Álgebra Lineal Computacional

Segundo Cuatrimestre 2022

Trabajo Práctico N° 2.

En este trabajo vamos a implementar el método del gradiente conjugado para resolver sistemas de ecuaciones lineales y comparar su convergencia con la del método del descenso.

Método del descenso

Para resolver un sistema de ecuaciones lineles $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, con $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ definida positiva, aplicamos el método del descenso a la función

$$J(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b}.$$

Ejercicio 1.

Implementar una función que reciba una matriz $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, un vector $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$, un vector $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ y un entero $N > 0$ y aplique N pasos del método del descenso:

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k-1)} + \lambda^{(k)}\boldsymbol{r}^{(k)}, \quad \text{con} \quad \boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k-1)} \quad \text{y} \quad \lambda^{(k)} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{r}^{(k)}}{(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}}$$

El programa debe devolver la aproximación obtenida $\boldsymbol{x}^{(N)}$ y una lista con los errores $\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}\|_2$ obtenidos en cada paso.

Ejercicio 2.

Aplicar el método en el siguiente ejemplo:

- $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{10\times 10}$, $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M} + \boldsymbol{I}$, donde $\boldsymbol{M} \in \mathbb{R}^{10\times 10}$ es una matriz con coordenadas aleatorias en $[0, 1)$.
- $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{10}$, un vector con coordenadas aleatorias en $[0, 1)$.
- $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^{10}$, un vector con coordenadas aleatorias en $[0, 1)$.
- $N = 20$

Graficar los errores en función del número de pasos.

Método del gradiente conjugado

Por el Lema 6.1 del Apunte de la materia, si en el método del descenso las direcciones $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots$ que tomamos en cada paso son $\boldsymbol{A}$-ortogonales (es decir, $\boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = 0$ para $i \neq j$), el método converge luego de n pasos.

Dado un conjunto $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ de vectores l.i., la siguiente modificación del método de Gram-Schmidt nos permite obtener direcciones $\boldsymbol{A}$-ortogonales:

$$\mathbf{d}_1 = \boldsymbol{v}_1, \qquad \mathbf{d}_{k+1} = \boldsymbol{v}_{k+1} - \sum_{i=1}^{k} \frac{\boldsymbol{v}_{k+1}^T \boldsymbol{A}\mathbf{d}_i}{\mathbf{d}_i^T \boldsymbol{A}\mathbf{d}_i} \mathbf{d}_i.$$

Para el método del gradiente conjugado, implementamos primero una función que realice un paso de este proceso.

Ejercicio 3.

(Direcciones $\boldsymbol{A}$-ortogonales) Implementar una función que reciba una lista `d` de vectores y un vector $\boldsymbol{v}$ y devuelva un vector $\boldsymbol{u}$ que sea el resultado de aplicar un paso de la modificación del método Gram-Schmidt vista:

`Gram-Schmidt(`d, v, A`)`:

1) $\boldsymbol{u} =$ copia de $\boldsymbol{v}$
2) Para $i = 1, ...,$ `len(d)`:

   $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u} - \dfrac{\boldsymbol{v}^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{d}_i}{\boldsymbol{d}_i^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{d}_i} \boldsymbol{d}_i$

Dados un punto $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$ y una dirección $\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n$, la función $J(\boldsymbol{x})$ alcanza su mínimo en la recta $\boldsymbol{z} + \lambda \boldsymbol{v}$ para

$$\lambda = \frac{\boldsymbol{v}^T \boldsymbol{r}}{\boldsymbol{v}^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}},$$

donde $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{z} - \boldsymbol{b}$.

En base a estas propiedades, obtenemos el método del gradiente conjugado, que converge a la solución del sistema en n pasos:

`gradiente-conjugado`(A, x_0, b, n):

1) $\boldsymbol{x} =$ copia de $\boldsymbol{x}_0$
2) $d =$ lista vacía
3) Para $i = 1, \ldots, n$:
   (a) $\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$
   (b) $\tilde{\boldsymbol{r}}_i =$`Gram-Schmidt`$(d, \boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{A})$
   (c) $\lambda_i = \dfrac{\tilde{\boldsymbol{r}}_i^T \boldsymbol{r}_i}{\tilde{\boldsymbol{r}}_i^T \boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{r}}_i}$
   (d) $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + \lambda_i \tilde{\boldsymbol{r}}_i$
   (e) Agregar $\tilde{\boldsymbol{r}}_i$ a la lista d
4) Devolver $\boldsymbol{x}$

(Observar que en el paso 3)c, el segundo factor en el numerador es $\boldsymbol{r}_i$ y no $\tilde{\boldsymbol{r}}_i$).

En los siguientes ejercicios se pide implementar este método.

Ejercicio 4.

Implementar una función que reciba una matriz $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, un vector $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$, un vector $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ y aplique n pasos del método del gradiente conjugado.

El programa debe devolver la aproximación obtenida $\boldsymbol{x}^{(n)}$ y una lista con los errores $\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}\|_2$ obtenidos en cada paso.

Ejercicio 5.

Aplicar el método para la matriz $\boldsymbol{A}$ y los vectores $\boldsymbol{b}$ y $\boldsymbol{x}_0$ definidos en el ejercicio 2.

Graficar los erorres en función del número de pasos.

En base a los resultados obtenidos, ¿cuál de los dos métodos considera más apropiado para resolver un sistema de ecuaciones lineales?
