriz es de 2×2:

```
# Graficamos los eigenvectores
xv = np.array([[sol[0], sol[0]],
               [sol[1], sol[1]]])

v = mvis.Plotter()
v.quiver(1, xv[0], xv[1], vA[0], vA[1], scale=10, zorder=6)
v.grid()
v.show()
```



Ahora usamos la función `grafica()` definida al principio de esta notebook para ver los eigenvectores y las líneas rectas:

```
# Usamos la función grafica() para ver los eigenvectores
grafica(x,y1,y2,sol,vA=vA)
```



4.2 Forma cuadrática

La forma cuadrática de un sistema de ecuaciones lineales, permite transformar el problema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ en un probema de minimización.

$$
f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T A\mathbf{x} - \mathbf{x}^T\mathbf{b} + \mathbf{c}
$$

$$
A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}, \mathbf{c} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},
$$

$$
f'(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}A^T\mathbf{x} + \frac{1}{2}A\mathbf{x} - \mathbf{b}
$$

- Cuando A es simétrica: $ f^() = A - $
- Entonces un punto crítico de $f(\mathbf{x})$ se obtiene cuando $ f^() = A - = 0$, es decir cuando $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$

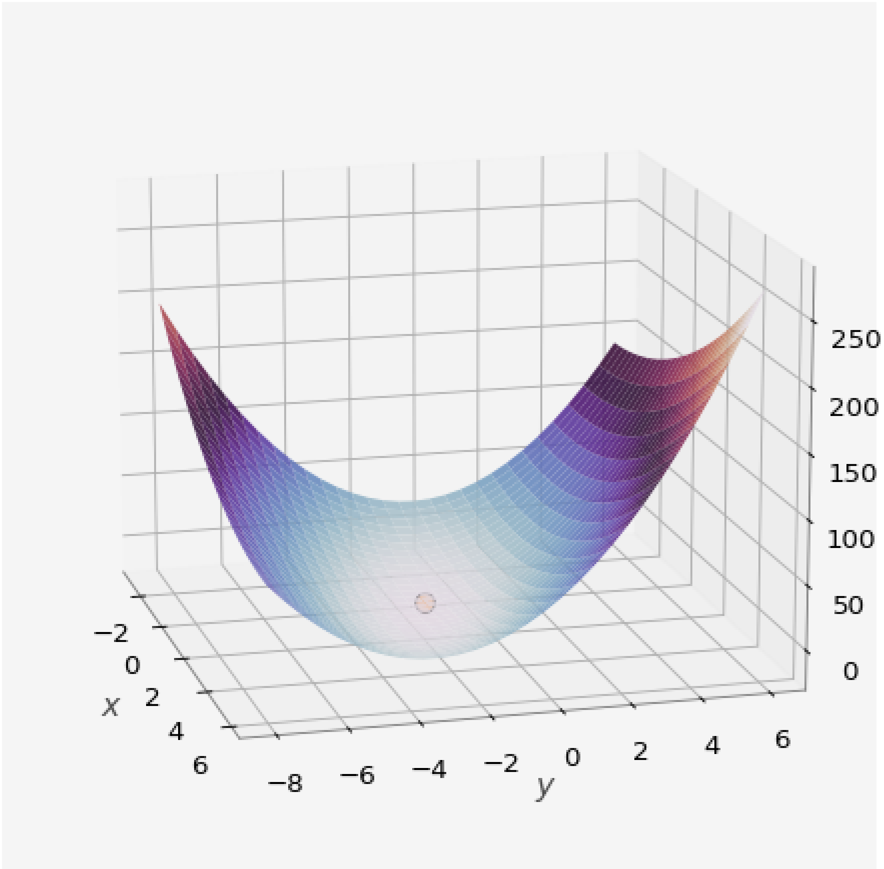
Calculemos la forma cuadrática para nuestro ejemplo:

```
# Función cuadrática
f = lambda A,b,c,x: 0.5 * x @ A @ x.T - x @ b.T + c

# Tamaño de la malla para graficar
size_grid = 30
xg, yg = np.meshgrid(np.linspace(-3,6,size_grid),
                     np.linspace(-8,6,size_grid))

# Arreglo para almacenar los valores de la función cuadrática
z = np.zeros((size_grid, size_grid))

# Cálculo
for i in range(size_grid):
    for j in range(size_grid):
        xc = np.array([[xg[i,j], yg[i,j]]])
        z[i,j] = f(A,b,0,xc)
```

```
/tmp/ipykernel_217/3515168418.py:16: DeprecationWarning: Conversion of an array with ndim
> 0 to a scalar is deprecated, and will error in future. Ensure you extract a single
element from your array before performing this operation. (Deprecated NumPy 1.25.)
  z[i,j] = f(A,b,0,xc)
```

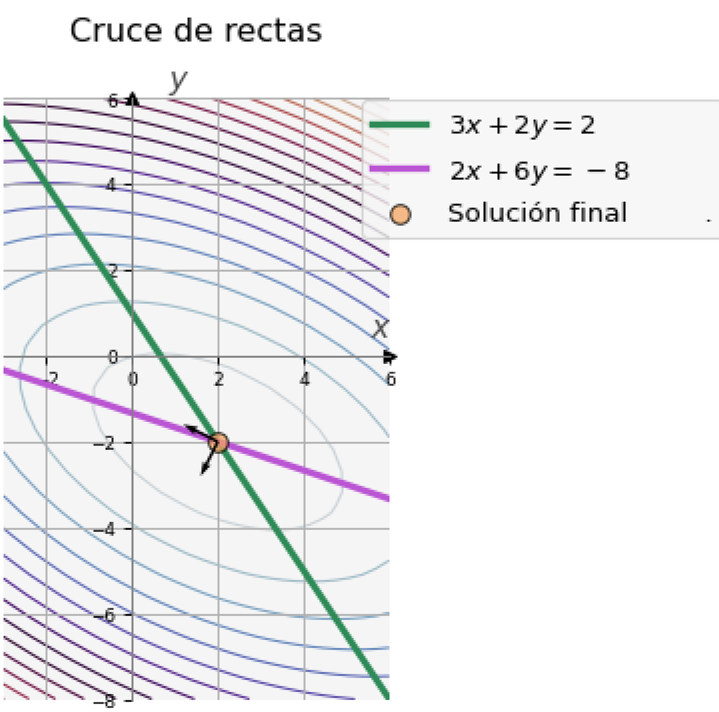
Graficamos la forma cuadrática, almacenada en `z`, y la solución. Esta última debe estar en el mínimo de $f(\mathbf{x})$.

```
axis_par = [dict(projection='3d', aspect='auto', xlabel = '$x$', ylabel = '$y$',
v = mvis.Plotter(1,1, axis_par, dict(figsize=(8,6)))
v.plot_surface(1, xg, yg, z, cmap='twilight', alpha=0.90) # f(x)
v.scatter(1, sol[0], sol[1], fc='sandybrown', ec='k', s = 75, zorder=5, label='Sc
v.axes(1).view_init(elev = 15, azim = -15)
```



Observamos un paraboloide cuyo mínimo es la solución del sistema. Esto es más claro si graficamos los contornos de $f(\mathbf{x})$:

```
grafica(x, y1, y2, sol, vA = vA, xg = xg, yg = yg, z = z)
```



4.3 Algoritmo de descenso por el gradiente.

Este algoritmo utiliza la dirección del gradiente, en sentido negativo, para encontrar el mínimo y la solución del sistema:

$

$$
\begin{array}{l}
\text{Input} : \mathbf{x}_0, tol \\
\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0 \\
k = 0 \\
\text{WHILE}(\mathbf{r}_k > tol) \\
\qquad \mathbf{r}_k \leftarrow \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k \\
\qquad \alpha_k \leftarrow \dfrac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{r}_k^T A \mathbf{r}_k} \\
\qquad \mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{r}_k \\
\qquad k \leftarrow k + 1 \\
\text{ENDWHILE}
\end{array}
$$

$

4.4 Implementación.

```
def steepest(A,b,xi, yi,tol,kmax):
    # Solución inicial en forma de vector
    x = np.array([xi, yi])

    # Arreglos para almacenar los pasos.
    xs, ys = [xi], [yi]

    # Solución exacta
    xe = np.array([2, -2])

    r = b.T - A @ x
    res = np.linalg.norm(r, 2)
    res_list = []
    error = []
    k = 0
    while(res > tol and k < kmax):
        alpha = r.T @ r / (r.T @ A @ r)
        x = x + r * alpha
        xs.append(x[0])
        ys.append(x[1])
        r = b.T - A @ x

        # Resido
        res = np.linalg.norm(r, 2)
```

```
            res_list.append(res)

            # Error
            e = np.linalg.norm(np.array([x[0], x[1]]) - xe, 2)
            error.append(e)

            k += 1
            print('{:2d} {:10.9f} ({:10.9f}, {:10.9f})'.format(k, e, x[0], x[1]))
        return x, np.array(xs), np.array(ys), error, res_list, k
```

4.5 Ejercicio 1.

Haciendo uso de la función `steepest()` definida en la celda anterior, aproxima la solución del sistema de ecuaciones del Ejemplo 1. Utiliza la solución inicial `(xi, yi) =` $(-2, 2)$, una tolerancia `tol` = 1×10^{-5} y `kmax` = 50 iteraciones. Utiliza las variables `solGrad`, `xs`, `ys`, `eGrad`, `rGrad` e `itGrad` para almacenar la salida de la función `steepest()`. Posteriormente grafica las rectas y cómo se va calculando la solución con este método. Utiliza la función `grafica()`. Grafica también el error y el residuo.

```
# Solución inicial (debe darse como un arreglo tipo columna)
# (xi, yi) = ...

# Método Steepest descend
# ...

### BEGIN SOLUTION
# Solución inicial
(xi, yi) = (-2., 2.)
tol = 1e-5
kmax = 50

# Método Steepest descend
solGrad, xs, ys, eGrad, rGrad, itGrad  = steepest(A, b, xi, yi, tol, kmax)

#file_answer.write('1', solGrad, 'solGrad es incorrecta: revisa la llamada y ejec
#file_answer.write('2', eGrad[-1], 'eGrad[-1] es incorrecto: revisa la llamada y
#file_answer.write('3', rGrad[-1], 'rGrad[-1] es incorrecto: revisa la llamada y
#file_answer.write('4', itGrad, 'itGrad es incorrecto: revisa la llamada y ejecuc

### END SOLUTION
```

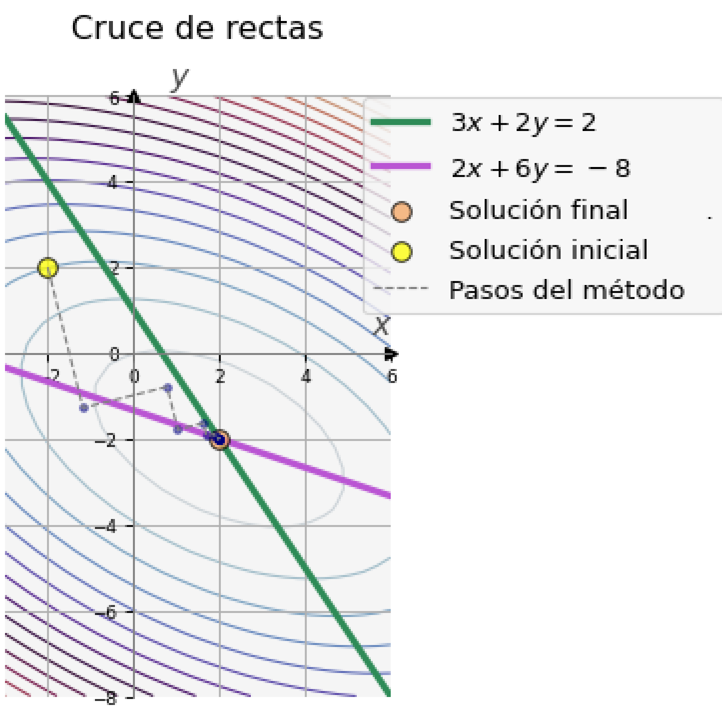
```
1 3.261835423 (-1.180722892, -1.277108434)
2 1.717502736 (0.785542169, -0.785542169)
3 0.990340394 (1.034286544, -1.780519669)
4 0.521458662 (1.631273044, -1.631273044)
5 0.300681662 (1.706795433, -1.933362598)
6 0.158322389 (1.888049165, -1.888049165)
```

```
 7 0.091291300 (1.910978854, -1.979767921)
 8 0.048068966 (1.966010108, -1.966010108)
 9 0.027717358 (1.972971893, -1.993857248)
10 0.014594433 (1.989680177, -1.989680177)
11 0.008415391 (1.991793876, -1.998134972)
12 0.004431081 (1.996866753, -1.996866753)
13 0.002555034 (1.997508502, -1.999433750)
14 0.001345340 (1.999048701, -1.999048701)
15 0.000775745 (1.999243545, -1.999828078)
16 0.000408465 (1.999711172, -1.999711172)
17 0.000235528 (1.999770329, -1.999947802)
18 0.000124016 (1.999912308, -1.999912308)
19 0.000071510 (1.999930269, -1.999984152)
20 0.000037653 (1.999973375, -1.999973375)
21 0.000021711 (1.999978829, -1.999995188)
22 0.000011432 (1.999991916, -1.999991916)
23 0.000006592 (1.999993572, -1.999998539)
24 0.000003471 (1.999997546, -1.999997546)
25 0.000002001 (1.999998048, -1.999999556)
```

```
#quizz.eval_numeric('1', solGrad)
#quizz.eval_numeric('2', eGrad[-1])
#quizz.eval_numeric('3', rGrad[-1])
#quizz.eval_numeric('4', itGrad)
```

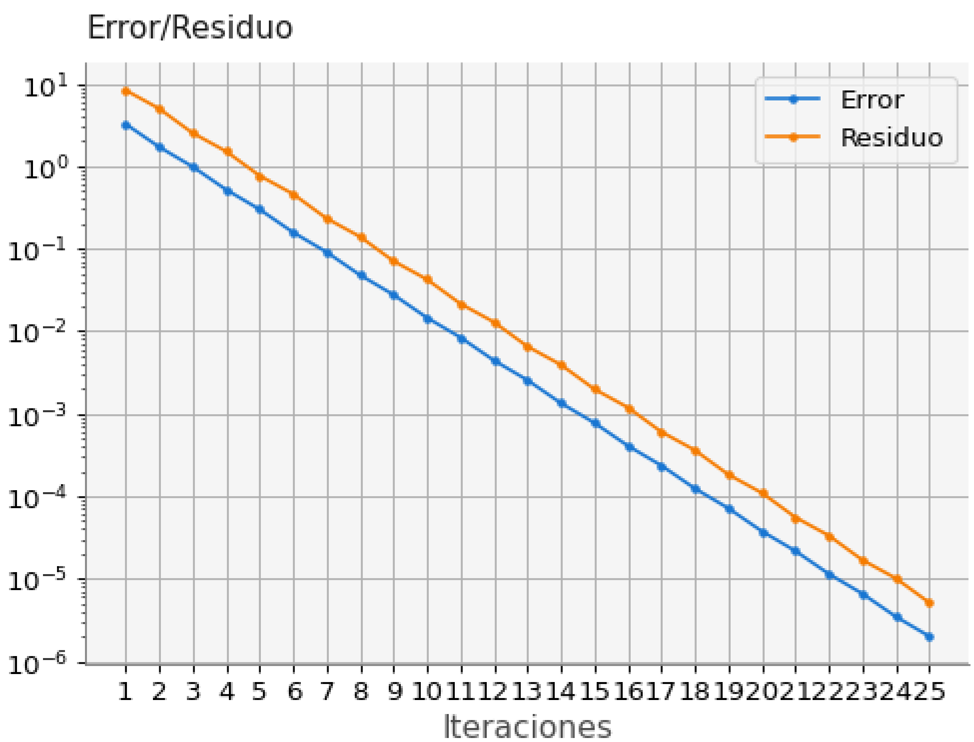
Gráfica de las rectas, la solución y los pasos realizados

```
grafica(x, y1, y2, sol, xs, ys, xg = xg, yg = yg, z = z)
```



Grafica del error y el residuo.

```
# Lista con el número de las iteraciones
l_itGrad = list(range(1,itGrad+1))

# Parámetros para los ejes
a_p = dict(yscale='log', xlabel='Iteraciones', xticks = l_itGrad)

# Gráfica del error
v = mvis.Plotter(1,1,[a_p])
v.axes(1).set_title('Error/Residuo', loc='left')
v.plot(1, l_itGrad, eGrad, marker='.', label='Error')
v.plot(1, l_itGrad, rGrad, marker='.', label='Residuo')
v.legend()
v.grid()
```



4.6 Algoritmo de Gradiente Conjugado

Este algorimo mejora al descenso del gradiente tomando direcciones conjugadas para evitar repetir un paso en una misma dirección.

$

$$
\begin{aligned}
&\text{Input : } A, \mathbf{b}, \mathbf{x}_0, k_{max}, tol \\
&\mathbf{d_0} = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0 \\
&k = 0 \\
&\text{While}(||\mathbf{r}|| > tol \quad \text{AND} \quad k < k_{max}) \\
&\qquad \alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{d}_k^T A \mathbf{d}_k} \\
&\qquad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \\
&\qquad \mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A \mathbf{d}_k \\
&\qquad \beta_{k+1} = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k} \\
&\qquad \mathbf{d}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_{k+1} \mathbf{d}_k \\
&\qquad k = k + 1 \\
&\text{End While}
\end{aligned}
$$

$

4.6.1 Implementación.

```
def conjugateGradient(A,b,xi, yi, tol,kmax):
    # Solución inicial en forma de vector
    x = np.array([xi, yi])

    # Arreglos para almacenar los pasos.
    xs, ys = [xi], [yi]

    # Solución exacta
    xe = np.array([2, -2])

    r = b.T - A @ x
    d = r
    rk_norm = r.T @ r
    res = np.linalg.norm(rk_norm)
    res_list = []
    error = []

    k = 0
    while(res > tol and k < kmax):
        alpha = float(rk_norm) / float(d.T @ A @ d)
        x = x + alpha * d
        xs.append(x[0])
        ys.append(x[1])
        r = r - alpha * A @ d

        # Residuo
        res = np.linalg.norm(r, 2)
        res_list.append(res)
```

```
            # Error
            e = np.linalg.norm(np.array([x[0], x[1]]) - xe, 2)
            error.append(e)

            rk_old = rk_norm
            rk_norm = r.T @ r
            beta = float(rk_norm) / float(rk_old)
            d = r + beta * d
            k += 1
            print('{:2d} {:10.9f} ({:10.9f}, {:10.9f})'.format(k, e, x[0], x[1]))
        return x, np.array(xs), np.array(ys), error, res_list, k
```

4.7 Ejercicio 2.

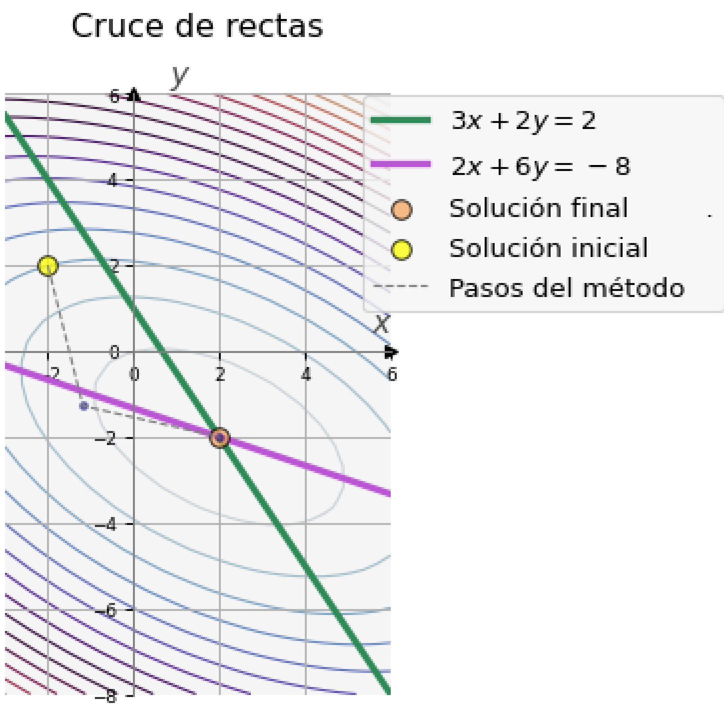
Haciendo uso de la función `conjugateGradient()` definida en la celda anterior, aproxima la solución del sistema de ecuaciones del Ejemplo 1. Utiliza la solución inicial `(xi, yi) =` $(-2, 2)$, una tolerancia `tol` = 1×10^{-5} y `kmax` = 50 iteraciones. Utiliza las variables `solCGM`, `xs`, `ys`, `eCGM`, `rCGM` e `itCGM` para almacenar la salida de la función `conjugateGradient()`. Posteriormente grafica las rectas y cómo se va calculando la solución con este método. Utiliza la función `grafica()`. Grafica también el error y el residuo.

```
    # Solución inicial (debe darse como un arreglo tipo columna)
    # (xi, yi) = ...

    # Método CGM
    # ...

    ### BEGIN SOLUTION
    # Solución inicial
    (xi, yi) = (-2., 2.)
    tol = 1e-5
    kmax = 50

    # Método CGM
    solCGM, xs, ys, eCGM, rCGM, itCGM = conjugateGradient(A, b, xi, yi, tol, kmax)

    #file_answer.write('5', solCGM, 'solCGM es incorrecta: revisa la llamada y ejecuc
    #file_answer.write('6', eCGM[-1], 'eCGM[-1] es incorrecto: revisa la llamada y ej
    #file_answer.write('7', rCGM[-1], 'rCGM[-1] es incorrecto: revisa la llamada y ej
    #file_answer.write('8', itCGM, 'itCGM es incorrecto: revisa la llamada y ejecució

    ### END SOLUTION
```

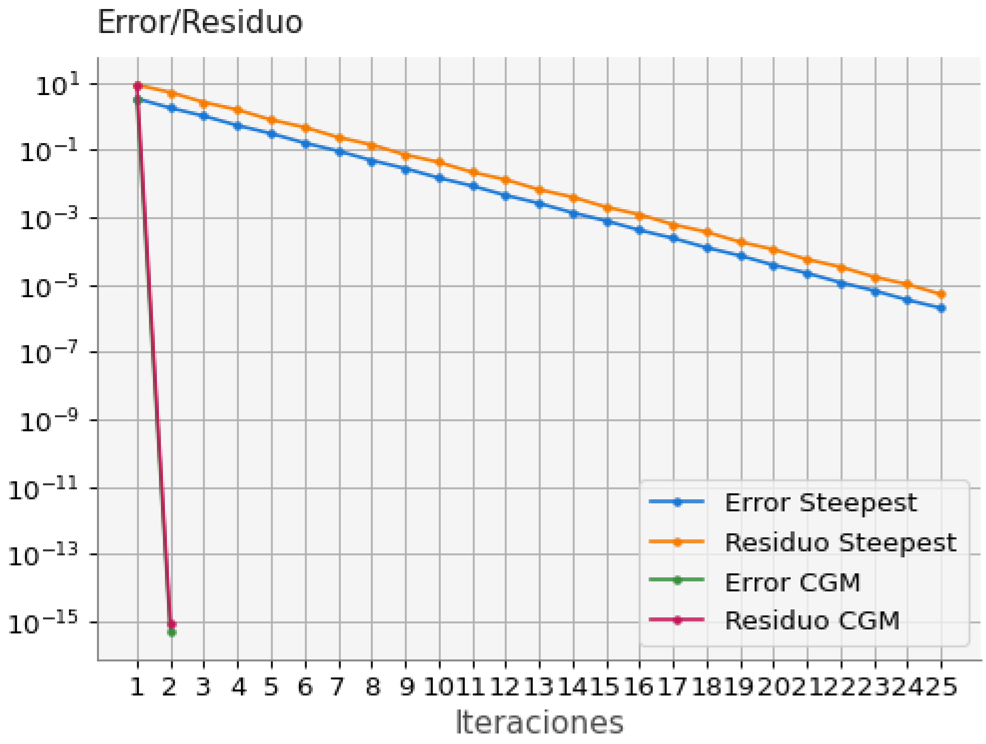
```
1 3.261835423 (-1.180722892, -1.277108434)
2 0.000000000 (2.000000000, -2.000000000)
```

```
#quizz.eval_numeric('5', solCGM)
#quizz.eval_numeric('6', eCGM[-1])
#quizz.eval_numeric('7', rCGM[-1])
#quizz.eval_numeric('8', itCGM)
```

```
grafica(x, y1, y2, sol, xs, ys, xg = xg, yg = yg, z = z)
```




```
# Lista con el número de las iteraciones
l_itGrad = list(range(1,itGrad+1))
l_itCGM = list(range(1,itCGM+1))

# Parámetros para los ejes
a_p = dict(yscale='log', xlabel='Iteraciones', xticks = l_itGrad)

# Gráfica del error
v = mvis.Plotter(1,1,[a_p])
v.axes(1).set_title('Error/Residuo', loc='left')

v.plot(1, l_itGrad, eGrad, marker='.', label='Error Steepest')
v.plot(1, l_itGrad, rGrad, marker='.', label='Residuo Steepest')
v.plot(1, l_itCGM, eCGM, marker='.', label='Error CGM')
v.plot(1, l_itCGM, rCGM, marker='.', label='Residuo CGM')

v.legend()
v.grid()
```



4.8 Ejercicio 3.

Carga los archivos `errorJacobi.npy`, `errorGaussSeidel.npy` y `errorSOR.npy` en las variables `eJ`, `eG` y `eSOR` respectivamente (utiliza la función `np.load()`). Posteriormente grafica los errores de los 5 métodos: Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, Steepest Descend, CGM. ¿Cuál de todos estos métodos usarías?

```
eJ = np.load('errorJacobi.npy')
eG = np.load('errorGaussSeidel.npy')
eSOR = np.load('errorSOR.npy')

# Lista con el número de las iteraciones
l_itJ = list(range(1,len(eJ)+1))
l_itG = list(range(1,len(eG)+1))
l_itSOR = list(range(1,len(eSOR)+1))
l_itGrad = list(range(1,itGrad+1))
l_itCGM = list(range(1,itCGM+1))

# Parámetros para los ejes
a_p = dict(yscale='log', xlabel='Iteraciones', xticks = l_itGrad)

# Gráfica del error
v = mvis.Plotter(1,1,[a_p])
v.axes(1).set_title('Error', loc='left')
v.plot(1, l_itJ, eJ, marker='.', label='Jacobi')
v.plot(1, l_itG, eG, marker='.', label='Gauss-Seidel')
```

```
        v.plot(1, l_itSOR, eSOR, marker='.', label='SOR')
        v.plot(1, l_itGrad, eGrad, marker='.', label='Steepest descend')
        v.plot(1, l_itCGM, eCGM, marker='.', label='Gradiente Conjugado')

        v.legend()
        v.grid()
```