Métodos numéricos - Tarea 10
Método de gradiente conjugado

Salim Vargas Hernández

21 de octubre del 2018

1. Introducción

El método de gradiente conjugado permite resolver sistemas de ecuaciones de la forma $Ax = b$ donde la matriz A de $n \times n$ es una matriz simétrica positiva definida.
El método de gradiente conjugado es un algoritmo iterativo que tiene la ventaja de llegar a la solución en a lo mucho n iteraciones. Esto siempre y cuando se cumplan las condiciones para la matriz A de ser simétrica y positiva definida.

2. Desarrollo

Dada un sistema de ecuaciones $Ax = b$ donde la matriz A es una matriz de $n \times n$ simétrica positiva definida, y dada una aproximación inicial de la solución x_0, el método de gradiente conjugado realiza iteraciones de la forma

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

donde p_k es una dirección de descenso y α_k es un factor de escalamiento para la dirección p_k.
El método de gradiente conjugado está construído de forma tal que las direcciones p_k sean todas ortogonales entre sí, además de que sean direcciones conjugadas con respecto a A, es decir que $p_i^T A p_j = 0 \quad \forall i \neq j$. Por lo tanto, las direcciones se actualizan de la siguiente forma

$$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

donde $r_i = Ax_i - b$.
El coeficiente α_i está dado por

$$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$$

mientras que el codeficiente $beta_k$ está construído de tal forma que elimina la proyección de la dirección anterior, para así obtener vectores ortogonales, quedando definido de la forma

$$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$$

Dado que las direcciones p_i son ortogonales, forman una base, por lo tanto, el vector solución del sistema $Ax = b$, x^*, se puede escribir como una combinacióñ lineal de la base formada por las direcciones p_i, es decir

$$x^* = \sum_{i=0}^{n} c_i p_i$$

por lo que el método de gradiente conjugado converge en a lo más n iteraciones.
El algoritmo 1 muestra el pseudocódigo del método de gradiente conjugado.

Algoritmo 1 Método de gradiente conjugado

Entrada:

Matriz simétrica positiva definida A

Vector b

Aproximación inicial x_0

Tolerancia tol

Salida: Vector solución x_k con la mejor aproximación a la solución dada la tolerancia tol

$r_0 = Ax_0 - b$

$p_0 = -r_0$

Mientras $||r_k|| > tol$ y las iteraciones sean menores que n **hacer**

$\quad \alpha_k = \dfrac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$

$\quad x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$

$\quad r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$

$\quad \beta_{k+1} = \dfrac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$

$\quad p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$

Fin Mientras

Devolver x_k

3. Resultados

Se programó el método de gradiente conjugado usando como tolerancia el épsilon de la máquina ε_M, es decir, el número tal que en la aritmética de punto flotante de la computadora $1.0 + \varepsilon_M > 1.0$.

No se especificó un máximo de iteraciones ya que el método tiene a lo más n iteraciones, el método utiliza esta dimensión como criterio de paro en las iteraciones.

La aproximación inicial x_0 fue el vector conformado solamente por ceros.

El método se probó para los sistemas con las matrices `mat5a.txt`, `mat5b.txt` y `mat30.txt`. Los resultados se muestran en la figura 1.

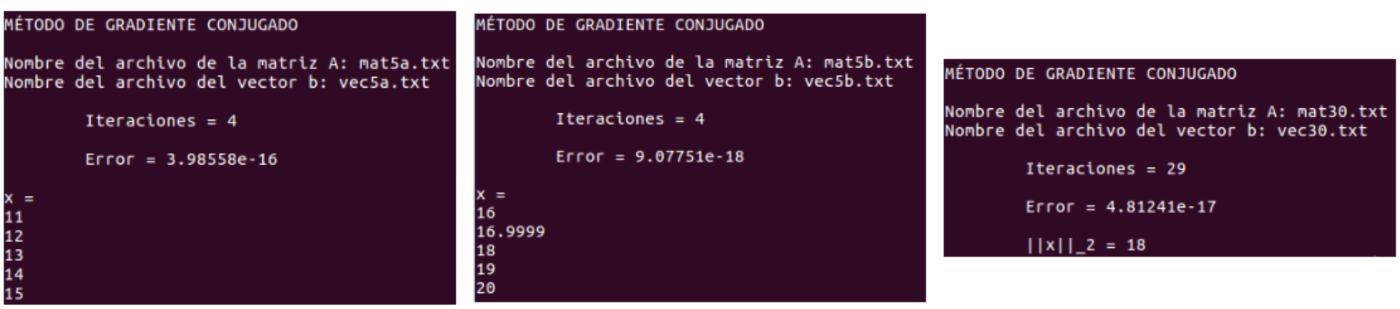

Figura 1: Resultados del método de gradiente conjugado para las matrices `mat5a.txt`, `mat5b.txt` y `mat30.txt`

4. Conclusiones

El método de gradiente conjugado converge en muy pocas iteraciones a la solución, resultado más rápido que los métodos hasta ahora implementados, además de que la cota de iteraciones basada en la dimensión de la matriz evita tener que calibrar el máximo de iteraciones para cada problema.

Sin embargo, hay que recordar que este método establece como condiciones para la matriz A el ser simétrica positiva definida.