8 Descenso del gradiente y Gradiente Conjugado.

8 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.

MACTI-Algebra_Lineal_01 by Luis M. de la Cruz is licensed under Attribution-ShareAlike 4.0 International © (1)

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, zord\epsilon
        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()
```

8.1 Ejemplo 1. Cruce de líneas rectas.

Las siguientes dos rectas se cruzan en algún punto.

$$3x + 2y = 2$$
$$2x + 6y = -8$$

Las ecuaciones de las rectas se pueden escribir como:

$$egin{array}{lcl} rac{3}{2}x+y & = & 1 \ rac{2}{6}x+y & = & -rac{8}{6} \end{array} \Longrightarrow egin{array}{ll} y=m_1x+b_1 \ y=m_2x+b_2 \end{array} ext{donde} egin{array}{ll} m_1=-rac{3}{2} & b_1=1 \ m_2=-rac{2}{6} & b_2=-rac{8}{6} \end{array}$$

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

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

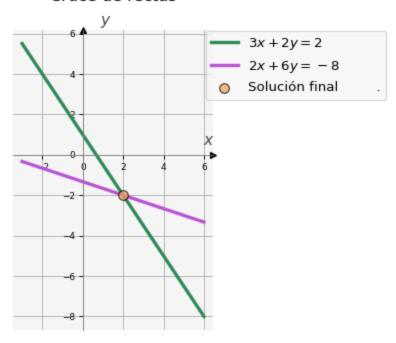
Podemos calcular el cruce de las rectas resolviendo el sistema lineal:

```
# 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.]

Cruce de rectas



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

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.

9 Métodos del subespacio de Krylov

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

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

9.1 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 <u>05_Matrices_Normas_Eigen.ipynb</u>. Los eigenvalores y eigenvectores se pueden calcular como sigue:

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

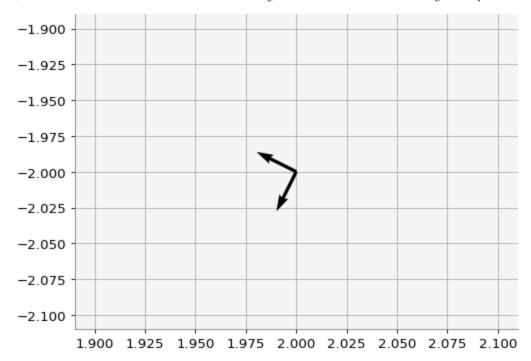
```
EigResult(eigenvalues=array([2., 7.]), eigenvectors=array([[-0.89442719, -0.4472136], [0.4472136, -0.89442719]]))
```

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
```

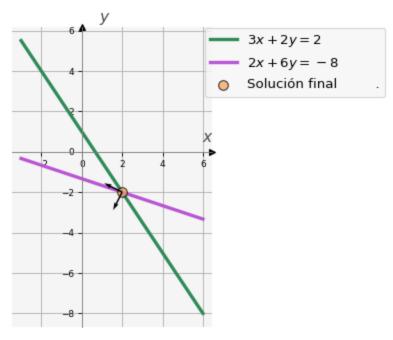
Los eigenvectores se pueden visualizar, cuando la matriz es de 2×2 :



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)

Cruce de rectas



9.2 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.

$$f(\mathbf{x}) = rac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{b} + \mathbf{c}$$
 $A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}, \mathbf{c} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$ $f'(\mathbf{x}) = rac{1}{2}A^T \mathbf{x} + rac{1}{2}A \mathbf{x} - \mathbf{b}$

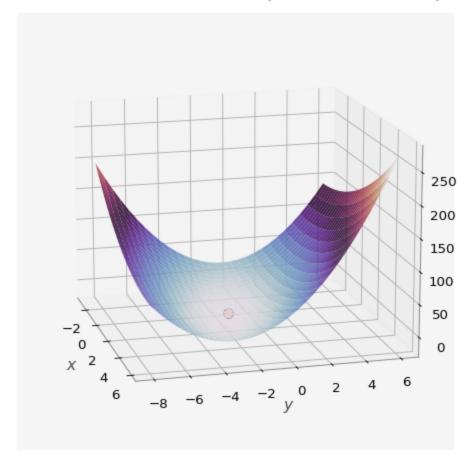
- Cuando A es simétrica: \$ f^() = A \$
- Entonces un punto crítico de $f(\mathbf{x})$ se obtiene cuando $f(\mathbf{x})$ = A = 0 $f(\mathbf{x})$, es decir cuando $f(\mathbf{x})$

Calculemos la forma cuadrática para nuestro ejemplo:

/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 $f(\mathbf{x})$.

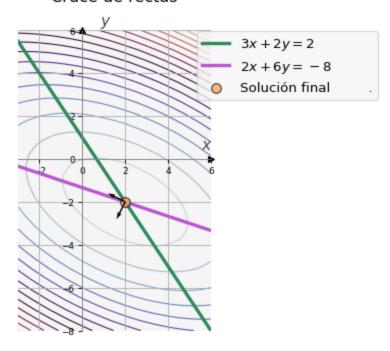
```
axis_par = [dict(projection='3d', aspect='auto', xlabel = '$x$', ylabel = '$y$',
v = mvis.Plotter(1,1, axis_par, dict(figsize=(8,6)))
v.plot_surface(1, xg, yg, z, cmap='twilight', alpha=0.90) # f(x)
v.scatter(1, sol[0], sol[1], fc='sandybrown', ec='k', s = 75, zorder=5, label='Sc
v.axes(1).view_init(elev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



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

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

Cruce de rectas



9.3 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:

\$

$$egin{aligned} \operatorname{Input}: \mathbf{x}_0, tol \ \mathbf{r}_0 &= \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0 \ k &= 0 \ \end{aligned} \ & \operatorname{WHILE}(\mathbf{r}_k > tol) \ & \mathbf{r}_k \leftarrow \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k \ & lpha_k \leftarrow rac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{r}_k^T A \mathbf{r}_k} \ & \mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k + lpha_k \mathbf{r}_k \ & k \leftarrow k+1 \end{aligned}$$

\$

9.4 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):</pre>
        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
```

9.5 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 $tol = 1 \times 10^{-5}$ 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
```

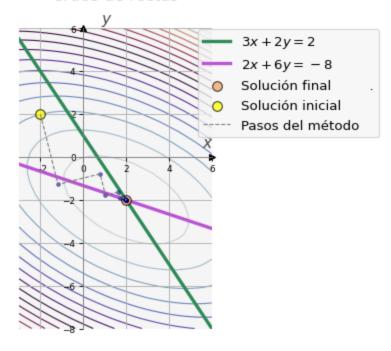
```
1 3.261835423 (-1.180722892, -1.277108434)
2 1.717502736 (0.785542169, -0.785542169)
3 0.990340394 (1.034286544, -1.780519669)
4 0.521458662 (1.631273044, -1.631273044)
5 0.300681662 (1.706795433, -1.933362598)
6 0.158322389 (1.888049165, -1.888049165)
```

```
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)
```

Cruce de rectas



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()
```



9.6 Algoritmo de Gradiente Conjugado

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

\$

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

\$

9.6.1 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
```

9.7 Ejercicio 2.

Haciendo uso de la función <code>conjugateGradient()</code> 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 $tol = 1 \times 10^{-5}$ y kmax = 50 iteraciones. Utiliza las variables <code>solCGM</code>, <code>xs</code>, <code>ys</code>, <code>eCGM</code>, <code>rCGM</code> e <code>itCGM</code> para almacenar la salida de la función <code>conjugateGradient()</code>. Posteriormente grafica las rectas y cómo se va calculando la solución con este método. Utiliza la función <code>grafica()</code>. Grafica también el error y el residuo.

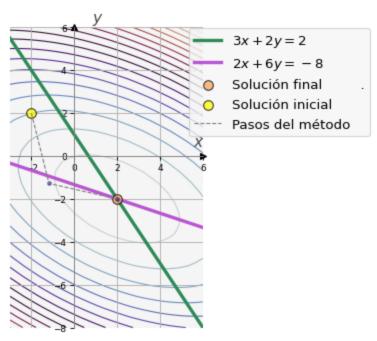
```
# Solución inicial (debe darse como un arreglo tipo columna)
\# (xi, yi) = ...
# Método CGM
# ...
### BEGIN SOLUTION
# Solución inicial
(xi, yi) = (-2., 2.)
tol = 1e-5
kmax = 50
# Método CGM
solCGM, xs, ys, eCGM, rCGM, itCGM = conjugateGradient(A, b, xi, yi, tol, kmax)
#file_answer.write('5', solCGM, '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 ejecucić
### 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)
```

Cruce de rectas



```
# 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()
```



9.8 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()
```

