Análisis aplicado.
Gradiente conjugado y proyecto.
17 de febrero, 2015. JL Morales, ITAM

Gradiente conjugado

El método de gradiente conjugado (GC) tiene propiedades matemáticas y computacionales que lo convierten en una herramienta muy versátil para resolver problemas en una amplia variedad de aplicaciones.

La principal motivación consiste en diseñar un método para resolver eficientemente el problema cuadrático

$$\underset{x}{\text{minimizar}} \qquad q(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x, \tag{1}$$

en donde A es una matriz simétrica positiva definida de $n \times n$. El problema anterior es equivalente a resolver el sistema de ecuaciones lineales $Ax = b$. Una de las principales virtudes del método de GC es que alivia los conocidos inconvenientes del método de máximo descenso. En aritmética finita, GC parte de una aproximación inicial y termina con la solución exacta en no más de n iteraciones; en este sentido se le considera como un método directo. En aritmética finita, debido a la acumulación de errores por redondeo, el método podría no terminar en n pasos y por lo tanto se le considera un método iterativo.

Los métodos iterativos constituyen una alternativa muy atractiva con respecto a los métodos directos. Específicamente, cuando se trata de resolver una sucesión finita de sistemas cercanamente relacionados

$$A_j x = b_j, \quad j = 1, \quad A_{j+1} \approx A_j, \quad j = 1, \ldots, N-1 \tag{2}$$

x_j^*, la solución del sistema $A_j x = b_j$, se puede utilizar como punto inicial para resolver el sistema $A_{j+1}x = b_{j+1}$. En estos casos la solución de cada sistema se alcanza en unas cuantas iteraciones.

Si cada sistema de la sucesión (2) se resolviera con el método de Cholesky se requerirían $\mathcal{O}(Nn^3)$ operaciones para resolver los N sistemas.

Antes de iniciar la construcción de GC necesitamos algunas definiciones.

1. Al vector $r(x) = b - Ax$ lo denotamos como el *residuo* en x. Notar que $\nabla q(x) = Ax - b = -r(x)$.
2. Los elementos de un conjunto $\mathcal{C} = \{d_0, d_1, \ldots, d_k\}$ de vectores en $\mathbb{R}^n$ son A-ortogonales si

$$d_i^T A d_j = 0, \quad i \neq j,$$

Consideremos al vector x_0 una aproximación inicial a la solución x^*. Entonces es inmediato observar que $r(x_0)$ es una dirección de descenso para el problema de optimización (1); por lo tanto podemos obtener el iterando

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0,$$

en donde $d_0 = r_0$; el escalar α_0 se puede obtener resolviendo el problema unidimensional

$$\underset{\alpha}{\text{minimizar}} \qquad q(x_0 + \alpha d_0),$$

es decir
$$\nabla q(x_0+\alpha_0 d_0)^T d_0 = -r_1^T d_0 = 0, \quad r_1^T r_0 = 0$$
y por lo tanto
$$\alpha_0 = \frac{-\nabla q(x_0)^T d_0}{d_0^T A d_0} = \frac{r_0^T d_0}{d_0^T A d_0}$$
El iterando x_2 se calcula con la dirección
$$d_1 = r_1 - \beta_1 d_0, \quad \beta_1 = \frac{r_1^T A d_0}{d_0^T A d_0}$$
obtenida a partir de r_1 y d_0 mediante A-ortogonalización de Gram-Schmidt.
$$x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1,$$
en donde α_1 se obtiene resolviendo
$$\underset{\alpha}{\text{minimizar}} \qquad q(x_1+\alpha d_1),$$
es decir
$$\nabla q(x_1+\alpha_1 d_1)^T d_1 = -r_2^T d_1 = 0$$
y por lo tanto
$$\alpha_1 = \frac{-\nabla q(x_1)^T d_1}{d_1^T A d_1} = \frac{r_1^T d_1}{d_1^T A d_1}$$
Vamos a probar que r_2 también es ortogonal a d_0; de la definición del residuo
$$r_2 = b - Ax_2 = b - A(x_1+\alpha_1 d_1) = r_1 - \alpha_1 A d_1$$
premultiplicando por d_0 tenemos
$$d_0^T r_2 = d_0^T r_1 - \alpha_1 d_0^T A d_1 = r_0^T r_1 - \alpha_1 d_0^T A d_1 = 0.$$
Por lo tanto r_2 es ortogonal a las direcciones anteriores. Nos queda por investigar el producto $r_2^T r_1$
$$r_2^T d_1 = 0 = r_2^T(r_1 - \beta_1 d_0) = r_2^T r_1 - r_2^T d_0$$
de donde $r_2^T r_1 = 0$.

En conclusión tenemos que el conjunto $\{r_0, r_1, r_2\}$ es ortogonal y por lo tanto podemos construir un vector A-ortogonal
$$d_2 = r_2 - \frac{r_2^T A d_0}{d_0^T A d_0} d_0 - \beta_2 d_1$$
Utilizando la expresión
$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0$$
es fácil probar que el producto $r_2^T A d_0$ se anula. Premultiplicando la expresión anterior por A tenemos
$$A(x_1 - x_0) = \alpha_0 A d_0 = r_0 - r_1 \Longrightarrow \alpha_0 r_2^T A d_0 = r_2^T r_0 - r_2^T r_1 = 0.$$
Por lo tanto
$$d_2 = r_2 - \beta_2 d_1, \quad \beta_2 = \frac{r_2^T A d_1}{d_1^T A d_1}.$$
En resumen, tenemos que los residuos r_0, r_1, r_2 forman un conjunto ortogonal, y que las direcciones d_0, d_1, d_2 forman un conjunto A-ortogonal. Un argumento inductivo evidente permite formular una versión preliminar del algoritmo de GC

Proyecto

1. Formular el paso inductivo en la construcción del método de GC

   Sea x_0 una aproximación inicial, $d_0 \leftarrow r_0, \quad k \leftarrow 0$
   Repetir mientras $r_k \neq 0$

   $$\alpha_k \leftarrow \frac{r_k^T d_k}{d_k^T A d_k}$$
   $$x_{k+1} \leftarrow x_k + \alpha_k d_k$$
   $$r_{k+1} \leftarrow r_k - \alpha_k A d_k$$
   $$\beta_{k+1} \leftarrow \frac{r_{k+1}^T A d_k}{d_k^T A d_k}$$
   $$d_{k+1} \leftarrow r_{k+1} - \beta_{k+1} d_k$$
   $$k \leftarrow k + 1$$

2. Probar los resultados que dan origen al algoritmo computacional de GC

   Sea x_0 una aproximación inicial, $d_0 \leftarrow r_0, \quad k \leftarrow 0$
   Repetir mientras $r_k \neq 0$

   $$\alpha_k \leftarrow \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$$
   $$x_{k+1} \leftarrow x_k + \alpha_k d_k$$
   $$r_{k+1} \leftarrow r_k - \alpha_k A d_k$$
   $$\beta_{k+1} \leftarrow \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$$
   $$d_{k+1} \leftarrow r_{k+1} + \beta_{k+1} d_k$$
   $$k \leftarrow k + 1$$

3. Escribir una versión computacional de GC que se detenga cuando ocurra una de las siguientes situaciones: a) $||r_k|| \leq TOL_1$, b) el número de iteraciones exceda un límite prestablecido; c) $d_k^T A d_k \leq TOL_2$.

4. Estudiar la prueba de convergencia cuadrática del método de Newton (Nocedal & Wright, página 44). Justificar los pasos omitidos.

5. Estudiar las propiedades del método de GC (Nocedal & Wright, Teoremas 5.1-5.5). Notar que el residuo está definido como $r(x) = Ax - b$. Justificar los pasos omitidos.

6. El método de GC tiene una propiedad muy útil en optimización. El problema (1) adopta la forma

$$\underset{p}{\text{minimizar}} \qquad \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x) p + \nabla f(x)^T p, \tag{3}$$

en donde se han omitido los índices por claridad. Cada paso del método de GC requiere de un producto matriz-vector $\nabla^2 f(x)d_k$. Investiga cómo aproximar el producto anterior mediante diferencias del gradiente. Al método resultante se le conoce como método de Newton libre de Hessiana.

7. NOTA:

   En la clase del 17 de febrero escribí en el pizarrón la versión de GC para el método de Newton. Hay una inconsistencia en la notación; la versión correcta es la siguiente:

   El sistema por resolver en cada iteración del método de Newton es

   $$\nabla^2 f(x)p^N = -\nabla f(x),$$

   el método de GC aproxima a p^N por medio de la sucesión

   $$\{p_0, p_1 \ldots, p_{n-1}\}.$$

   Observar que los vectores p_k tienen el papel de los vectores x_k en los dos algoritmos anteriores, es decir las aproximaciones p_k se actualizan como sigue

   $$p_{k+1} = p_k + \alpha_k d_k.$$

   El método inicia con $p_0 = 0$, de donde es inmediato concluir que $r_0 = -\nabla f(x)$; por lo tanto, la primera dirección para GC es la dirección opuesta al gradiente

   $$d_0 = -\nabla f(x).$$

   Si el producto $d_0^T \nabla^2 f(x) d_0$ resultara negativo o cero, el método terminaría con

   $$p = -\nabla f(x).$$

   En iteraciones subsecuentes GC terminaría con la aproximación p_k si $||r_k|| < TOL$, o bien

   $$d_{k+1}^T \nabla^2 f(x) d_{k+1} \leq 0.$$