ACUERDO 339 / 01
Marzo 27 del 2001.

C. CARLOS ERNESTO MARTÍNEZ RODRÍGUEZ
Presente.

*En relación a su atenta solicitud relativa a la opción de titulación por Tesis Individual con el Título "**MÉTODOS DE GRADIENTES CONJUGADOS**", me permito informarle que en sesión ordinaria del H. Consejo Académico del 27 de Marzo del año en curso, fue aceptado el tema y el **M. en C. José Guerrero Grajeda**, tuvo a bien ser el Director de la misma.*

El contenido aceptado por el H. Consejo Académico es el siguiente:

1.- Introducción.

- *1.1.-Motivación.*
- *1.2.-Objetivos.*

2.- Marco teórico básico.

- *2.1. El problemas general de optimización sin restricciones.*
- *2.2. Conceptos fundamentales y ejemplos.*

3. El método del descenso más rápido.

- *3.1. Motivación.*
- *3.2. El método del descenso más rápido.*
- *3.3. Aplicaciones del método del descenso más rápido al cálculo del mínimo de una función cuadrática.*
- *3.4. Resultados computacionales y análisis de convergencia.*

4. Los métodos de direcciones conjugadas-

- *4.1. Motivación.*
- *4.2. Los métodos de direcciones conjugadas.*
- *4.3. Análisis de convergencia.*

5. El método de gradientes conjugados.

5.1 Construcción del método.
5.2 Aplicaciones y resultados computacionales.

6. Conclusiones y comentarios finales.

7. Bibliografía.

- *Gill, P.E. Murray, W. And Wright, M.H.,* ***Practical Optimization****, Academic Press, 1981, USA.*

- *Hanselman, Duane and Littlefield, Bruce,* ***Numerical Linear Algebra and Optimization****, Vol. 1, Adisson Wesley, 1991, USA.*

- *Hanselman, Duane and Littlefield, Bruce,* ***The Student Edition of Matlab****, version 5, User´s Guide, Prentice Hall, 1997, USA.*

- *Kelley, C.T.,* ***Iterative Methods for Linear and NonLinear Equations****, SIAM, 1995, USA.*

- *Luenberg, David G.,* ***Introduction to Linear and NonLinear Programming****, Adisson-Wesley, 1973, USA.*

- *Shewchuck, Jonathan R.,* ***An Introduction to the Conjugated Gradient Method Whitouth the Agonizing Pain****, Carnegie Mellon University, 1994, USA.*

- *Jalote, Pankaj,* ***An Integrated Approach to Saftware Engineering****, Springer-Verlag, 1991, USA.*

- *Sommerville, Jan* ***Software Engineering****, Adisson Wesley, 1996, USA.*

- *Kelley, C.T.,* ***Iterative Methods for Optimization, Series: Frontiers in Apllied Mathematics****, 18, SIAM, 1999, USA.*

- *Strang Gilbert,* ***Algebra Lineal y sus Aplicaciones****, Addison Wesley Iberoamericanam, Segunda edición, 1990.*

Centro Universitario. Santiago de Querétaro, Qro. C.P. 76010 Tels. 01 (4) 216 35 99 y 215 16 45 Fax 215 08 36

- *Shoichiro Nakurama, **Análisis Numérico y Visualización Gráfica con Matlab,** Prentice Hall, Primera edición.*

También hago de su conocimiento las disposiciones de nuestra Facultad, en el sentido de que antes de su Examen Profesional deberá cumplir con los requisitos de nuestra Legislación y deberá reimprimir el presente oficio en todos los ejemplares de su Tesis.

Sin otro particular, quedo de usted.

Atentamente
"EL INGENIO PARA CREAR NO PARA DESTRUIR"

Ing. Jorge Martínez Carrillo
Director de la Facultad de Ingeniería

C.c.p.- Archivo
**JMC/GRSG/sar*

Centro Universitario, Santiago de Querétaro, Qro. C.P. 76010 Tels. 01 (4) 216 35 99 y 215 16 45 Fax 215 08 98

C.U., 30 de marzo del 2001.

Ing. Jorge Martínez Carrillo
Director de la Facultad de
Ingeniería de la U.A.Q.
P R E S E N T E.

*Me permito comunicar a usted que una vez revisada la tesis titulada **"EL MÉTODO DE GRANDIENTES CONJUGADOS"**, del pasante de La Licenciatura en Matemáticas Aplicadas,Carlos Ernesto Martínez Rodríguez de acuerdo al artículo 20 inciso h) del Reglamento de Titulación vigente.*

*Emito mi **Voto Aprobatorio.***

Atentamente.
"El Ingenio para Crear no para Destruir"

M en C. José Grajeda Guerrero.
Director de Tesis

c.c. Archivo
**sar*

C.U., 23 de mayo del 2001.

H. CONSEJO ACADÉMICO
DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA
P R E S E N T E.

Me permito comunicar a este Órgano Colegiado que una vez revisada la tesis titulada ***"EL MÉTODO DE GRADIENTES CONJUGADOS"****, del pasante de La Licenciatura en Matemáticas Aplicadas Carlos Ernesto Martínez Rodríguez, emito mi* ***Voto Aprobatorio.***

Atentamente.
"El Ingenio para Crear no para Destruir"

Dr Herminio Blancarte Suárez.
Sinodal

c.c. Archivo
**sar*

C.U., 23 de mayo del 2001.

H. CONSEJO ACADÉMICO
DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA
P R E S E N T E.

*Me permito comunicar a este Órgano Colegiado que una vez revisada la tesis titulada **"EL MÉTODO DE GRADIENTES CONJUGADOS"**, del pasante de La Licenciatura en Matemáticas Aplicadas Carlos Ernesto Martínez Rodríguez, emito mi **Voto Aprobatorio.***

Atentamente.
"El Ingenio para Crear no para Destruir"

M en C. Juan Diego Martínez Najera.
Sinodal

c.c. Archivo
**sar*

C.U., 23 de mayo del 2001.

H. CONSEJO ACADÉMICO
DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA
P R E S E N T E.

*Me permito comunicar a este Órgano Colegiado que una vez revisada la tesis titulada **"EL MÉTODO DE GRADIENTES CONJUGADOS"**, del pasante de La Licenciatura en Matemáticas Aplicadas Carlos Ernesto Martínez Rodríguez, emito mi **Voto Aprobatorio.***

Atentamente.
"El Ingenio para Crear no para Destruir"

M en C. Enrique Crespo Baltar.
Sinodal

c.c. Archivo
**sar*

El Método de Gradientes Conjugados

Carlos Ernesto Martínez Rodríguez

Director de Tésis:

M. en C. José Guerrero Grajeda

Agradecimientos:

A mis padres y familia, muy en especial a Yesica,
a todos mis profesores, a Arturo, Carmen, Roberto y Herminio.
Y finalmente a todos los que siempre han estado a mi
alrededor para apoyarme y que de alguna manera han
contribuido a mi formación tanto profesional como personal.

Índice General

Capítulo 1

Introducción

1.1 Motivación

Un problema importante en el ámbito de la optimización es la siguiente:
Dada una función $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ donde

$$f(x) = x^t Ax + b^t x + c \tag{1.1}$$

$x \in \mathbb{R}^n$, A matriz simétrica, de orden n, positiva definida, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$, se trata de resolver

$$\min_x f(x)$$

por medio de un algoritmo iterativo cuya convergencia se de en un número finito de pasos.

El método de gradientes conjugados tiene como fundamento y antecedente al método del descenso más rápido, cuya aplicación al problema puede resultar sumamente ineficiente debido a su pobre velocidad de convergencia.

Con base en lo anterior, se desarrolla el método de gradientes conjugados cuya convergencia se da en a lo más n pasos. Actualmente este método tiene una gran cantidad de aplicaciones, como por ejemplo en problemas de estimación de parámetros y en solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales. Más adelante se darán los detalles sobre esto.

1.2 Objetivos

En general, la presentación tiene como propósitos fundamentales:

i) Servir como material introductorio, para un curso sobre el tema, razón por la cual se cuidan aspectos didácticos tales como la motivación y la ilustración de ideas usando apoyos gráficos.

ii) Mostrar la importancia del método de gradientes conjugados en la resolución de problemas relevantes para quienes se interesan por las aplicaciones de las matemáticas.

Capítulo 2

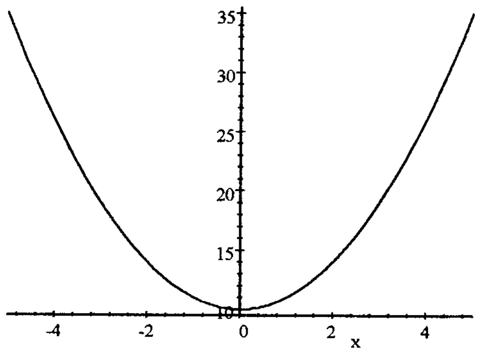
Marco Teórico Básico

2.1 El Problema General de Optimización sin Restricciones

La formulación general del problema de optimización sin restricciones puede plantearse de la siguiente manera:

Dada una función $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, hay que resolver $\min_x f(x)$, $x \in D \subset \mathbb{R}^n$.

Geométricamente la idea de un mínimo de f es la de un punto x^*, a partir del cual todas las curvas de f crecen en todas las direcciones al menos en una cierta vecindad de x^*. Para el caso de dos variables esto se puede ver como



Grafica de $f(x_1) = x_1^2 + 10$

2.2 Conceptos Fundamentales y Ejemplos

Definición 2.2.1 *Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, se dice que f tiene un Mínimo local en $\mathbf{x}_0$, si existe una vecindad de radio ϵ con centro en $\mathbf{x}_0$, tal que*

$$f(\mathbf{x}_0) \leq f(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}), \qquad \forall \mathbf{x}_0 + \mathbf{h} \in V(\mathbf{x}_0, \epsilon), \quad \mathbf{h} \in \mathbb{R}^n.$$

La definición es análoga para un máximo. Una forma de encontrar los mínimos de f es por medio de su derivada, es decir, por medio de su *gradiente*.

Definición 2.2.2 *Si $f : U \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es diferenciable, el* gradiente *de f en $\mathbf{x}_0 \in U$ es el vector en $\mathbb{R}^n$ dado por* $\operatorname{grad} f(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f}{\partial x_3} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$ *este vector también se denota por $\nabla f(\mathbf{x}_0)$, donde* $\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$.

Definición 2.2.3 *$\mathbf{x}_0$ es un punto crítico de f si $\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0$.*

Un resultado importante en nuestro contexto es el siguiente

Teorema 2.2.4 *Sea $U \subset \mathbb{R}^n$ abierto, $f : U \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciable y $\mathbf{x}_0 \in U$ un Mínimo Local, entonces $\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0$.*

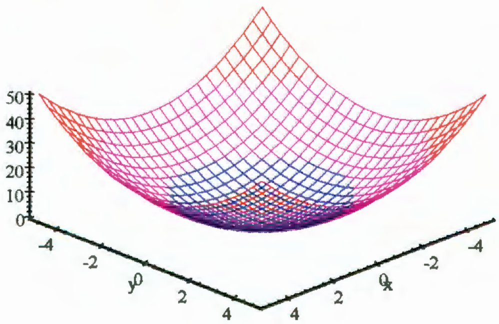
La demostración puede verse en [11].

Ejemplo 2.2.5 *Hallar el mínimo de $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$.*

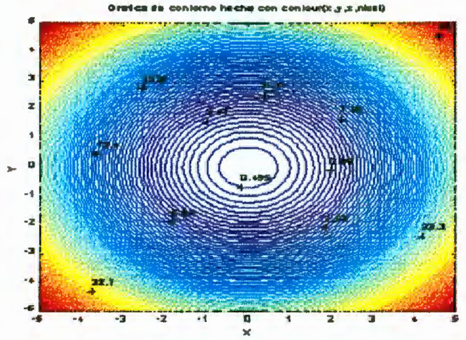
Calculemos el gradiente de f

$$\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 2x_2)$$

por lo tanto el único punto crítico es el $(0,0)$, además como $f(x_1, x_2) \geq 0$, este punto es el único mínimo local de f.



Grafica de $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$



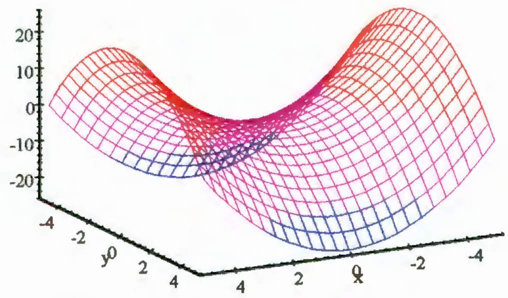
Curvas de Nivel de $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$

Ejemplo 2.2.6 *Hallar un mínimo de $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x, y) = x_1^2 - x_2^2$.*

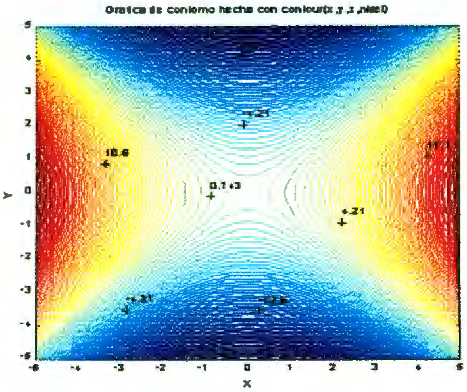
Calculemos el gradiente de f

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ -2x_2 \end{pmatrix}$$

por lo tanto el único punto crítico es $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, ahora si examinamos directamente los valores de f para puntos cerca del origen, se tiene que además como $f(x_1, 0) \geq f(0, 0)$ y $f(0, x_2) \leq f(0, 0)$ este punto es un punto crítico, pero no es mínimo. Gráficamente se tiene



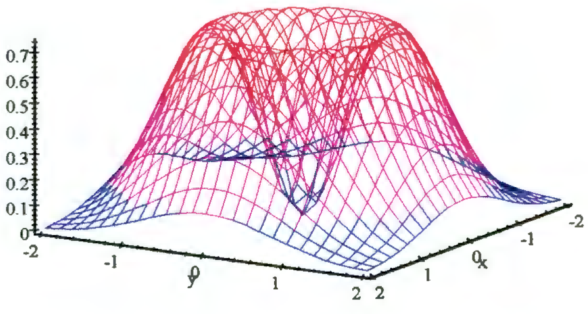
Grafica de $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2$



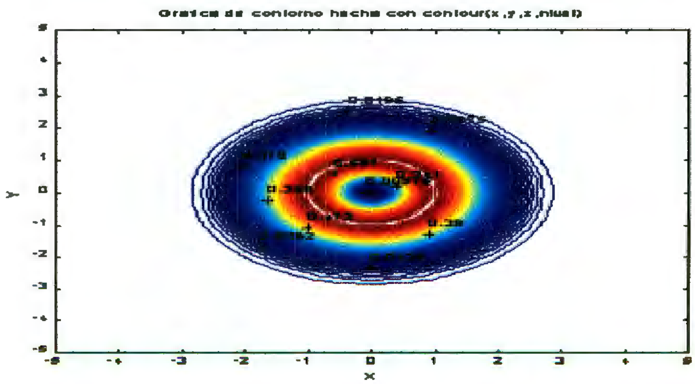
Curvas de nivel de $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2$

Consideremos un último ejemplo:

Ejemplo 2.2.7 *Sea* $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x_1, x_2) = 2(x_1^2 + x_2^2)\exp(-x_1^2 - x_2^2)$



El volcan $f(x_1, x_2) = 2(x_1^2 + x_2^2)\exp(-x_1^2 - x_2^2)$



Curvas de nivel de $f(x_1, x_2) = 2(x_1^2 + x_2^2)\exp(-x_1^2 - x_2^2)$

De la gráfica se observa que esta función tiene un mínimo en $\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. *Veamos ahora el análisis:*

Tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_1} &= 4x_1 \exp\left(-x_1^2 - x_2^2\right) + 2\left(x_1^2 + x_2^2\right)(-2x_1)\exp\left(-x_1^2 - x_2^2\right) \\ &= -4x_1 e^{-x_1^2 - x_2^2}\left(-1 + x_1^2 + x_2^2\right) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} &= 4x_2 \exp\left(-x_1^2 - x_2^2\right) - 4x_2\left(x_1^2 + x_2^2\right)\exp\left(-x_1^2 - x_2^2\right) \\ &= -4x_2 e^{-x_1^2 - x_2^2}\left(-1 + x_1^2 + x_2^2\right) \end{aligned}$$

las cuales se hacen cero simultaneamente cuando $x_1 = x_2 = 0$ *o cuando* $x_1^2 + x_2^2 = 1$.

En este caso se tiene de más de un punto crítico, de donde, parece que es necesario algo más para tener condiciones necesarias y suficientes para un mínimo. Veamos:

Definición 2.2.8 *Sea* $f : U \subset \Re^n \to \Re$, *supongamos que* f *tiene derivadas parciales de segundo orden* $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_0)$, *para* $i, j = 1, ..., n$, *en un punto* $\mathbf{x}_0 \in U$. *El* Hessiano *de* f *en* $\mathbf{x}_0$ *es la función cuadrática definida por*

$$Hf(\mathbf{x}_0)(\mathbf{h}) = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_0) h_i h_j .$$

En este trabajo $\nabla^2 f(\mathbf{x}_0) \equiv Hf(\mathbf{x}_0)$ denotará la matriz cuadrada de nxn, de las segundas derivadas parciales de f.

Definición 2.2.9 *Una matriz cuadrada* A *de* nxn, *se dice que es* Positiva Definida *(lo que se simboliza* $A > 0$*) si* $x^t A x > 0$ *para todo* $x \neq 0 \in \Re^n$.

El siguiente criterio es de vital importancia para la optimización sin restricciones.

Teorema 2.2.10 *Sea* $f : U \subset \Re^n \to \Re$, *supongamos que* f *es de clase* C^2, $\mathbf{x}_0 \in U$ *es un punto crítico y además supongamos que el hessiano de* f *en* $\mathbf{x}_0$ *es positivo definido, entonces* $\mathbf{x}_0$ *es un mínimo local de* f.

Como se puede ver en el criterio anterior, el hecho de que el hessiano sea una matriz positiva definida, es de vital importancia para garantizar la existencia de un mínimo, por lo tanto es importante caracterizar de la mejor manera a dichas matrices.

Teorema 2.2.11 *Sea* A *de orden* n. *Los siguientes criterios son equivalentes:*

(a) $x^t A x > 0$ *para todos los vectores* x *distintos de cero.*

(b) *Todos los valores propios de A satisfacen $\lambda > 0$.*

(c) *A puede escribirse como $A = LL^t$, L es un matriz triangular inferior no singular.*

(d) *Todas las submatrices A_k tienen determinantes positivos.*

Veamos una aplicación.

Ejemplo 2.2.12 *Investigar y en dado caso calcular el mínimo de $f(\mathbf{x}) = x_1^2 - x_1^2x_2 + 2x_2^2$.*

Se tiene que

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2x_1x_2 \\ -x_1^2 + 4x_2 \end{pmatrix}$$

y además

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 2 - 2x_2 & -2x_1 \\ -2x_1 & 4 \end{pmatrix},$$

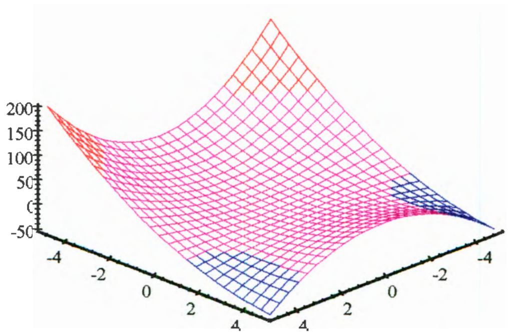
de donde, si hacemos $\nabla f(\mathbf{x}) = 0$,

$$\begin{pmatrix} 2x_1 - 2x_1x_2 \\ -x_1^2 + 4x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

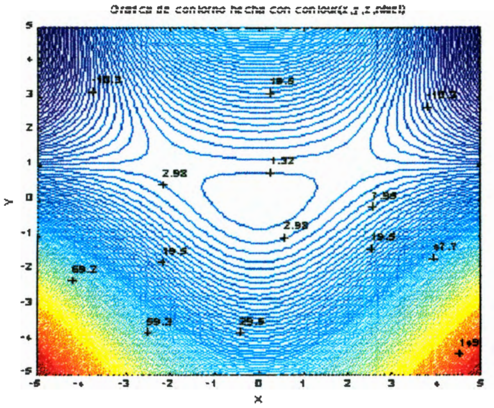
Por lo tanto una posible solución es $x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. Si sustituimos x_1 en $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ se tiene que

$$H(x_1) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$$

y como $H(x_1) > 0$ para x_1, $f(\mathbf{x})$ tiene un mínimo local en $x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. La gráfica de f la damos a continuación:



Grafica de $f(\mathbf{x}) = x_1^2 - x_1^2x_2 + 2x_2^2$



Curvas de nivel de $f(\mathbf{x}) = x_1^2 - x_1^2 x_2 + 2x_2^2$.

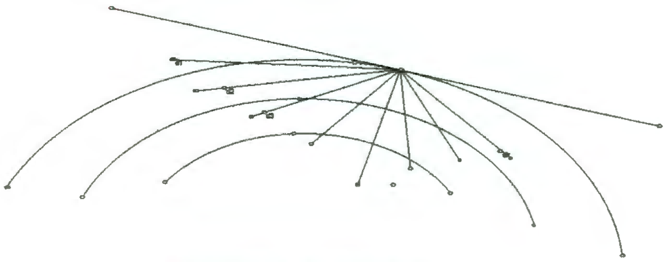
Capítulo 3

El método del descenso más rápido

3.1 Motivación

En la sección anterior, se vio que una forma de encontrar un mínimo de f es aplicando los resultados que dan las condiciones de existencia y unicidad; sin embargo esta alternativa en la práctica no es muy usual. Para ello se han diseñado métodos que en general generan una sucesión de puntos partiendo de una aproximación inicial x_0, y se espera que la función evaluada en ellos vaya decreciendo gradualmente usando una dirección que llamaremos de *descenso.*

Supongamos que se tiene una aproximación inicial x_0; la pregunta es ¿cómo encontrar x_1?. Observemos la siguiente figura:



Direcciones de descenso

Si consideramos la recta tangente a la curva de nivel de f en x_0, se ve claramente que las d_k señaladas son direcciones de descenso, en el sentido, de que para alguna $\alpha > 0$ se debe de cumplir que $f(x_k + \alpha d_k) < f(x_k)$.

3.2 El método del descenso más rápido

Definición 3.2.1 *d_k es una dirección de descenso si el ángulo formado por d_k y $\nabla f(x_k)$ es mayor de $90°$ o bien si $d_k^t \nabla f(x_k) < 0$.*

Ahora, dado que sabemos que la dirección de máximo incremento local es el gradiente, si consideramos a $-\nabla f(x_k)$ como nuestra dirección de descenso, es decir, si hacemos

$$d_k = -\nabla f(x_k) \tag{3.1}$$

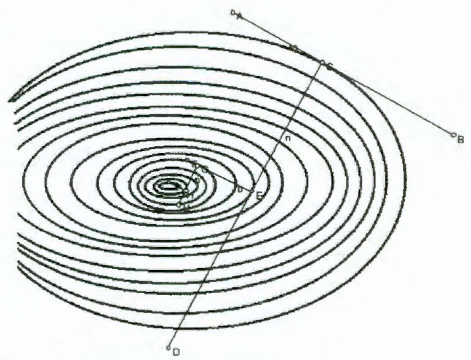
tendremos la llamada dirección de máximo descenso; esta elección da lugar al llamado *Método del gradiente* o *Método del descenso más rápido*, donde la forma general de la iteración, queda de la siguiente manera

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k), \text{ para } \alpha_k > 0 \tag{3.2}$$

donde α_k se elige de tal manera que dicho valor nos conduzca al valor mínimo de f, a lo largo de la dirección $-\nabla f(x_k)$, esto es α_k es la solución del problema

$$\min_{\alpha > 0} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)) \tag{3.3}$$

es decir, el valor de α que nos lleva al mínimo de f a lo largo de la dirección de descenso $-\nabla f(x_k)$:



Direcciones de descenso.

Como se observa en la figura anterior, el mínimo de la función corresponde precisamente al punto donde la recta $\mathcal{L}_k : x_k - \alpha \nabla f(x_k)$ es tangente a una curva de nivel de la función f. Es bueno darse cuenta de que dos trayectorias consecutivas dadas por este método, son ortogonales entre sí, es decir,

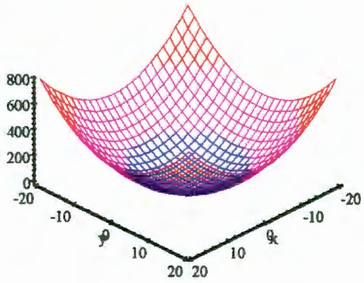
$$\nabla f(x_{k+1})^t \nabla f(x_k) = 0 \qquad \forall k. \tag{3.4}$$

3.3 Aplicaciones del método del descenso más rápido al cálculo del mínimo de una función cuadrática

Ahora la pregunta es ¿bueno, y que tan eficiente es nuestro método?. La respuesta es que si localmente es el de mayor descenso, esto no implica necesariamente que sea el mejor de todos en terminos globales. Un análisis de convergencia restringido al caso

$$f(x) = \frac{1}{2}x^tAx - b^tx + c \tag{3.5}$$

con x, $b \in R^n$, A_{nxn} simétrica y positiva definida se da más adelante. Geométricamente (3.5) es equivalente a:



Ahora bien, si calculamos su gradiente, se tiene que

$$\nabla f(x) = Ax - b \tag{3.6}$$

de donde

$$\nabla f(x) = 0 \text{ si y sólo si } Ax = b \tag{3.7}$$

esto es, $f(x)$ tendrá un punto crítico en x^*, solución de (3.6) y además será mínimo único si $H(x^*) = A > 0$, es decir, si A es positiva definida, cosa que ya sabemos por hipótesis. De esto resulta que la iteración del método del descenso más rápido para este caso será:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k(b - Ax) \tag{3.8}$$

o bien, si hacemos

$$r_k = b - Ax_k \tag{3.9}$$

tendremos

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k r_k. \tag{3.10}$$

A r_k se le conoce como el residual en x_k. Determinemos ahora el valor de α_k que minimiza f a lo largo de r_k. Ya dijimos anteriormente que nuestras direcciones de descenso deben de satisfacer:

$$r_{k+1}^t r_k = 0, \quad \forall x \tag{3.11}$$

entonces

$$\begin{aligned}
(b - Ax_{k+1})^t r_k &= 0 \\
(b - A(x_k + \alpha_k r_k))^t r_k &= 0 \\
(b - Ax_k - A(\alpha_k r_k))^t r_k &= 0 \\
(b - Ax_k - \alpha_k A r_k)^t r_k &= 0 \\
(b - Ax_k)^t r_k - (\alpha_k A r_k)^t r_k &= 0
\end{aligned}$$

de donde:

$$\begin{aligned}
(b - Ax_k)^t r_k &= \alpha_k (r_k^t A) r_k \\
r_k^t r_k &= \alpha_k (r_k^t A r_k)
\end{aligned}$$

por lo tanto:

$$\alpha_k = \frac{r_k^t r_k}{(r_k^t A r_k)}. \tag{3.12}$$

Básicamente el *Método de descenso más rápido* para nuestra cuadrática se centra en el siguiente algoritmo

Dadas A, b y x_0 para $k = 0, 1, 2, ...$

$$\begin{array}{lrcl}
(1) & r_k &=& b - Ax_k \\
(2) & \alpha_k &=& \dfrac{r_k^t r_k}{(r_k^t A r_k)} \\
(3) & x_{k+1} &=& x_k + \alpha_k r_k.
\end{array}$$

Hay que observar que este algoritmo requiere de la realización del producto de matriz-vector dos veces por cada iteración, cosa que se puede mejorar.

3.4 Resultados computacionales y análisis de convergencia

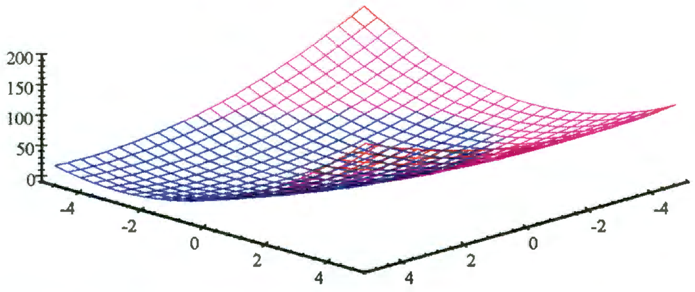
En [6] se da una versión algorítmica de este método, del cual damos en seguida una implementación en Matlab.

```
function y = minimiza(A,b,xo,epsilon,maxiter)
    i = 0;
    r = b-A*xo;
```

```
delta = r'*r;
deltao = delta;
while (i < maxiter) & (delta >(epsilon)^2 * deltao),
    q = A*r;
    alfa = (delta/(r'*q));
    xo = xo + alfa*r;
    temp=MOD(i,50);
    if MOD(i,50) == 0
        %input('si es divisible por 50');
        r = b - A*xo;
        display(xo');
    else
    % input('no es divisible por 50');
    r = r- alfa*q;
    display(xo');
    end;
delta = r'*r;
i=i+1;
if i >= maxiter
    input('se excedio el número máximo de iteraciones.')
end
if (delta <= (epsilon)^2 * deltao)
    input('el error es suficientemente pequeño.')
    input('el numero máximo de iteraciones fue : ')
    display(i)
end
end
error=delta;
input('la solución es :')
display(xo')
input('el error es de ')
display(error)
```

Veamos ahora una aplicación al problema min $f(\mathbf{x})$,

Ejemplo 3.4.1 $f(x_1,x_2) = \frac{3}{2}x_1^2 + 2x_1x_2 + 3x_2^2 - 2x_1 + 8x_2 + 4.$



Grafica de $f(x_1,x_2) = \frac{3}{2}x_1^2 + 2x_1x_2 + 3x_2^2 - 2x_1 + 8x_2 + 4$

Si calculamos el gradiente de f y lo igualamos a cero se tiene el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} 3x + 2y &= 2 \\ 2x + 6y &= -8 \end{aligned}$$

La solución del sistema es:
$x_1 = 2$ y $x_2 = -2$;
Ahora resolvamoslo con nuestro programa a partir de $x_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ -5 \end{pmatrix}$
epsilon $= 2.2204e - 016$
maxiter $= 32$
» minimiza(A,b,x0,epsilon,maxiter)
$x_1 = 2.8696, -2.3913$
$x_2 = 2.0000, -2.1014$
$x_3 = 2.0294, -2.0132$
$x_4 = 2.0000, -2.0034$
$x_5 = 2.0010, -2.0004$
$x_6 = 2.0000, -2.0001$
$x_7 = 2.0000, -2.0000$
el error es suficientemente pequeño.
el numero máximo de iteraciones fue : 21
la solución es : $2.0000, -2.0000$
el error es de : $1.4169e - 029$

La desventaja de este método es que la sucesión generada puede converger lentamente. Esto puede verse haciendo un análisis de convergencia. Para comenzar, definamos el error k-ésimo de la siguiente manera:

$$e_k = x_k - x^* \tag{3.13}$$

que como se observa, es un indicador de que tan buena es nuestra aproximación x_k con respecto a x^*.

Además supongamos que e_k es un eigenvector de A, con valor propio λ_k, sabemos que

$$\begin{aligned} r_k &= b - Ax_k \\ &= Ax^* - Ax_k \\ &= A(x^* - x_k) \\ &= -Ae_k \\ &= -\lambda_k e_k \end{aligned}$$

por lo tanto

$$r_k = -\lambda_k e_k \tag{3.14}$$

es decir, el *residual* es tambien un vector propio.

Usando lo anterior se tiene que:

$$e_{k+1} = x_{k+1} - x^* = x_k + \lambda r_k - x^*$$

es decir

$$e_{k+1} = e_k + \lambda_k r_k \tag{3.15}$$

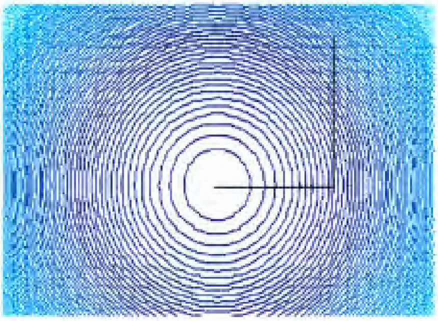
luego

$$\begin{aligned} e_{k+1} &= e_k + \frac{r_k^t r_k}{(r_k^t A r_k)} r_k \\ &= e_k + \frac{r_k^t r_k}{(r_k^t A r_k)}(-\lambda_k e_k) \\ &= e_k + \frac{r_k^t r_k}{(Ar_k)^t r_k}(-\lambda_k e_k) \\ &= e_k + \frac{r_k^t r_k}{\lambda_k r_k^t r_k}(-\lambda_k e_k) \\ &= 0 \end{aligned}$$

por lo tanto

$$x_{k+1} = x^* \tag{3.16}$$

es decir, la convergencia es inmediata. En este caso se está en la siguiente situación geométrica para el caso de dos variables:



Curvas de nivel

Consideremos otro caso un poco más general, en el que e_k es una combinación lineal de los vectores propios de A.

Sean $v_1, v_2, v_3, ..., v_n$ dichos vectores propios de A con la propiedad de que:

$$v_i^t v_j = \{ {}^{1 \text{ si } i=j}_{0 \text{ si } i \neq j} .$$

Hagamos ahora

$$e_k = \sum_{i=1}^{n} \eta_i v_i \tag{3.17}$$

para $\eta_1, \eta_2, ..., \eta_n \in \Re$, esto implica que

$$\begin{aligned} -Ae_k &= -A(\sum_{i=1}^{n} \eta_i v_i) \\ &= -(A\eta_1 v_1 + A\eta_2 v_2 + ... + A\eta_n v_n) \\ &= -(\eta_1 A v_1 + \eta_2 A v_2 + ... + \eta_n A v_n) \\ &= -(\lambda_1 \eta_1 v_1 + \lambda_2 \eta_2 v_2 + ... + \lambda_n \eta_n v_n) \\ &= -\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \eta_i v_i \end{aligned}$$

es decir

$$-r_k = Ae_k = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \eta_i v_i . \tag{3.18}$$

Ahora

$$\begin{aligned} \| \quad & e_k \|^2 = e_k^t e_k \\ = \quad & (\sum_{i=1}^{n} \eta_i v_i)^t (\sum_{i=1}^{n} \eta_i v_i) \\ = \quad & (\eta_1 v_1 + \eta_2 v_2 + ... + \eta_n v_n)^t (\eta_1 v_1 + \eta_2 v_2 + ... + \eta_n v_n) \\ = \quad & (\eta_1 v_1 + \eta_2 v_2 + ... + \eta_n v_n)^t (\eta_1 v_1 + \eta_2 v_2 + ... + \eta_n v_n) \\ = \quad & \eta_1^2 v_1^t v_1 + \eta_2^2 v_2^t v_2 + ... + \eta_n^2 v_n^t v_n \end{aligned}$$

dado que

$$v_i^t v_j = \{ {}^{1 \text{ si } i=j}_{0 \text{ si } i \neq j}$$

se tiene

$$\| e_k \|^2 = \eta_1^2 + \eta_2^2 + ... + \eta_n^2$$

es decir

$$\| e_k \|^2 = \sum_{i=1}^{n} \eta_i^2. \tag{3.19}$$

Por otra parte, si ahora consideramos el producto

$$\begin{aligned}
e_k^t A e_k &= (\sum_{i=1}^{n} \eta_i v_i)^t A (\sum_{i=1}^{n} \eta_i v_i) \\
&= (\eta_1 v_1 + \eta_2 v_2 + ... + \eta_n v_n)^t A (\eta_1 v_1 + \eta_2 v_2 + ... + \eta_n v_n) \\
&= (\eta_1 v_1 + \eta_2 v_2 + ... + \eta_n v_n)^t (\lambda_1 \eta_1 v_1 + \lambda_2 \eta_2 v_2 + ... + \lambda_n \eta_n v_n) \\
&= \lambda_1 \eta_1^2 + \lambda_2 \eta_2^2 + ... + \lambda_n \eta_n^2
\end{aligned}$$

es decir

$$\begin{aligned}
e_k^t A e_k &= \lambda_1 \eta_1^2 + \lambda_2 \eta_2^2 + \cdots + \lambda_n \eta_n^2 \qquad (3.20) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \eta_i^2 \qquad (3.21)
\end{aligned}$$

luego, por la misma razón que antes:

$$\begin{aligned}
\| \quad & r_k \|^2 = r_k^t r_k \\
&= (-\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \eta_i v_i)^t (-\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \eta_i v_i) \\
&= (\lambda_1 \eta_1 v_1 + \lambda_2 \eta_2 v_2 + ... + \lambda_n \eta_n v_n)^t (\lambda_1 \eta_1 v_1 + \lambda_2 \eta_2 v_2 + ... + \lambda_n \eta_n v_n) \\
&= (\lambda_1 \eta_1 v_1^t + \lambda_2 \eta_2 v_2^t + ... + \lambda_n \eta_n v_n^t)(\lambda_1 \eta_1 v_1 + \lambda_2 \eta_2 v_2 + ... + \lambda_n \eta_n v_n) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \eta_i^2 \lambda_i^2
\end{aligned}$$

de donde

$$\| r_k \|^2 = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 \eta_i^2. \tag{3.22}$$

si hacemos ahora el producto $r_k^t A r_k$, se tiene que

$$\begin{aligned}
r_k^t A r_k &= (\lambda_1\eta_1 v_1 + \lambda_2\eta_2 v_2 + \dots + \lambda_n\eta_n v_n)^t A(\lambda_1\eta_1 v_1 + \lambda_2\eta_2 v_2 + \dots + \lambda_n\eta_n v_n) \\
&= (\lambda_1\eta_1 v_1^t + \lambda_2\eta_2 v_2^t + \dots + \lambda_n\eta_n v_n^t)A(\lambda_1\eta_1 v_1 + \lambda_2\eta_2 v_2 + \dots + \lambda_n\eta_n v_n) \\
&= (\lambda_1\eta_1 v_1^t + \lambda_2\eta_2 v_2^t + \dots + \lambda_n\eta_n v_n^t)(\lambda_1^2\eta_1 v_1 + \lambda_2^2\eta_2 v_2 + \dots + \lambda_n^2\eta_n v_n) \\
&= \lambda_1^3\eta_1 v_1 + \lambda_2^3\eta_2 v_2 + \dots + \lambda_n^3\eta_n v_n \\
&= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^3\eta_i^2
\end{aligned}$$

es decir

$$r_k^t A r_k = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^3 \eta_i^2. \tag{3.23}$$

Ahora ya que se tiene todo lo anterior, si además suponemos que $\lambda_i = \lambda \ \ \forall i$, se tiene

$$\begin{aligned}
e_{i+1} &= e_i + \lambda_i r_i \\
&= e_i + \frac{r_i^t r_i}{(r_i^t A r_i)} r_i \\
&= e_i + \frac{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 n_i^2}{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^3 n_i^2} r_i \\
&= e_i + \frac{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 n_i^2}{\lambda \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 n_i^2} r_i \\
&= e_i + \frac{1}{\lambda} r_i \\
&= e_i - \frac{1}{\lambda} A e_i \\
&= e_i - \frac{1}{\lambda}(\lambda e_i) = 0
\end{aligned}$$

de donde, $x_{i+1} = x_*$ y la convergencia es inmediata de nuevo para este caso.

Veamos por último el caso en el que todos los eigenvectores son distintos entre sí. Tenemos la siguiente

Definición 3.4.2

$$\| e_k \|_A = (e_k^t A e_k)^{\frac{1}{2}}, \ con\ A > 0. \tag{3.24}$$

Ahora

$$\begin{aligned}
\| \quad e_{k+1} \|_A^2 &= e_{k+1}^t A e_{k+1} \\
&= (e_k + \lambda r_k)^t A (e_k + \lambda r_k) \\
&= e_k^t A e_k + \lambda_k e_k^t A r_k + \lambda_k r_k^t A e_k + \lambda_k^2 r_k^t A r_k \\
&= \| e_k \|_A^2 + 2\lambda_k r_k^t A e_k + \lambda_k^2 r_k^t A r_k \\
&= \| e_k \|_A^2 - 2\lambda_k r_k^t r_k + \lambda_k^2 r_k^t A r_k \\
&= \| e_k \|_A^2 - 2\left(\frac{r_k^t r_k}{r_k^t A r_k}\right) r_k^t r_k + \left(\frac{r_k^t r_k}{r_k^t A r_k}\right)^2 r_k^t A r_k \\
&= \| e_k \|_A^2 - 2\frac{(r_k^t r_k)^2}{r_k^t A r_k} + \frac{(r_k^t r_k)^2}{r_k^t A r_k} \\
&= \| e_k \|_A^2 - \frac{(r_k^t r_k)^2}{r_k^t A r_k}
\end{aligned}$$

es decir

$$\| e_{k+1} \|_A^2 = \| e_k \|_A^2 \left(1 - \frac{(r_k^t r_k)^2}{(r_k^t A r_k) \| e_k \|_A^2}\right) \tag{3.25}$$

y por lo tanto

$$\| e_{k+1} \|_A^2 = \| e_k \|_A^2 \, \omega^2 \tag{3.26}$$

donde

$$\omega^2 = 1 - \frac{(r_k^t r_k)^2}{(r_k^t A r_k) \| e_k \|_A^2} \tag{3.27}$$

$$\begin{aligned}
&= 1 - \frac{(r_k^t r_k)^2}{(r_k^t A r_k)(e_{k+1}^t A e_{k+1})} \\
&= 1 - \frac{(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \eta_i^2)^2}{(\sum_{i=1}^n \lambda_i^3 \eta_i^2)(\sum_{i=1}^n \lambda_i \eta_i^2)}.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Nuestro análisis depende de encontrar una cota superior de ω. En [2] puede verse que el resultado final es:

$$\| e_{k+1} \|_A \leq \left(\frac{k-1}{k+1}\right)^{k+1} \| e_0 \|_A \tag{3.29}$$

donde

$$k = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \geq 1$$

ahora, si suponemos que $\lambda_{\max} \gg \lambda_{\min}$, se tiene que

$$\frac{k-1}{k+1} = \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}} \approx 1$$

de donde resulta

$$\| e_{k+1} \|_A \simeq \| e_0 \|_A \tag{3.30}$$

esto es, la matriz A es mal condicionada, la convergencia puede volverse excesivamente lenta, mientras que si $\lambda_{\mathbf{max}} \approx \lambda_{\mathbf{min}}$, entonces

$$\frac{k-1}{k+1} = \frac{\lambda_{\mathbf{max}} - \lambda_{\mathbf{min}}}{\lambda_{\mathbf{max}} + \lambda_{\mathbf{min}}} \ll 1$$

lo que nos da

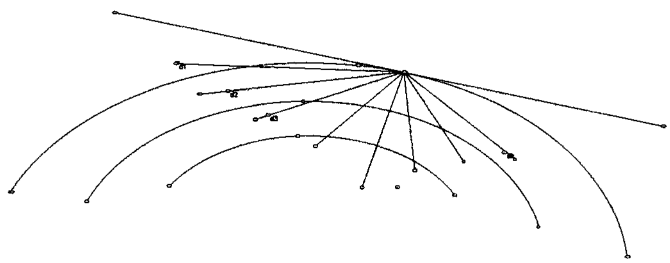
$$\| e_{k+1} \|_A \ll \| e_0 \|_A \tag{3.31}$$

esto es, se tiene una buena velocidad de convergencia, lo que corresponde con lo visto anteriormente.

Capítulo 4

Los métodos de direcciones conjugadas

4.1 Motivación



Direcciones de descenso

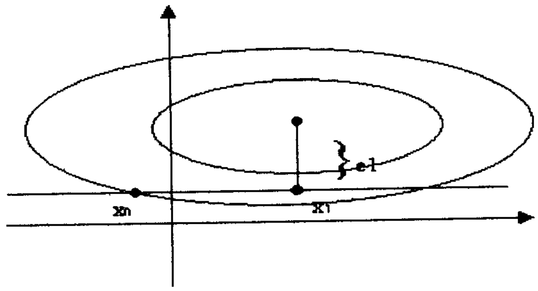
Nótese que en particular para 2 variables las direcciones del método de descenso más rápido siempre se repiten y si la primera fue mala, no hay mejor suerte en lo que sigue; una alternativa es la siguiente:

Tomemos

$$d_0, d_1, d_2, ...d_{n-1}$$

direcciones ortogonales entre sí y la idea es tratar de usar cada una de ellas en cada iteración, esto es:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \tag{4.1}$$



Para encontrar α_k utilizaremos el hecho de que

$$d_k^t e_{k+1} = 0. \tag{4.2}$$

De esto se tiene

$$\begin{aligned} d_k^t(x_{k+1} - x_*) &= d_k^t(x_k + \alpha_k d_k - x_*) \\ &= d_k^t(e_k + \alpha_k d_k) \\ &= d_k^t e_k + \alpha_k d_k^t d_k = 0 \end{aligned}$$

entonces

$$\alpha_k = -\frac{d_k^t e_k}{d_k^t d_k} \tag{4.3}$$

el problema es que para conocer α_k debemos de conocer el valor de e_k el cual se desconoce.

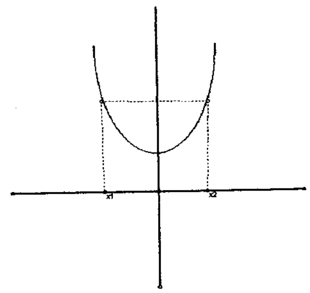
4.2 Los métodos de direcciones conjugadas

Volvamos con nuestra cuadrática:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^t Ax - b^t x + c \tag{4.4}$$

y analizemos el caso particular:

$$f(x) = ax^2 - 2bx + c, \text{ para } a, b, c \in R, \ a > 0 \tag{4.5}$$



Grafica $ax^2 - 2bx + c$

Proposición 4.2.1 *Supongamos que* $x_1 \neq x_2, x_1, x_2 \in R$ *y además que* $f(x_1) = f(x_2)$, *donde* $f(x) = ax^2 - 2bx + c$ *para* $a > 0$, *entonces*

$$x_* = \frac{x_1 + x_2}{2} \tag{4.6}$$

es punto crítico y además es mínimo de $f(x)$.

Demostración. A saber

$$f'(x) = 2ax - 2b$$

y

$$f''(x) = 2a > 0$$

ahora, hagamos

$$f'(x) = 0 \Leftrightarrow 2ax - 2b = 0$$

por lo tanto

$$2ax = 2b \Longleftrightarrow x = \frac{b}{a} \tag{4.7}$$

es un punto crítico para f. Ahora

$$\begin{aligned} f(x_1) &= ax_1^2 - 2bx_1 + c \text{ y además} \\ f(x_2) &= ax_2^2 - 2bx_2 + c \end{aligned}$$

por lo tanto si aplicamos la hipótesis, se tiene que:

$$ax_2^2 - 2bx_2 + c = ax_1^2 - 2bx_1 + c$$

$$a(x_2^2 - x_1^2) = 2b(x_2 - x_1)$$

$$\begin{aligned} a &= \frac{2b(x_2 - x_1)}{(x_2^2 - x_1^2)} \\ &= \frac{2b}{x_2 + x_1} \end{aligned}$$

por lo tanto

$$2b = a(x_2 + x_1)$$

es decir

$$\frac{x_2 + x_1}{2} = \frac{b}{a}$$

luego

$$x_* = \frac{x_2 + x_1}{2} \tag{4.8}$$

es un mínimo de $f(x)$, así x_* resulta ser el punto medio entre x_1 y x_2. ■

Para el caso general se tiene el siguiente:

Teorema 4.2.2 *Sea $f(x) = \frac{1}{2}x^tAx - b^tx + c$, x_0 un punto dado, y sea d un vector dirección, si*
consideramos que la recta

$$\mathcal{L}(\alpha) : x_0 + \alpha d$$

corta a la superficie de nivel $f(x) = \delta$ en los puntos x_1 y x_2, entonces el mínimo de $f(x)$ a lo largo de $\mathcal{L}$ se encuentra en $x_* = \frac{x_1+x_2}{2}$

Demostración. Sabemos que

$$\begin{aligned} f(x_0 + \alpha d) &= \frac{1}{2}(x_0 + \alpha d)^t A(x_0 + \alpha d) - b^t(x_0 + \alpha d) + c \\ &= \frac{1}{2}x_0^tAx_0 + \alpha\frac{1}{2}x_0^tAd + \alpha\frac{1}{2}d^tAx_0 + \alpha^2\frac{1}{2}d^tAd \\ &\quad -b^tx_0 - \alpha b^td + c \\ &= \frac{1}{2}x_0^tAx_0 + \alpha\frac{1}{2}x_0^tAd + \alpha\frac{1}{2}x_0^tAd + \alpha^2\frac{1}{2}d^tAd \\ &\quad -b^tx_0 - \alpha b^td \\ &= (\frac{1}{2}d^tAd)\alpha^2 + [x_0^tAd - b^td]\alpha + [\frac{1}{2}x_0^tAx_0 - b^tx_0 + c] \\ &= (\frac{1}{2}d^tAd)\alpha^2 + [x_0^tAd - b^td]\alpha + f(x_0) = g(\alpha) \end{aligned}$$

es decir

$$g(\alpha) = (\frac{1}{2}d^tAd)\alpha^2 + (x_0^tAd - b^td)\alpha + f(x_0) \tag{4.9}$$

es una cuadrática en términos de α. Como sabemos que $f(x_1) = f(x_2)$ y además que $x_1 = x_0 + \alpha_1 d$ y $x_2 = x_0 + \alpha_2 d$ entonces

$$g(\alpha_1) = f(x_0 + \alpha_1 d) = f(x_1) = f(x_2) = f(x_0 + \alpha_2 d) = g(\alpha_2).$$

Por la proposición anterior $g(\alpha)$ tiene un mínimo local en

$$\alpha^* = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}$$

así

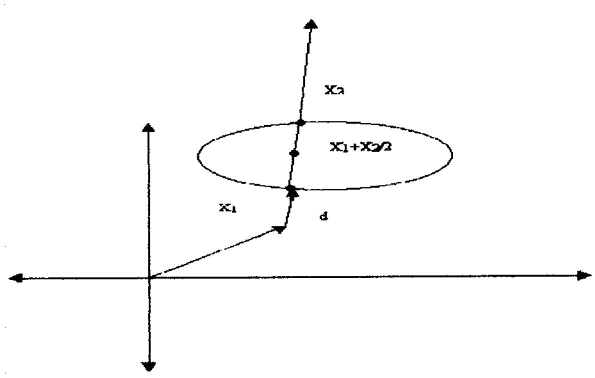
$$\begin{aligned} x_* &= x_0 + \alpha^* d = x_0 + (\frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2})d \\ &= x_0 + (\frac{\frac{x_1 - x_0}{d} + \frac{x_2 - x_0}{d}}{2})d \\ &= x_0 + \frac{x_1 + x_2 - 2x_0}{2} \\ &= x_0 + \frac{x_1 + x_2}{2} - x_0 \\ &= \frac{x_1 + x_2}{2} \end{aligned}$$

es decir:

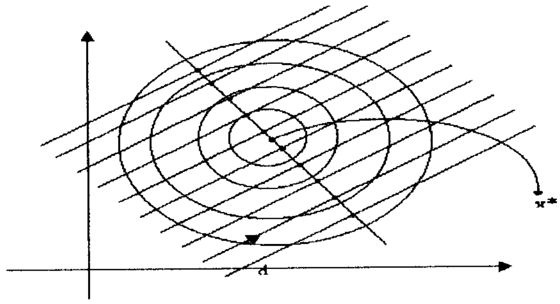
$$x_* = \frac{x_1 + x_2}{2},$$

es el punto medio de x_1 y x_2, y es el mínimo de f a lo largo de $\mathcal{L}$. ∎

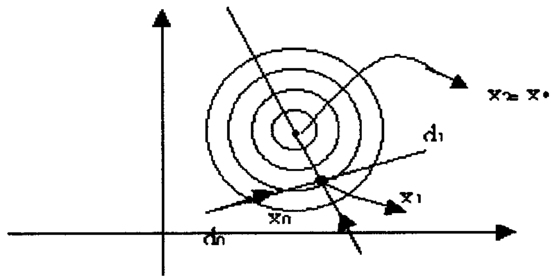
Geométricamente esto se puede ver en la siguiente figura:



Supongamos ahora por el momento que las curvas de nivel de la cuadrática son circunferencias. Entonces, por lo que acabamos de ver, si tomamos una dirección d_0, los puntos medios de las cuerdas paralelas a d_0 están sobre un diámetro

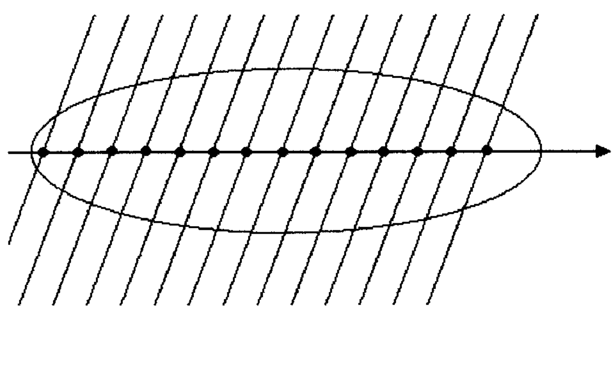


y por lo tanto, si se toma un punto x_0 y se hace $d = d_0$ y se buscan las intersecciones de la recta $\mathcal{L}_0(\alpha) : x_0 + \alpha d_0$, en un paso se llega a x_1, y entonces si se toma d_1 con la propiedad $d_1^t d_0 = 0$, y se minimiza ahora a lo largo de la recta $\mathcal{L}_1(\alpha) : x_1 + \alpha d_1$ se llega a $x_2 = x_*$,



esto es, en dos pasos se llega al mínimo.

Una pregunta sería ¿que sucede si en vez de circunferencias se tienen elipses?, se sabe nuevamente que los puntos medios de cuerdas paralelas están sobre una recta o un plano o un hiperplano que pasa por el centro, solo que esta recta no tiene por que ser ortogonal a la familia de cuerdas como en el caso de las circunferencias. Vease [13].



A continuación damos una caracterización de la línea o plano o hiperplano que contiene los puntos medios:

Consideremos las rectas $\mathcal{L}_1 : x_1 + \alpha_1 d$ y $\mathcal{L}_2 : x_2 + \alpha_2 d$. Si α es un valor para el que se tiene un mínimo entonces

$$g'(\alpha) = f'(x_0 + \alpha d) = 0$$

ahora, dado que

$$f(x_0 + \alpha d) = [\frac{1}{2} d^t A d]\alpha^2 + [x_0^t A d - b^t d]\alpha + f(x_0)$$

se tiene

$$g'(\alpha) = (d^t A d)\alpha + (x_0^t A d - b^t d)$$

entonces

$$g'(\alpha) = 0$$

implica

$$(d^t A d)\alpha + (x_0^t A d - b^t d) = 0$$

o bien

$$(d^t A d)\alpha - (b^t d - x_0^t A d) = 0$$

de donde

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{(b^t d - x_0^t A d)}{(d^t A d)} = -\frac{x_0^t A d - b^t d}{d^t A d} \\ &= -\frac{(x_0^t A - b^t) d}{d^t A d} = -\frac{(A x_0 - b)^t d}{d^t A d} \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\alpha_1 = -\frac{(A x_1 - b)^t d}{d^t A d} \tag{4.10}$$

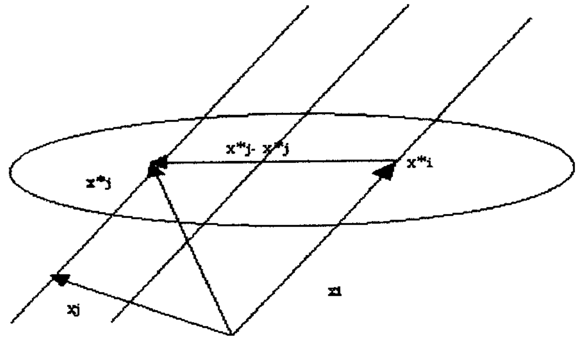
y

$$\alpha_2 = -\frac{(A x_2 - b)^t d}{d^t A d} \tag{4.11}$$

esto es, los puntos mínimos a lo largo de $\mathcal{L}_1$y $\mathcal{L}_2$ son

$$x_1^* = x_1 + \alpha_1 d = x_1 - \frac{(A x_1 - b)^t d}{d^t A d} d \tag{4.12}$$

$$x_2^* = x_2 + \alpha_2 d = x_2 - \frac{(Ax_2 - b)^t d}{d^t Ad} d \tag{4.13}$$



que como vimos antes, resultan ser puntos medios de cuerdas paralelas. Consideremos ahora la diferencia entre ellos, lo que nos da un vector en la recta de puntos medios que pasa por x_*

$$\begin{aligned}
x_2^* - x_1^* &= x_2 - \frac{(Ax_2 - b)^t d}{d^t Ad} d - x_1 + \frac{(Ax_1 - b)^t d}{d^t Ad} d \\
&= x_2 - x_1 + \frac{(Ax_1 - b)^t d}{d^t Ad} d - \frac{(Ax_2 - b)^t d}{d^t Ad} d \\
&= x_2 - x_1 + \frac{(Ax_1 - b)^t d - (Ax_2 - b)^t d}{d^t Ad} d \\
&= x_2 - x_1 + \frac{(x_1^t A - b^t) d - (x_2^t A - b^t) d}{d^t Ad} d \\
&= x_2 - x_1 + \frac{(x_1^t A - b^t - x_2^t A + b^t) d}{d^t Ad} d \\
&= x_2 - x_1 + \frac{(x_1^t A - x_2^t A) d}{d^t Ad} d \\
&= x_2 - x_1 + \frac{(Ax_1 - Ax_2)^t d}{d^t Ad} d
\end{aligned}$$

por lo tanto

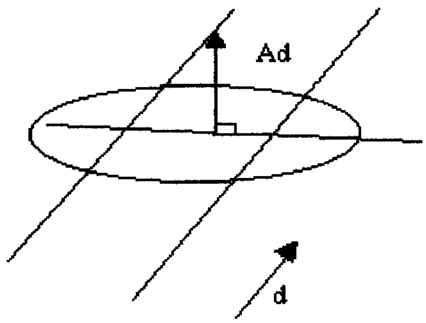
$$x_2^* - x_1^* = x_2 - x_1 + \frac{(x_1 - x_2)^t Ad}{d^t Ad} d \tag{4.14}$$

si ahora multiplicamos escalarmente por Ad, resulta que

$$\begin{aligned}
(x_2^* - x_1^*)^t Ad &= (x_2 - x_1)^t Ad + \frac{(x_1 - x_2)^t Ad}{d^t Ad} d^t Ad \\
(x_2^* - x_1^*)^t Ad &= x_2{}^t Ad - x_1^t Ad + x_1^t A - x_2^t Ad = 0
\end{aligned}$$

esto es, los puntos medios (una línea en el caso de 2 variables, un hiperplano para $n \geq 3$ variables) resulta ser ortogonal a Ad. Así los puntos medios de las cuerdas paralelas a d están sobre un hiperplano ortogonal a Ad.

Geométricamente se puede ver de la siguiente manera:



Obsérvese que con esta información, para el caso de 2 variables, si las curvas de nivel son elipses y se tiene una x_0 inicial, entonces, dada una dirección d_0, se busca el punto medio de la cuerda

$$\mathcal{L}_0(\alpha) : x_0 + \alpha d_0,$$

esto es, el punto donde f alcanza el mínimo en la dirección $\mathcal{L}_0$, para lo cual debemos de resolver

$$\min_{\alpha} f(x_0 + \alpha d_0) = \min_{\alpha} g(\alpha).$$

Llamemos a tal valor α_0, y hagamos

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0$$

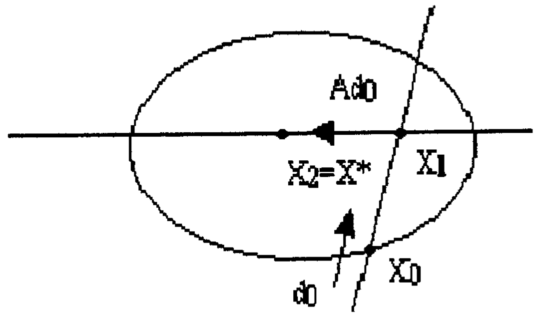
lo que resta es localizar el mínimo de f a lo largo de la recta de los puntos medios que como ya se vio, es de la forma

$$\mathcal{L}_1(\alpha) : x_0 + \alpha (Ad_0)^{\perp}$$

lo anterior nos da un punto x_2 con la propiedad de que

$$x_2 = x_*$$

y así para el caso de dos variables se ha llegado al mínimo en dos pasos.



Vayamos ahora al caso general.

Definición 4.2.3 *Sean d_i y d_j dos vectores; se dice que son A-conjugados o A-ortogonales si se cumple que*

$$d_i^t A d_j = 0. \tag{4.15}$$

Ahora una observación importante con respecto al caso de dos variables que acabamos de analizar es que

$$e_1^t A d_0 = 0$$

esto es, e_1 es A-ortogonal a d_0.

Para el caso general se tiene

$$e_{k+1}^t A d_k = 0$$

de esto y como además

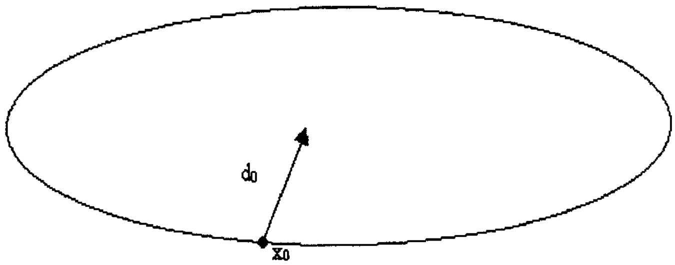
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \quad \text{y} \quad e_{k+1} = x_{k+1} - x_*$$

resulta

$$\begin{aligned}
0 &= d_k^t A e_{k+1} = d_k^t A(x_{k+1} - x_*) \\
&= d_k^t A(x_k + \alpha_k d_k - x_*) \\
&= d_k^t A(e_k + \alpha_k d_k) \\
&= d_k^t A e_k + \alpha_k d_k^t A d_k, \text{ por lo tanto} \\
\alpha_k &= -\frac{d_k^t A e_k}{d_k^t A d_k} = \frac{d_k^t r_k}{d_k^t A d_k}.
\end{aligned}$$

Un esquema para n dimensiones sería el siguiente:

1. Se tiene x_0 y se elige una dirección d_0,

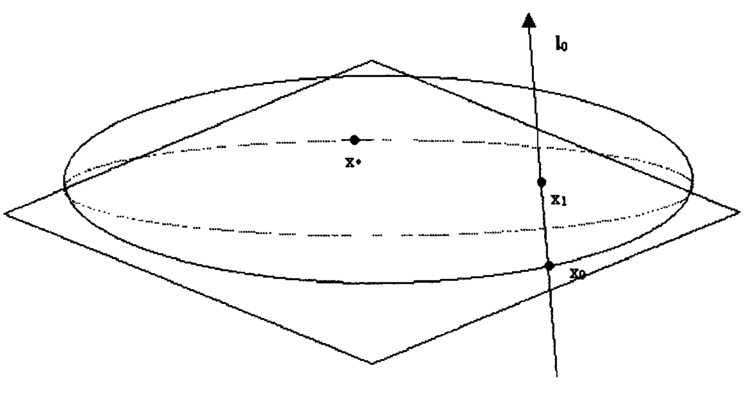


se localiza el mínimo de $f(x)$ a lo largo de la recta $\mathcal{L}_0 : x_0 + \alpha d_0$. Como ya sabemos, el mínimo se encuentra en el punto medio del segmento definido por las intersecciones de $\mathcal{L}_0$ y $f(x)$, lo cual nos da un valor para α al que llamaremos α_0.

2. Se hace $x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0$, este x_1 está en el hiperplano ortogonal a Ad_0 que contiene a x_*, esto es,

$$x_1 \in H_0 = \left\{ x / x = x_1 + d_i;\ \ d_i^t A d_0 = 0,\, i = 1, \ldots, n-1 \right\}$$

.



nótese que la dimensión de H_0 es $n-1$.

3. Resolver ahora el problema $\min_{x \in H_0} f(x)$.

Como H_0 tiene dimensión $n-1$, tomemos $u_1, u_2, ..., u_{n-1} \in H_0$ linealmente independientes, dado que

$$x_* \in H_0 \Longrightarrow x_* = x_1 + d_*^1$$

donde

$$(d_*^1)^t A d_0 = 0;$$

el problema es encontrar a

$$d_*^1 = x_* - x_1 = e_1$$

pero no conocemos a x_*, por lo tanto, ahora tomemos $d_1 \in H_0$, es decir, d_1 es tal que $d_1^t A d_0 = 0$ y encontremos el mínimo de f a lo largo de $\mathcal{L}_1 : x_1 + \alpha d_1$, es decir

$$\min_\alpha f(x_1 + \alpha d_1) = \min_\alpha g(\alpha) \tag{4.16}$$

sea α_1 tal valor que minimiza f a lo largo de $\mathcal{L}_1$, entonces $x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1$; y al igual que antes definamos el hiperplano

$$H_1 = \{x/x = x_2 + d_k;\ d_k^t A d_1 = 0,\ k = 2, \ldots, n-1\} \tag{4.17}$$

es de dimensión $n-2$ pues es A-ortogonal a $d_1 \in H_1$ y H_0 tiene dimensión $n-1$, además, $x_* \in H_0 \cap H_1$, donde

$$H_0 \cap H_1 = \{x/x = x_2 + d_i,\ d_i^t A d_0 = 0 = d_i^t A d_1,\ i = 1, \ldots, n-1\} \tag{4.18}$$

de esto, resulta que x_* puede escribirse como

$$x_* = x_2 + d_*^2 \tag{4.19}$$

donde $d_*^2 \in H_1$. Si tomamos los vectores

$$u_2, u_3, u_4, \ldots, u_{n-1}$$

tales que

$$u_k^t A d_0 = 0 \ \text{ y } u_k^t A d_1 = 0$$

para $k = 2, 3, 4, .., n-1$, entonces como

$$d_*^2 = x_* - x_2 = e_2$$

y

$$e_2^t A d_1 = 0 = u_k^t A d_1$$

resulta que d_*^2 se puede expresar de la forma:

$$d_*^2 = 0 d_0 + 0 d_1 + \beta_2 u_2 + \beta_3 u_3 + \beta_4 u_4 + \ldots + \beta_{n-1} u_{n-1} \tag{4.20}$$

$$\vdots$$

prosiguiendo según el esquema anterior, para el k-ésimo paso se llega a que:

dado d_{k-1} tal que

$$d_{k-1}^t A d_i = 0, \quad i = 0, 1, 2, ...k-2,$$

se construye la recta

$$\mathcal{L}_{k-1} : x_{k-1} + \alpha d_{k-1}$$

y se calcula el mínimo de f a lo largo de $\mathcal{L}_{k-1}$. Si el mínimo se alcanza para un valor α_{k-1}, se hace

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1} d_{k-1}$$

en este caso, x_* se encuentra en el hiperplano

$$H_{k-1} = \{x/x = x_k + d;\ d^t A d_{k-1} = 0\} \tag{4.21}$$

luego, por construcción, se tiene que

$$x_* \in \bigcap_{i=0}^{k-2} H_i = \{x/x = x_k + d;\ d^t A d_i = 0, 1, ..., k-1\} \tag{4.22}$$

así, x_* tiene la forma

$$x_* = x_k + d_*^k,\ d_*^k \in H_{k-1}.$$

Si ahora se eligen

$$u_k, u_{k+1}, u_{k+2}, ..., u_{n-1}$$

tales que

$$\begin{aligned} u_i^t A d_0 &= 0 \\ u_i^t A d_1 &= 0 \\ &\vdots \\ u_i^t A d_{k-1} &= 0 \end{aligned}$$

para $i = k,\ k+1, .., n-1$, entonces d_* puede escribirse de la forma

$$d_*^k = 0d_0 + 0d_1 + ... + 0d_{k-1} + a_k u_k + a_{k+1} u_{k+1} + ... + a_{n-1} u_{n-1}$$

y si $k = n$, se tiene

$$x^* = x_n + d_*^n$$

es decir $x_* = x_k$, esto es, el método converge en n pasos.

En conclusión, si a f le aplicamos el proceso descrito anteriormente resulta que a lo más en n pasos se llega al mínimo. A este proceso se le conoce como el *Método de Direcciones Conjugadas*, dado que requiere generar vectores $d_0, d_1, ..., d_{n-1}$ tales que $d_i^t A d_j = 0$, para $i \neq j$.

4.3 Análisis de Convergencia

Para poder dar una demostración formal de la convergencia en n pasos, el método de direcciones conjugadas requiere la siguiente proposición:

Proposición 4.3.1 *Sean $d_0, d_1, d_2, ..., d_k$ A-ortogonales, es decir $d_i^t A d_j = 0$, $i \neq j$, entonces $\{d_i\}_{i=0}^k$ son Linealmente Independientes.*

Demostración. Sean $\delta_1, \delta_2, ..., \delta_k$ escalares tales que $\delta_0 d_0 + \delta_1 d_1 + ... + \delta_k d_k = 0$. Pd $\delta_i = 0$ para toda $i = 1, ..., k$.
Multipliquemos escalarmente por A

$$\delta_0 A d_0 + \delta_1 A d_1 ... + \delta_k A d_k = 0$$

luego multilpiquemos por d_i^t

$$\delta_0 d_i^t A d_0 + \delta_1 d_i^t A d_1 + ... + \delta_k d_i^t A d_k = 0$$

entonces $\delta_i d_i^t A d_i = 0$ y como $d_i^t A d_i > 0 \Longrightarrow \delta_i = 0$, por lo tanto los $\{d_i\}_{i=0}^k$ son linealmente independientes. ■

Ahora sí, tenemos el siguiente resultado:

Teorema 4.3.2 *Sean $d_0, d_1, d_2, ..., d_{n-1}$ A-ortogonales, es decir $d_i^t A d_j = 0$, $i \neq j$. Dado $x_0 \in \mathbb{R}^n$, la sucesión $\{x_n\}$ converge a x_0 en n pasos, es decir $x_n = x_*$, donde*

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

con

$$\alpha_k = \frac{r_k^t d_k}{d_k^t A d_k}.$$

Demostración. *Consideremos*

$$e_0 = x_0 - x_* = \alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 ... + \alpha_{n-1} d_{n-1} \tag{4.23}$$

multiplicando por $d_k^t A$ se tiene

$$\begin{aligned} d_k^t A e_0 &= \alpha_0 d_k^t A d_0 + \alpha_1 d_k^t A d_1 ... + \alpha_{n-1} d_k^t A d_{n-1} \\ &= \alpha_k d_k^t A d_k \end{aligned}$$

por ser A-conjugados; por lo tanto

$$\alpha_k = \frac{d_k^t A e_0}{d_k^t A d_k} \tag{4.24}$$

luego

$$\alpha_k = \frac{d_k^t A(e_0 + \delta_0 d_0 + ... + \delta_{k-1} d_{k-1})}{d_k^t A d_k}$$

de nuevo por que $d_k^t A d_i = 0$ *para* $i = 0, 1, ...k-1$. *Ahora recordemos que*

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

por lo tanto

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + \alpha_0 d_0 \\ x_2 &= x_1 + \alpha_1 d_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 \\ x_3 &= x_2 + \alpha_2 d_2 = x_0 + \alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + \alpha_2 d_2 \\ &\vdots \\ x_k &= x_0 + \alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + \alpha_2 d_2 + ... + \alpha_{k-1} d_{k-1} \end{aligned} \tag{4.25}$$

de donde

$$\begin{aligned} e_k &= x_k - x_* = x_0 + \delta_0 d_0 + ... + \delta_{k-1} d_{k-1} - x_* \\ &= x_0 - x_* + \delta_0 d_0 + ... + \delta_{k-1} d_{k-1} \\ e_k &= e_0 + \delta_0 d_0 + ... + \delta_{k-1} d_{k-1} \end{aligned}$$

así

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{d_k^t A(e_0 + \delta_0 d_0 + ... + \delta_{k-1} d_{k-1})}{d_k^t A d_k} \\ \alpha_k &= \frac{d_k^t A e_k}{d_k^t A d_k}. \end{aligned} \tag{4.26}$$

Ahora, como nosotros sabíamos que $Ae_k = -r_k$ *y además*

$$\delta_k = \frac{r_k^t d_k}{d_k^t A d_k} = \frac{d_k^t r_k}{d_k^t A d_k} = -\frac{d_k^t A e_k}{d_k^t A d_k} = -\alpha_k$$

es decir

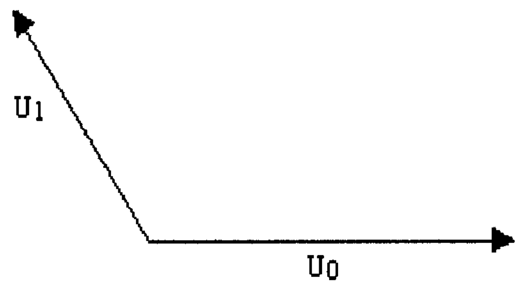
$$\delta_k = -\alpha_k \tag{4.27}$$

resulta

$$\begin{aligned} e_k &= x_k - x_* \\ &= e_0 + \delta_0 d_0 + \delta_1 d_1 + \delta_2 d_2 + ... + \delta_{k-1} d_{k-1} \\ &= (\alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + ... + \alpha_{n-1} d_{n-1}) + (\delta_0 d_0 + \delta_1 d_1 + ... + \delta_{k-1} d_{k-1}) \\ &= (\alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + ... + \alpha_{n-1} d_{n-1}) + (-\alpha_0 d_0 - \alpha_1 d_1 - ... - \alpha_{k-1} d_{k-1}) \\ &= \alpha_k d_k + \alpha_{k+1} d_{k+1} + ... + \alpha_{n-1} d_{n-1} \end{aligned}$$

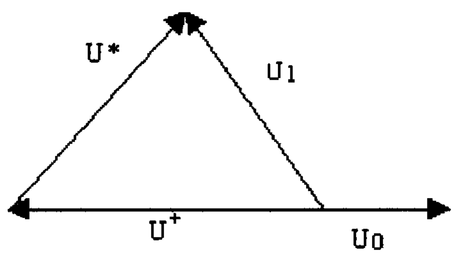
evidentemente $e_n = x_n - x_* = 0 \Longrightarrow x_n = x_*$ *es decir se tiene que en* n *pasos se llega al mínimo. Además en cada paso se elimina una componente del error, lo cual nos da la convergencia en* n *pasos.* ■

Ahora el problema es ¿cómo construir las direcciones d_i conjugadas?. Una posibilidad es usar Gram-Schmidt. Veamos el caso para dos vectores.



Consideremos dos vectores u_0 y u_1 linealmente independientes.

Hagamos $d_0 = u_0$, enseguida descompongamos a u_1 en dos componentes u^+ y u^*



claramente $u_1 = u^+ + u^*$; $u^+ \| u_0$ y u^* es A-ortogonal a u_0. Luego hagamos $d_1 = u^*$, es decir acabamos de construir dos direcciones que son A-conjugadas.

Veamos ahora el caso general:

Sean $u_0, u_1, ... u_{n-1}$ linealmente independientes,.entonces al igual que antes tómese $d_0 = u_0$, para $i > 0$ sea

$$d_i = u_i + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_k \tag{4.28}$$

donde las β_{ik} se deben de elegir de tal forma que las d_i resulten conjugadas. Determinemos tales valores multiplicando por Ad_j

$$d_i^t A d_j = u_i^t A d_j + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_k^t A d_j. \tag{4.29}$$

Como se requiere que $d_i^t A d_j = 0$ para todos los vectores anteriores a d_i se tiene entonces

$$0 = u_i^t A d_j + \beta_{ij} d_j^t A d_j \qquad i > j$$

y de esto resulta

$$\beta_{ij} = -\frac{u_i^t A d_j}{d_j^t A d_j} \tag{4.30}$$

eligiendo pues β_{ij} de esta manera se obtiene una colección de vectores d_i conjugados construidos a partir de los u_i. Este método, sin embargo, tiene algunas desventajas. Por ejemplo, para construir los d_i se requieren todos los d_k anteriores y esto por tanto, implica almacenarlos en memoria para construir cada nuevo d_i.

Una alternativa interesante resulta ser el material de la sección siguiente.

Capítulo 5

El método de Gradientes Conjugados.

5.1 Construcción del método

Antes de proseguir veamos algunos resultados interesantes:

Recordemos que

$$r_{k+1} = -Ae_{k+1}$$

por tanto

$$\begin{aligned} r_{k+1} &= -A(x_{k+1} - x_*) = -A(x_k + \alpha_k d_k - x_*) \\ &= -A(e_k + \alpha_k d_k) = -Ae_k - \alpha_k A d_k \end{aligned}$$

de donde

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k d_k. \tag{5.1}$$

Ahora, ya teníamos que

$$\begin{aligned} e_k &= \sum_{j=k}^{n-1} \alpha_k d_j \Longrightarrow -Ae_k = -\sum_{j=k}^{n-1} \alpha_k A d_j \\ &\Longleftrightarrow \quad r_k = -\sum_{j=k}^{n-1} \alpha_k A d_j \end{aligned} \tag{5.2}$$

y dado que las d_i, para $i = 0, ..., n-1$ son A-conjugados, se tiene que para $i < j$

$$d_i^t r_k = -\sum_{j=k}^{n-1} \alpha_k d_i^t A d_j = 0 \tag{5.3}$$

y por lo tanto $d_i^t r_k = 0$ para $i < j$.

Ahora, si a la expresión

$$d_i = u_i + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_k$$

la multiplicamos por r_j, resulta

$$d_i^t r_j = u_i^t r_j + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_k^t r_j \tag{5.4}$$

y como $d_i^t r_j = 0$ para $i < j$, se tiene $0 = u_i^t r_j$, $i < j$, es decir, cada residual es ortogonal a todos los u_i anteriores, por lo tanto $d_0, d_1, ..., d_i$ generan el mismo subespacio que $u_0, u_1, ..., u_i$ y además, r_j, $j > i$ es ortogonal a este subespacio.

De la igualdad (5.4) resulta

$$d_i^t r_i = u_i^t r_i + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_k^t r_i \tag{5.5}$$

o bien

$$d_i^t r_i = u_i^t r_i,$$

dado que

$$d_k^t r_i = 0, \ \ k = 0, \ldots, i-1.$$

Ahora veamos la construcción del método de Gradientes Conjugados; este nombre se deriva del hecho de que las direcciones de busqueda se generan a partir de los gradientes de f en los x_k. En general, se busca que las d_k sean de la forma

$$\begin{aligned} d_k &= r_k + c_k \text{ con la propiedad de que} \\ d_k^t A d_j &= 0 \text{ para } j = 1, 2, ..., k-1. \end{aligned}$$

Tomemos

$$d_0 = r_0 = -f'(x_0);$$

ahora, hagamos

$$d_1 = r_1 + \gamma_0^1 d_0$$

se quiere que d_0 y d_1 sean conjugados, es decir,

$$\begin{aligned} d_1^t A d_0 &= 0 \Rightarrow \\ 0 &= (r_1 + \gamma_0^1 d_0)^t A d_0 = r_1^t A d_0 + \gamma_0^1 d_0^t A d_0 \\ &\Rightarrow \gamma_0^1 = -\frac{r_1^t A d_0}{d_0^t A d_0} \end{aligned} \tag{5.6}$$

es decir, si tomamos γ_0^1 de tal forma, entonces d_0 y d_1 son A-conjugados, construidos a partir de r_0 y r_1.

Sea ahora $d_2 = r_2 + \gamma_1^2 d_1 + \gamma_0^2 d_0$, sabemos que

$$\begin{aligned} x_k &= x_{k-1} + \alpha_{k-1} d_{k-1} \\ &\Rightarrow d_{k-1} = \frac{x_k - x_{k-1}}{\alpha_{k-1}} \\ &\Rightarrow d_0^t A r_2 = (\frac{x_1 - x_0}{\alpha_0})^t A r_2 \\ &= (\frac{x_1^t A - x_0^t A}{\alpha_0}) r_2 = (\frac{x_1^t A - b^t + b^t - x_0^t A}{\alpha_0}) r_2 \\ &= \frac{(b - Ax_1)^t + (b - Ax_0)^t}{\alpha_0} r_2 \\ &= \frac{[(b - Ax_1) + (b - Ax_0)]^t}{\alpha_0} r_2 \\ &= \frac{(r_1 - r_0)^t}{\alpha_0} r_2 \end{aligned} \tag{5.7}$$

ahora, como

$$\begin{aligned} d_0 &= r_0, \\ d_1 &= r_1 + \gamma_0^1 \end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned} r_0^t r_2 &= d_0^t r_2 \quad \text{y} \\ r_1^t r_2 &= (d_1 - \gamma_0^1 d_0)^t r_2 \\ &= d_1^t r_2 - \gamma_0^1 d_0^t r_2 \end{aligned}$$

y como ya sabíamos que $d_i^t r_k = 0$, $i < k$ resulta entonces

$$\frac{(r_1 - r_0)^t}{\alpha_0} r_2 = 0$$

o bien $d_0^t A r_2 = 0$, esto es, d_0 es conjugado de r_2.

Ahora, se busca que d_2 sea A-conjugado de d_0 y d_1, es decir

$$\begin{aligned} 0 &= d_0^t A d_2 = d_0^t A (r_2 + \gamma_1^2 d_1 + \gamma_0^2 d_0) \\ &= d_0^t A r_2 + \gamma_1^2 d_0^t A d_1 + \gamma_0^2 d_0^t A d_0 \end{aligned}$$

y como

$$\begin{aligned} d_0^t A r_2 &= 0 = d_0^t A d_1 \text{ por ser } d_0 \text{ y } d_1 \text{ conjugados} \\ &\Longrightarrow 0 = \gamma_0^2 d_0^t A d_0 \\ &\Longrightarrow \gamma_0^2 = 0, \text{ y como habíamos escrito} \\ d_2 &= r_2 + \gamma_1^2 d_1 + \gamma_0^2 d_0 \end{aligned}$$

entonces basta escribir

$$d_2 = r_2 + \gamma_1^2 d_1 \tag{5.8}$$

y calcular γ_1^2 de tal manera que $d_2^t A d_1 = 0$, esto es,

$$\begin{aligned} 0 &= d_2^t A d_1 = (r_2 + \gamma_1^2 d_1)^t A d_1 \\ &= r_2^t A d_1 + \gamma_1^2 d_1^t A d_1 \\ &\Rightarrow \gamma_1^2 = -\frac{r_2^t A d_1}{d_1^t A d_1} = -\frac{d_1^t A r_2}{d_1^t A d_1} \end{aligned}$$

ahora como $r_2^t d_1 = 0$; $d_1 = r_1 + \gamma_0^1 d_0$ y $d_1 = \frac{x_2 - x_1}{\alpha_1}$, se tiene

$$\begin{aligned} \gamma_1^2 &= -\frac{d_1^t A r_2}{d_1^t A d_1} = -\frac{(\frac{x_2-x_1}{\alpha_1})^t A r_2}{(\frac{x_2-x_1}{\alpha_1})^t A d_1} \\ &= -\frac{(x_2 - x_1)^t A r_2}{(x_2 - x_1)^t A d_1} \\ &= -\frac{(x_2^t A - x_1^t A) r_2}{(x_2^t A - x_1^t A) d_1} \\ &= \cdots = -\frac{(r_1^t - r_2^t) r_2}{(r_1 - r_2)^t d_1} \\ &= -\frac{r_2^t r_2}{r_1^t d_1} \end{aligned} \tag{5.9}$$

dado que

$$r_1^t r_2 = 0 = r_2^t d_1$$

y además $r_1^t d_0 = 0$.

Ahora

$$\begin{aligned} \gamma_1^2 &= \frac{r_2^t r_2}{r_1^t d_1} \\ &= \frac{r_1^t r_2}{r_1^t (r_1 + \gamma_0^1 d_0)} \\ &= \frac{r_2^t r_2}{r_1^t r_1 + \gamma_0^1 r_1^t d_0} \end{aligned}$$

y como $r_1^t d_0 = 0$, resulta

$$\gamma_1^2 = \frac{r_2^t r_2}{r_1^t r_1} \tag{5.10}$$

así, si tomamos a γ_1^2 de esta forma, se tiene finalmente que

$$d_2 = r_2 + \gamma_1^2 d_1$$

resulta conjugado de d_0 y d_1 y como se observa d_0, d_1 y d_2 han sido construidos a partir de r_0, r_1 y r_2.

Veamos ahora el caso general:

Teorema 5.1.1 *Sean*

$$\begin{aligned} d_0 &= -r_0 \\ d_1 &= r_1 + \gamma_1^1 d \\ &\vdots \\ d_k &= r_k + \gamma_{k-1}^k d_{k-1} + \cdots + \gamma_1^k d_1 + \gamma_0^k d_0 \end{aligned}$$

donde $x_k = x_{k-1} + \delta_{k-1} d_{k-1}$ *minimza a* $f(x)$ *a lo largo de la recta* $l_k : x_{k-1} + \delta_{k-1} d_{k-1}$ *y* $r_k = -\nabla f(x_k) = b - Ax_k$*, entonces* r_{k-1} *es* A*-conjugado a* $d_0, d_1, \cdots, d_{k-1}$.

Demostración. Si $k = 1$, por la proposición anterior se tiene el resultado. Supongamos entonces que

r_k es A-conjugado de $d_0, d_1, \cdots, d_{k-2}$. Pd r_{k+1} es A-conjugado de $d_0, d_1, \cdots, d_{k-1}$.

Al igual que antes:

$$\begin{aligned} d_i^t A r_{k+1} &= (\frac{x_{i+1} - x_i}{\alpha_i})^t A r_{k+1} \\ &= (\frac{x_{i+1}^t A - x_i^t A}{\alpha_i}) r_{k+1} \\ &= (\frac{x_{i+1}^t A - b^t + b^t - x_i^t A}{\alpha i}) r_{k+1} \\ &= \frac{(Ax_{i+1} - b)^t - (Ax_i - b)^t}{\alpha_i} r_{k+1} \\ &= \frac{[(Ax_{i+1} - b) - (Ax_i - b)]^t}{\alpha_i} r_{k+1} \\ &= \frac{(r_i - r_{i+1})^t r_{k+1}}{\alpha i} \end{aligned}$$

ahora dado que

$$\begin{aligned} d_i &= r_i + \gamma_{i-1}^i d_{i-1} + \cdots + \gamma_1^i d_1 + \gamma_0^i d_0 \\ d_{i+1} &= r_{i+1} + \gamma_{k-1}^{i+1} d_{k-1} + \cdots + \gamma_1^{i+1} d_1 + \gamma_0^{i+1} d_0 \end{aligned}$$

de estas expresiones se tiene que r_i y r_{i+1} son combinaciones lineales de $d_0, d_1, \cdots, d_{i+1}$ y como se sabe que $r_{k+1}^t d_i = 0$ para $i = 0, 1, \cdots, k$

$$\begin{aligned}
&\Longrightarrow \quad r_{k+1}^t r_i = r_{k+1}^t r_{i+1} = 0 \text{ si } i < k-1 \\
&\Longrightarrow \quad d_i^t A r_{k+1} = 0 \text{ para } i = 1, 2, \cdots, k-1.
\end{aligned}$$

que es lo que queríamos probar. ∎

El resultado anterior nos permite generar las direcciones d_i de una forma sencilla, dado que si r_{k+1} es A-ortogonal a $d_0, d_1, \cdots, d_n$ basta sumarle un múltiplo de d_k para que r_{k+1} sea A-ortogonal a d_k, de donde, resulta directo tomar

$$d_{k+1} = r_{k+1} + \gamma_k^{k+1} d_k$$

en general

$$d_i = r_i + \gamma_{i-1}^i d_{i-1} \text{ para } i = 1, 2, ..., n-1 \tag{5.11}$$

la cual es bastante simple, pues sólo se requiere conocer de la dirección anterior.

Ahora con respecto a γ_{i-1}^i, se tiene que:

$$\begin{aligned}
0 &= d_{i-1}^t A d_i = d_{i-1}^t A(r_i + \gamma_{i-1}^i d_{i-1}) \\
&= d_{i-1}^t A r_i + \gamma_{i-1}^i d_{i-1}^t A d_{i-1} \\
&\Rightarrow \quad \gamma_{i-1}^i = -\frac{d_{i-1}^t A r_i}{d_{i-1}^t A d_{i-1}} = -\frac{(\frac{x_i - x_{i-1}}{\alpha_i})^t A r_i}{(\frac{x_i - x_{i-1}}{\alpha_i})^t A d_{i-1}} \\
\gamma_{i-1}^i &= -\frac{(x_i - x_{i-1})^t A r_i}{(x_i - x_{i-1})^t A d_{i-1}} = -\frac{(x_i^t A - x_{i-1}^t A)^t r_i}{(x_i^t A - x_{i-1}^t A)^t d_{i-1}} \\
&= -\frac{(x_i^t A - b^t + b^t - x_{i-1}^t A)^t r_i}{(x_i^t A - b^t + b^t - x_{i-1}^t A)^t d_{i-1}} \\
&= -\frac{[(b - A x_{i-1})^t - (b - A x_i)^t] r_i}{[(b - A x_{i-1})^t - (b - A x_i)^t] d_{i-1}} \\
&= -\frac{(r_{i-1}^t - r_i^t) r_i}{(r_{i-1}^t - r_i^t) d_{i-1}} = -\frac{r_{i-1}^t r_i - r_i^t r_i}{r_{i-1}^t d_{i-1} - r_i^t d_{i-1}}
\end{aligned}$$

y como $r_i^t d_{i-1} = 0$ y $r_i^t r_{i-1} = 0$,

$$\begin{aligned}
\gamma_{i-1}^i &= \frac{r_i^t r_i}{r_{i-1}^t d_{i-1}} \\
&= \frac{r_i^t r_i}{r_{i-1}^t (r_{i-1} + \gamma_{i-1}^i d_{i-2})} \\
&= \frac{r_i^t r_i}{r_{i-1}^t r_{i-1} + \gamma_{i-1}^i r_{i-1}^t d_{i-2}} \\
&= \frac{r_i^t r_i}{r_{i-1}^t r_{i-1}}, \text{ es decir} \\
\gamma_{i-1}^i &= \frac{\|r_i\|}{\|r_{i-1}\|} \qquad (5.12)
\end{aligned}$$

puesto que $r_{i-1}^t d_{i-2} = 0$.

Una implementación computacional del método de Gradientes Conjugados tomado de [6] es la siguiente:

```
%Los parámetros a usar en esta función son la matriz A,
%el vector solución b,una aproximación x0,
%el número máximo de iteraciones.
function y = GradConj(A,b,x0,imax)
    epsilon = rand/[exp(rand)*10000000]
    i=0;
    r=b-A*x0;
    d=r;
    Delta=r;
    DeltaNew=r'*r;
    Delta0=DeltaNew;
    while (i < imax)& (DeltaNew > (epsilon)^2*Delta0),
        q=A*d;
        Alfa=(DeltaNew/(d'*q));
        x0=x0+Alfa*d;
        if MOD(i,50)==0
            %input ('si es divisible por 50');%
            r=b-A*x0;
        else
            %input('no es divisible por 50');
            r=r-Alfa*q;
        end;
        DeltaOld=DeltaNew;
        DeltaNew=r'*r;
        Beta=DeltaNew/DeltaOld;
        d=r+Beta*d;
```

```
        i=i+1;
    %display(x0)
    if i>=imax
        input('se excedio el número máximo de iteraciones');
    end
    if (DeltaNew<=(epsilon)^2*Delta0)
        input('el error es suficientemente pequeño');
        error=DeltaNew;
        display(error);
        input('el número máximo de iteraciones fue: ')
        display(i);
    end
end
y=x0;
```

5.2 Aplicaciones y resultados computacionales

De entrada, hemos visto que el método de gradientes conjugados puede usarse para resolver el problema de optimización sin restricciones (1.1), pero también podemos aplicarlo en la resolución del problema de estimación de parámetros lineales vía mínimos cuadrados. En este caso, se trata de resolver

$$\min_x F(x), \;\; F(x) = \|Ax - b\|^2 \tag{5.13}$$

con A matriz de mxn, $m \geq n$, b vector de $\Re^m$.

Si A tiene rango n, [5.13] tiene solución única, la cual puede calcularse resolviendo el llamado sistema de ecuaciones normales

$$A^tAx = A^ty$$

donde A^tA es positiva definida.

Para finalizar discutiremos completo el caso de resolver numéricamente una ecuación diferencial parcial. Tomaremos el caso de la ecuación de calor en una dimensión espacial

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x,t) = K(x)\frac{\partial T}{\partial x}(x,t), \, 0 < x < 1$$

donde $K(x) = 3x + 1$ con condición inicial

$$T(x,0) = (1-x)^2, 0 < x < 1$$

y condiciones de frontera

$$\begin{aligned} T(0,t) &= 1, t > 0 \\ T(1,t) &= 0, t > 0. \end{aligned} \tag{5.14}$$

La idea propuesta es discretizar [5.14] mediante diferencias finitas, usando el esquema de Crank-Nicolson, lo que da lugar a

$$\frac{T_i^{n+1}-T_i^n}{\Delta t}=\frac{\theta K_i\left(T_{i+1}^{n+1}-2T_i^{n+1}+T_{i-1}^{n+1}\right)+(1-\theta)K_i\left(T_{i+1}^{n}-2T_i^{n}+T_{i-1}^{n}\right)}{h^2} \tag{5.15}$$

que para $\theta = 1$ queda como

$$\frac{T_i^{n+1}-T_i^n}{\Delta t}-\frac{K_i\left(T_{i+1}^{n+1}-2T_i^{n+1}+T_{i-1}^{n+1}\right)}{h^2}=0 \tag{5.16}$$

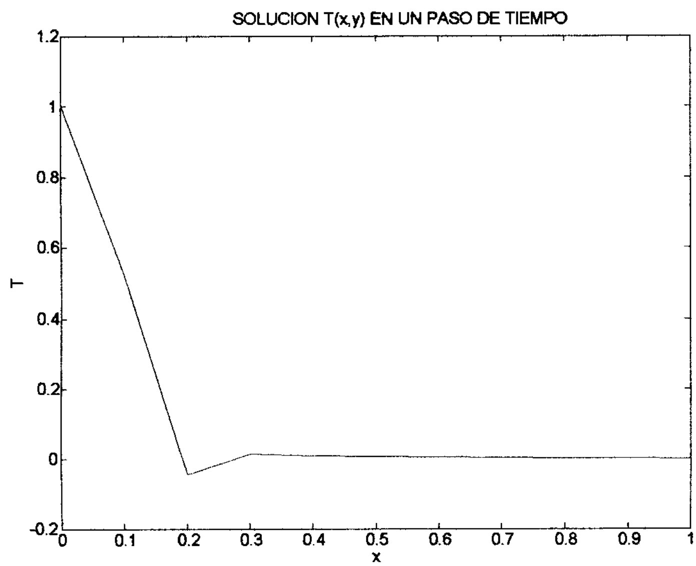
donde

h es el tamaño de paso de la discretización en la variable espacial.
$x_i = ih$; se tomaron valores $i = 1, \dots, 9$.
$K_i = K(x_i)$
$T_i^n = T(x_i, n)$,. n es el n-ésimo paso de tiempo.
Δt es el tamaño de paso de la variable temporal.

Partiendo de [5.16] se llega a

$$-\frac{K_i\left(T_{i+1}^{n+1}-2T_i^{n+1}+T_{i-1}^{n+1}\right)}{h^2}=-\frac{K_i}{h^2}T_{i-1}^{n+1}+\left(2\frac{K_i}{h^2}+\frac{1}{\Delta t}\right)T_i^{n+1}-\frac{K_i}{h^2}T_{i+1}^{n+1}=\frac{T_i^n}{\Delta t} \tag{5.17}$$

para $i = 1, \dots, 9$; (5.17) es, para cada paso n de tiempo, un sistema tridiagonal de ecuaciones algebraicas lineales, cuya solución es solución numérica de (5.14) en el tiempo n, lo que gráficamente puede verse como



Capítulo 6

Conclusiones y comentarios finales

Hemos dado una visión del método de gradientes conjugados que, esperamos, cumpla los propósitos didácticos que nos propusimos. También hemos mostrado su importancia en la resolución de varios problemas relevantes en el ámbito de las matemáticas aplicadas.

Algunos aspectos que quedaron pendientes son:

1. El uso de precondicionadores para acelerara la convergencia, cuestión que resulta vital cuando se tratan problemas de grandes dimensiones.

2. La adaptación del método al caso general de optimización sin restricciones, donde f no tiene por que ser cuadrática.

Estas y otras cuestiones pueden consultarse en los textos especializados que se incluyen en la bibliografía.

Capítulo 7

Bibliografía

[1] Gill, P.E. Murray, W. and Wright, M. H., **Practical Optimization,** Academic Press, 1981, USA.

[2] Hanselman, Duane and Littlefield, Bruce, **Numerical Linear Algebra and Optimization**, Vol. 1, Adisson Wessley, 1991, USA.

[3] Hanselman, Duane and Littlefield, Bruce, **The Student Edition of Matlab,** Version 5, User's Guide, Prentice Hall, 1997, USA.

[4] Kelley, C.T., **Iterative Methods for Linear and NonLinear Equations**, SIAM, 1995, USA.

[5] Luenberg, David G., **Introduction to Linear and NonLinear Programming**, Adisson Wesley, 1973, USA.

[6] Shewchuck, Jonathan R., **An Introduction to the Conjugated Gradient Method Withouth the Agonizing Pain**, Carnegie Mellon University, 1994, USA.

[7] Jalote, Pankaj, **An Integrated Approach to Software Ingeneering,** Springer Verlag, 1991, USA

[8] Sommerville, Jan, **Software Engineering**, Adisson Wesley, 1996, USA.

[9] Kelley, C.T., **Iterative Methods for Optimization, Series: Frontiers in Applied Mathematics**, 18, SIAM, 1999, USA.

[10] Strang, Gilbert, **Algebra Lineal y sus Aplicaciones**, Adisson Wesley Iberoamericana, Segunda Edición, 1990.

[11] Marsden, Jerrold E. and Tromba, Anthony J., **Cálculo Vectorial,** Fondo Educativo Interamericano, 1986.

[12] Nakamura, Soichiro, **Análisis Numérico y Visualización Gráfica con Matlab**, Prentice Hall, Primera Edición.

[13] Eisenhart, Luther P., **Coordinate Geometry**, Dover Publications, Inc., USA, 1996.