Método de descenso más rápido y del gradiente conjugado para la resolución de sistemas lineales

Elementos de Cálculo Numérico

Primer Cuatrimestre de 2007

Dado el sistema $Ax = b$ con A matriz simétrica y definida positiva, sabemos que (ver Kincaid, *Análisis Numérico*, pag. 210 en adelante) resolver este sistema es equivalente a minimizar la forma cuadrática

$$q(x) = \langle x, Ax \rangle - 2 \langle x, b \rangle$$

El método del descenso más rápido consiste en dar una sucesión de valores x_k tal que $q(x_{k+1}) \leq q(x_k)$ y que la igualdad sólo se produzca en algún caso especial. La idea genérica es obtener x_{k+1} a partir de x_k y de otro vector v_k que puede ya estar dado o que se lo vaya construyendo durante la evolución del método.

Lo que se busca es minimizar la forma cuadrática $q(x)$ si nos movemos desde x en una dirección v, es decir que se minimiza la función de una variable $q(x + tv)$ en la variable t, tenemos que el mínimo sobre este rayo se produce si $\hat{t} = \frac{\langle v, b-Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle}$ y por lo tanto

$$q\left(x + \hat{t}v\right) = q(x) - \frac{\langle v, b - Ax \rangle^2}{\langle v, Av \rangle}$$

A partir de esto, se genera la sucesión

$$x_{k+1} = x_k + t_k v_k$$

donde $t_k = \frac{\langle v_k, b-Ax_k \rangle}{\langle v_k, Av_k \rangle}$ y la sucesión v_k es una conveniente (esta elección es la que da origen a los distintos métodos).

Descenso más rápido El método del descenso más rápido se define tomando $v_k = -\nabla q(x_k)$ (o un múltiplo positivo de él). La practicidad del método reside en que el residuo $r_k = b - Ax_k$ apunta en la dirección de $-\nabla q(x_k)$ (comprobarlo), por lo tanto tomamos $v_k = \frac{r_k}{\|r_k\|}$ para generar la sucesión aproximante x_k.

Dirección conjugada La idea es considerar una base $\{u_1, \ldots, u_n\}$ ortogonal según el producto interno $\langle u, v \rangle = \langle u, Av \rangle$, entonces vale que la secuencia dada por

$$x_k = x_{k-1} + \frac{\langle b - Ax_{k-1}, u_k \rangle}{\langle u_k, Au_k \rangle} u_k \qquad 1 \leq k \leq n$$

arrancando desde un punto x_0 cualquiera. Una gran ventaja de este método es que, en teoría, en n pasos alcanza la solución del sistema, pero en la práctica es muy sensible a los errores.

Gradiente conjugado Se basa en la idea anterior pero no da a priori una base $\{u_1, \ldots, u_n\}$ ortogonal según A, sino que va construyéndola con la propiedad adicional que la sucesión de residuos $r_k = b - Ax_k$ forman un sistema ortogonal en el sentido usual

$$\langle r_i, r_j \rangle = 0 \quad \text{si } i \neq j$$

El algoritmo es el siguiente: se arranca de un x_0 cualquiera, se define $r_0 = b - Ax_0$ y $v_0 = r_0$. En el paso k-ésimo ya tenemos definido x_k, r_k y v_k, para pasar al $k+1$-ésimo se define, siguiendo el orden,

$$\begin{aligned} t_k &= \frac{\langle r_k, r_k \rangle}{\langle r_k, Av_k \rangle} \\ x_{k+1} &= x_k + t_k v_k \\ r_{k+1} &= r_k - t_k A v_k \\ s_k &= \frac{\langle r_{k+1}, r_{k+1} \rangle}{\langle r_k, r_k \rangle} \\ v_{k+1} &= r_{k+1} + s_k v_k \end{aligned}$$

y se para la iteración cuando r_k es sufiicientemente pequeño en la norma usual.

Ejemplos Resuelva cada uno de los siguientes sistemas por los distintos métodos que se mencionaron, y también por los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel. Compara la velocidad de convergencia de todos ellos.

1. $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 \\ -2 & -10 & 0 \\ -1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -12 \\ 2 \end{pmatrix}$, comenzando en $v = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

2. $Ax = b$ donde A es la matriz de Hilbert de $n \times n$ dada por $a_{ij} = (i+j+1)^{-1}$ y $b_i = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}$ (para $1 \leq i \leq n$)